

Ar H3

ArH_3^+

1987

А 16 Б1303. Вращательная спектроскопия высокого разрешения слабосвязанных ионных кластеров: ArH_3^+ , ArD_3^+ . High-resolution rotational spectroscopy of weakly bound ionic clusters: ArH_3^+ , ArD_3^+ . Boogey M., Bolvin H., Demuyck C., Destombes J. L. «Phys. Rev. Lett.», 1987, 58, № 10, 988—991 (англ.)

На миллиметровом и субмиллиметровом спектрометре в обл. частот 182—185 и 330—407 ГГц измерены вращат. спектры двух ионов слабосвязанного кластера, ArH_3^+ (I) и ArD_3^+ (II), в основном колебат. состоянии. Ионы кластеров генерировали в тлеющем разряде с использованием продольного магн. поля. Анализ МВ-спектра II выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом квартичного центробежного искажения. Вращат. постоянные I и II, соотв., равны (МГц): $A=1309230$ и $655137(4615)$, $B=30962,29(81)$ и $16541,08(82)$; $C=30137,67(81)$ и $16076,43(83)$. Полученные МВ-данные отнесены к плоской структуре кластера с атомом Ar, лежащим на оси симметрии треугольного фрагмента H_3^+ на расстоянии 2,384 Å при $r(H-H)=0,876$ Å.

С. Н. Мурзин

М.Н.

4

х. 1987, 19, N 16

ArH_3^+

10m 26065

1987

106: 185165f High-resolution rotational spectroscopy of weakly bound ionic clusters: trihydroargon(1+), trihydro-d₃-argon(1+) (ArH_3^+ , ArD_3^+). Bogey, M.; Bolvin, H.; Demuynck, C.; Destombes, J. L. (Lab. Spectroscop. Hertzienne, Univ. Lille 1, 59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *Phys. Rev. Lett.* 1987, 58(10), 988-91 (Eng). The 1st high-resoln. study of weakly bound cluster ions is reported. The millimeter- and submillimeter-wave rotational spectra of ArH_3^+ and ArD_3^+ were obsd. in a magnetically confined, liq.-N-cooled glow discharge and a partial mol. structure was derived from their anal. ArH_3^+ appears to be planar, with the Ar atom lying on a symmetry axis of the H_3^+ equilateral triangle, 2.38 Å from the H_3^+ centroid. Splitting of some of the lines is strong evidence for tunneling motion.

спектр
высокого
разрешен.

⊗ ⊕ ArD_3^+

с. А. 1987, 106, № 24.



ArH_3^+

DM 27977 1987

4 Л230. Структура и колебательные частоты иона ArH_3^+ и его изотопомеров. The structure and vibrational frequencies of the ArH_3^+ ion and its isotopomers. Simandiras Emmanuel D., Gaw Jeffrey F., Handy Nicholas C. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 3, 166—174 (англ.)

Представлены результаты ab initio расчетов структурных параметров и колебательных частот слабосвязанных ионных кластеров ArH_3^+ , ArD_3^+ , ArHD_2^+ , ArDH_2^+ . Расчеты выполнены во 2-м порядке теории возмущений, развитой Моллером — Плессетом, с учетом корреляции электронных состояний атомов по методу конфигурац. взаимодействия и методу связанных парных ф-ций (Ahlrchs R. et al. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, 890). Приведены значения гармонич. частот и постоянных ангармоничности для основных колебаний рассмотренных ионных кластеров. Для кластера ArH_3^+ определены интенсивности основных колебательных полос. Библ. 27.

В. К.

М.П.

(12) A

с/р. 1988, 18, № 4

ArH_3^+

Om. 27 977

1987

9 Б1096. Строение и частоты колебаний иона ArH_3^+ и его изотопомеров. The structure and vibrational frequencies of the ArH_3^+ ion and its isotopomers. Simandiras E. D., Gaw J. F., Handy N. C. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 3, 166—174 (англ.)

В 4 различных базисах методом ССП и по теории возмущений Меллера-Плессета 2-го порядка найдены координаты стационарных точек потенциальной Пв, частоты гармонич. колебаний (ω), интенсивности колебаний в ИК-спектре и (в приближении ССП) коэф. ангармоничности и колебат.-вращат. взаимодействия для иона ArH_3^+ . В наименее полном базисе (двухэкспонентном с ~~поляризац.~~ ф-циями) величины ω вычислены также с учетом электронной корреляции методами конфигурац. взаимодействия и функционала связанных пар.

В. Г. Соломоник

М.А.

X. 1988, 19, 19

ArH_3^+

(*Om. 27977*)

1987

108: 82329z The structure and vibrational frequencies of the trihydroargon(1+) (ArH_3^+) ion and its isotopomers. Simandiras, Emmanuel D.; Gaw, Jeffrey F.; Handy, Nicholas C. (Chem. Lab., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 141(3), 166-74 (Eng). Ab initio study of ArH_3^+ , ArD_3^+ , ArHD_2^+ , and ArDH_2^+ was made. Structures and harmonic frequencies are reported at the 2nd-order Moeller-Plesset (MP2) level of theory using large basis sets. SCF anharmonic corrections are also reported. CI-single and double excitations and coupled pair functional calcs. with the smallest of the basis sets used are used to refine further the MP2 harmonic frequencies. The most intense IR vibrations are the ν_2 (a_1 , H_3^+ bend) and ν_3 (a_1 , intermol. $\text{Ar}\dots\text{H}$ stretch), for which the fundamental vibrations obtained by combining MP2 harmonic and SCF anharmonic corrections are 1819 and 395 cm^{-1} .

см. кн. 108, N 10

(43)

ArD_3^+



ArHD_2^+ , ArDH_2^+

C.A. 1988, 108, N 10.

ArH_3^+

1988

19 Б1280. Туннельное движение в ArH_3^+ и изотомерах из анализа их вращательных спектров. Tunneling motion in ArH_3^+ and isotopomers from the analysis of their rotational spectra. B o g e y M., Bolvin H., Demuynck C., Destombes J. L., Van Eijck B. P. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 7, 4120—4126 (англ.)

На миллиметровом и субмиллиметровом спектрометрах в обл. частот 129—402 ПГц с точностью 30—150 МГц измерены вращат. спектры пяти изотопич. образцов ионных кластеров, ArH_3^+ , ArD_3^+ , си- ArD_2H^+ , аси- ArH_2D^+ и аси- ArD_2H^+ , в основном колебат. состоянии. В соответствии с ранее выполненными первыми измерениями для ArH_3^+ («Phys. Rev. Lett», 1987, 58, 988) установлено, что комплексы обладают плоской структурой с атомом Ar, расположенным на оси симметрии треугольника H_3^+ . Анализ спектров выполнен с учетом квадратичного центробежного искажения и внутреннего вращения группы H_3^+ . Для описания внутреннего вращения использована многопараметрич. модель, к-рая позволила добиться лучшего согласования эксперим. и расчетных данных по сравнению с долужесткой моделью.

С. Н. Мурзин

М. П.

X. 1988, 19, N 19

ArH_3^+

1988

10 Л144. Туннелирование в ArH_3^+ и его изотопомерах из анализа их вращательных спектров. Tunneling motion in ArH_3^+ and isotopomers from the analysis of their rotational spectra. B o g e y M., Bolvin H., Demuynck C., Destombes J. L., Van Eijck B. P. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 7, 4120—4126 (англ.)

В миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах спектра измерены частоты линий вращательных переходов в различных H/D изотопомерах плоского ионного кластера ArH_3^+ . Большинство наблюдаемых линий расщеплены за счет внутреннего туннельного вращения группы H_3^+ в плоскости кластера. С использованием модели жесткий волчок — жесткий остов, а также с учетом плоских деформационных движений волчка и остова проведен расчет расщеплений линий вращательных переходов. Учет деформационных плоских движений улучшает результаты расчета, однако для более точ-

М.А.

ф. 1988, 18, N 10

ного количеств. совпадения, по-видимому, необходимо учитывать также неплоские внутренние туннельные переходы в кластере, высота барьера для которых по известным из литературы квантовохимич. расчетам такого же порядка величины, как и высота барьера для плоских туннельных переходов.

В. А. Морозов

ArH_3^+

1988

Destombes J. L.,
Demuyneck C., et al.

(see n.)

oözop

Phil. Trans. Roy.

Soc. London, 1988,

A 324, ● N 1578, 147-162.

(see H_3O^+ ; iii)

$Ar_2H_3^+$

[Om. 28667]

1988

Escribano R., Bunker P.R.,

внутрен-
транзит,
трансам-
терит

Chem. Phys. Lett., 1988,
143, N 5, 439-444.

$Ar \cdot H_3^+$

(OM 29200)

1988

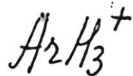
Destombes J. L.,

Dernyurek C; et al.

на спектр,
Франция.
поэтому.

Phil. Trans. Roy.
Soc. London, 1988,

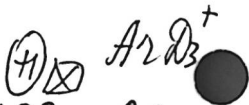
A 324, N 1578,
147 - 162.



1988

(Vaporization)

108: 175996e Rotation and internal rotation in trihydroargon(1+) (ArH_3^+ and ArD_3^+). Escribano, R.; Bunker, P. R. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 143(5), 439-44 (Eng). A semirigid bender model Hamiltonian was developed to calc. the rotation and internal-rotation energy levels of ArH_3^+ and ArD_3^+ . This Hamiltonian was used to fit the data reported in M. Bogey et al. (1987). From the results of the fitting, other rotation and internal l-rotation states were predicted that are amenable to exptl. study. The ArH_3^+ torsional and Ar-H_3^+ stretching fundamental bands were predicted at $\sim 450\text{--}550\text{ cm}^{-1}$; these bands will interact as a result of c-type Coriolis coupling.

C. A. 1988, 108, N 20

ArH_3^+

DM

28667

1988

№ 6 Д61. Вращение и внутреннее вращение в ионах ArH_3^+ и ArD_3^+ . Rotation and internal rotation in ArH_3^+ and ArD_3^+ . Escríbano R., Bunker P. R. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 143, № 5, 439—444 (англ.)

В работе (Bogey M., et al «Phys. Rev. Lett.», 1987, 58, 988) получены вращательные спектры высокого разрешения для кластерных ионов, состоящих из «треугольных» ионов H_3^+ (D_3^+) и атома аргона, лежащего в их плоскости на оси симметрии 2-го порядка. С помощью этих данных осуществляется подгонка числовых значений параметров модельного гамильтониана таких ионов (используются модель полужесткой деформируемой молекулы). При этом рассматриваются только вращательные степени свободы и внутреннее вращение. По остальным 5 колебат. степеням свободы проведено усреднение. С полученным таким образом модельным гамильтонианом проведен расчет частот вращательных и торсионных линий, а также обусловленного внутренним вращением расщепления этих линий.

М.А.

⊠ (41)

Ф. 1988, 18, N 6

ArH_3^+

0M28667

1988

№ 12 Б1102. Молекулярное и внутреннее вращение в ArH_3^+ и ArD_3^+ . Rotation and internal rotation in ArH_3^+ and ArD_3^+ . Escríbano R., Bunker P. R. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 143, № 5, 439—444 (англ.)

Предложен модельный гамильтониан для описания вращат. спектров высокого разрешения нежестких плоских молек. систем ArH_3^+ (I) и ArD_3^+ (II), в к-рых атом Ar взаимодействует с ионом H_3^+ (D_3^+), имеющим конфигурацию равностороннего треугольника. В наиболее выгодной конфигурации I или II Ar расположен на оси симметрии C_2 , проходящей через один из атомов H. Результаты решения соотв. уравнения Шредингера с гамильтонианом, включающим подгоночные параметры, к-рые характеризуют взаимное вращение Ar и H_3^+ и внутр. вращение катиона, сопоставлены с эксперим. значениями вращат. частот. Предсказанные частоты торсионного перехода $1 \leftarrow 0$ в I и II равны 540 и 377 см^{-1} ; предсказанные частоты вал. кол. $\text{Ar}-(\text{H}_3^+)$ и $\text{Ar}-(\text{D}_3^+)$ 480 и 350 см^{-1} . Э. Д. Герман

М.А.

(7) X

X. 1988, 19, N 12

ArD_3^+

ArH_3^+

Om 34804

1990

Wistendahl B, Saastad
O.W. et al;

comprehensive Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Processes 1990,

98, N2, 167-77.

Ion/Molecule Reactions.

in a mixture of Ar and
 H_2 : High Pressure Mass
Spectrometry and Quantum
Chemical Calculations.

Ar.H₃⁺

1998

129: 142028w Sub-millimeter-wave spectroscopy of the Ar.H₃⁺ and Ar.D₃⁺ ionic complexes. Bailleux, S.; Bogey, M.; Bolvin, H.; Civis, S.; Cordonnier, M.; Krupnov, A. F.; Tretyakov, M. Yu; Walters, A.; Coudert, L. H. (Laboratoire Spectroscopie Hertzienne, Centre d'Etudes Recherches Lasers Applications, Universite Sciences Technologies Lille, F59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 190(1), 130-139 (Eng), Academic Press. A study of the sub-millimeter-wave spectra of the ionic complexes Ar.H₃⁺ and Ar.D₃⁺ is presented. These complexes were produced in a neg. glow elec. discharge, in mixts. of Ar with either H₂ or D₂. About 80 new transitions were assigned in the 485-680 GHz frequency range using a sub-mm-wave spectrometer built with Russian made backward wave oscillators (BWO) sources. These measurements enabled one to observe the 1st K_a = 2 transitions for Ar.H₃⁺ and the 1st K_a = 3 transitions for Ar.D₃⁺. Analyses of the line frequencies were carried out using an IAM-like approach, which accounts for the large amplitude internal rotation motion displayed by both species. Insights into the geometry of the intermediate configuration for this large amplitude motion were gained. (c) 1998 Academic Press.

(cyrillic
checkmark)

C.A. 1998, 129, 11