

As F

B9-2035-III

B9-5034-III

1949

Do (AsF)

Portner C.

Helv. Chem. Acta, 1949, 32, 1438-
1441 (*paper*)

The calculation of bond energies

C.A., 1949, 8764bc

*ссылка
гк*

1965

AsF

Cueop

411

Assignment of two band systems to the new radical AsF. Guy Pannetier, Pascal Deschamps, and Jean Guillaume (Fac. Sci., Paris). *Compt. Rend.* 261(17)(Groupe 7), 3396-7(1965)(Fr). Two band systems of a new radical, AsF, appear in a Schueler-type discharge in AsF₃ vapor. Only relative vibrational analysis was possible because of the absence of isotopic bands. Values for the 3 states implicated are: $B^3\Pi: \omega_e' \cong 930 \text{ cm.}^{-1}$; $A^3\Pi: \omega_e' \cong 400 \text{ cm.}^{-1}$; and $X^3\Sigma: \omega_e'' \cong 680 \text{ cm.}^{-1}$ C. R. Ward

BQ-5581-III

C.A. 1966. 64.7

9095a

AsF
201

5 Д250. Отнесение двух систем полос новому радикалу AsF. Pannetier Guy, Deschamps Pascal, Guillaume Jean. Attribution de deux systèmes de bandes à un nouveau radical: AsF. «C. r. Acad. sci.», 1965, 261, № 17, 3396—3397 (франц.)

В разряде в парах трехфтористого мышьяка наблюдаются две системы полос в области 2050—5500 Å, отвечающие двухатомной молекуле. Первая (2050—2300 Å) содержит около трех десятков полос, сгруппированных в триплеты, предварительный колебательный анализ которых выявляет существование двух подсистем. Вторая система (3150—4750 Å) содержит около 250 полос. Сопоставление с колебательными уровнями PF, SBF и BiF позволяет отнести упомянутые системы соответственно, переходам $B^3\Pi-X^3$ и $A^3\Pi-X^3$ в молекуле AsF. Приблизительные значения констант $\omega_e' \approx 930 \text{ см}^{-1}$ ($B^3\Pi$); $\omega_e' \approx 400 \text{ см}^{-1}$ ($A^3\Pi$) и $\omega_e'' \approx 680 \text{ см}^{-1}$ ($X^3\Sigma$) уточняются при использовании изотопов.

ф. 1966 .58

As-F
chest

Dobbie R.C., Cavell R.G. 1967

Inorg. Chem., 6, N8, 1450

Фрагментация тригтор-
метиларсен. - соединений
в массе-спектрометре.

(Сил. C-As-соед.) III

AsF

1967

17304d A band system attributed to AsF. Guy Pannetier, Pascal Deschamps, and Jean Guillaume (Fac. Sci., Paris). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. C* 265(14), 710-11(1967)(Fr). In the spectrum produced by AsF₃ vapor in an Ar atm. in an elec. discharge, 12 new bands were observed: 3 weak bands at 2291.75, 2328.42, and 2366.01 Å.; and 9 strong bands at 2353.24, 2391.89, 2398.86, 2431.65, 2439.4, 2472.28, 2480.45, 2513.62, and 2552.67 Å. The latter 2 form a doublet with 130 cm.⁻¹ spacing. These bands are attributed to the AsF radical. FBJF

C.A. 1968. 68. 4

AsF

1987

8 Б103. Новая система полос AsF. Pannetier
Guy, Deschamps Pascal, Guillaume Jean
Observation d'un nouveau système de bandes et attribu-
tion à AsF. «C. r. Acad. sci.», 1967, С 265, № 14, 710—711
(франц.)

Исследован спектр электрич. разряда в парах AsF₃.
В интервале 2290—2530 А обнаружена новая система
12 полос. Эта система полос отнесена к переходам
A³Π—X³Σ и B³Π—X³Σ радикала AsF. Для частоты
основного колебания AsF найдено $\omega_e \geq 680 \text{ см}^{-1}$.

М. Р. Алиев

и.и.

Л. 1988. 8

AsF

475

м.и.

XIII

г.и.

предиссоц.

1971

3 Б179. Колебательный анализ синглетных систем AsF. Yee K. K., Liu D. S., Jones W. E. Vibrational analysis of the singlet systems of AsF. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 35, № 1, 153—157 (англ.)

Сфотографированы в области 2290—2910 Å спектры испускания AsF (микроволновый разряд в парах AsF₂). В спектрах идентифицированы 4 системы полос, отнесенные к переходам (в скобках указаны частоты в см⁻¹ (0—0)-полос): $d^2\Pi - a^1\Delta$ 43623,2 $e^1\Pi - a^1\Delta$ 41674,0, $d^1\Pi - b^1\Sigma$ 37033,0 и $e^1\Pi - b^1\Sigma$ 35078,2. Дана систематизация полос $e^1\Pi - a^1\Delta$ в схеме Деландра; оценка величин ω_e и $\omega_e x_e$ состояния $a^1\Delta$ дает соотв. 694,0 и 3,1 см⁻¹. Отсутствие высших колебательных уровней в обоих ¹Π-состояниях свидетельствует о предиссоциации. Б. В. Рассадин

X. 1971. 1

AsF

XIII - 75

1970

M.H.

(30338r) Vibrational analysis of the singlet systems of arsenic fluoride. Yee, Kim Kuo; Liu, D. S.; Jones, William Ernest (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, Nova Scotia). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 35(1), 153-7 (Eng). Four singlet band systems in the region 2290-2910 Å attributed to the AsF mol. have been obsd. in a microwave discharge through flowing AsF₃ vapor. These are tentatively assigned to transitions involving 2 upper ¹Π and the lower *a*¹Δ and *b*¹Σ states. Vibrational anal. gives values for ω_e of 694.0 cm⁻¹ and ω_{ex} of 3.1 cm⁻¹ for the *a*¹Δ state, while interfering bands did not allow calcn. of consts. for *b*¹Σ. The absence of bands involving upper vibrational levels of the 2 ¹Π states indicates that predissocn. occurs in these states.

RCKP

C.A. 1970.73.6

AsF

1971

u.u.

39544z Analysis of the absorption spectrum and of two new singlet systems of arsenic monofluoride. Chatalic, Andre; Danon, Nejat; Pannetier, Guy (Lab. Cinet. Chim., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. C* 1971, 273(15), 874-7 (Fr). Rotational anal. of the emission bands of the $c'^1\pi-a'\Delta$ system (3500-4000 Å) led to characterization of the $c'^1\pi$ singlet state of AsF: ω_e 399.0, $x_e\omega_e$ 1.4, B_e 0.2932, $D \cong 7 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$. A 2nd system, $c'^1\pi-b^1\Sigma$ was detected on the high-frequency side of the preceding system; sepn. of corresponding lines was 6597 cm^{-1} . On the short wavelength side, the $c^1\pi-b^1\Sigma$ and $d^1\pi-b^1\Sigma$ systems were obsd. The $B_1-X^1\Sigma$ system was identified by absorption in the far uv; the values ω_e 673 and $x_e\omega_e$ 3 cm^{-1} were detd. for the ground state, $^3\Sigma^-$.

C.A. 1972. 76.8

AsF A. Chatolic, N. Danon, C. Pannetier 1971
Comptes Rendus 1971, Ser C, 273, N 15
изучили абсорб. спектры и 2-ю новую систему
систем малое AsF.

Смесь в вакуумной емкости из электроуглерода
"REOSC" или UVGR с дисперсией 1 Å/мм и 3,5 Å/мм.
Источники - разрядная трубка Ультрамер с He₂ или H₂.
Вр. анализ испускаемой малой системы с'17-а'Δ в
области 3500-4500 Å позволил найти дис. новую сист-
много состояния AsF (в см⁻¹: ω₂ = 399,0; ω₂х₂ = 1,4; 13₂ = 0,293;
D ≈ 7 · 10⁻⁷). Другая новая система находится в об-сти
2360-2860 Å и относится к  перекресту с'Π-в'ε.
В абсорбции для исследованной группы систем полос
в области ниже 2200 Å перекрест 13₁-х₁ ≤.

Верхний составный этот элемент имеет
даль составный $3\frac{1}{2}$ или 317. Для основного состав-
ны найденно $W_e = 673$ и $W_{ex} = 3\text{см}^3$.

AsF

XIII - 1579

1971

3 Б122. Анализ вращательной структуры четырех синглетных систем полос молекулы AsF. Liu D. S., Yee K. K., Jones W. E. The rotational analysis of four singlet systems of AsF. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 38, № 3, 512—523 (англ.)

М. П.

Исследованы спектры излучения и поглощения молекулы AsF. Идентифицирована вращательная структура полос 1—0, 0—0, 1—1, 0—1, 1—2, 1—3, 0—3 и 1—4 системы перехода $C^1\Pi - a^1\Delta$ (2350—2530 Å), полос 1—0, 0—0 и 0—1 системы перехода $C^1\Pi - b^1\Sigma^+$ (2780—2910 Å), полос 0—0 и 0—1 системы перехода $d^1\Pi - a^1\Delta$ (2290—2405 Å) и полосы 0—1 системы перехода $d^1\Pi - b^1\Sigma^+$

2, 1979, 3.

(268—2755 Å). Обнаружено Λ -удвоение линий с высокими I и преддиссоциация уровней с $V'=1$ и $I \approx 75$ в системе $C-a$. Определены значения колебательно-вращательных постоянных для всех 4 состояний AsF. Равновесные значения энергетич. термов T_e , частоты колебания ω_e и межъядерного расстояния r_e равны: $T_e=6596(b)$, $41\,680(C)$, $43\,628(d)$, $\approx 7000\text{ см}^{-1}(a)$, $\omega_e=694(a)$, $691(b)$, $808\text{ см}^{-1}(C)$, $r_e=1,7325(a)$, $1,7267(b)$, $1,6452(C)$ и $\geq 1,6452\text{ Å}(d)$.
 М. Р. Алнев

AsF

XIII - 1579

1971

(1 Д366.) Вращательный анализ четырех синглетных систем AsF. Liu D. S., Yee K. K., Jones W. E. The rotational analysis of four singlet systems of AsF. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 38, № 3, 512—523 (англ.)

Выполнен полный анализ вращательной структуры спектров испускания систем $d^1\Pi - a^1\Delta$, $C^1\Pi - a^1\Delta$, $d^1\Pi - b^1\Sigma^+$ и $C^1\Pi - b^1\Sigma^+$ молекулы AsF, сфотографированных с высоким разрешением. Кроме эмиссионных спектров, возбуждаемых при пропускании паров AsF₃ через ВЧ-разряд, исследованы спектры поглощения систем $d^1\Pi - a^1\Delta$ и $C^1\Pi - a^1\Delta$, полученные методом импульсной спектроскопии. Приведены волн. числа вращательных линий 17 полос и молекулярные константы для состояний $a^1\Delta$, $b^1\Sigma^+$, $C^1\Pi$ и $d^1\Pi$. Библ. 9. И. Дворников

М. П.

Ф, 1972, 12

AS F

XIII - 1579

1971

56100y Rotational analysis of four singlet systems of arsenic fluoride. Liu, D. S.; Yee, K. K.; Jones, William Ernest (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, Nova Scotia). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 38(3), 512-23 (Eng). Four singlet band systems in the region 2290-2910 Å attributed to the AsF mol. have been photographed both in emission and absorption at high dispersion. A complete rotational anal. of each band has been performed and the mol. consts., are calcd. for each of the 4 states, $c^1\Delta$, $b^1\Sigma$, $c^1\Pi$ and $d^1\Pi$, involved in the transitions.

u. n.

spaces.

accused

P. A. 1971. 45. 8

AsF

XIII - 2344

1972

(u. n) 68152w Spectrum of arsenic monofluoride in the near vacuum ultraviolet and near infrared regions. Liu, D. S.; Jones, W. E. (Chem. Dep., Dalhousie Univ., Halifax, Nova Scotia). *Can. J. Phys.* 1972, 50(12), 1230-51 (Eng). Three singlet-triplet transitions, $b^1\Sigma^+ - X^3\Sigma^-$, $c^1\Pi - X^3\Sigma^-$, and $d^1\Pi - X^3\Sigma^-$, and two $^3\Pi - X^3\Sigma^-$ transitions attributed to AsF, were found in the regions 1900-2300 and 7000-7400 Å. The vibrational anal. for the obsd. systems and the rotational anal. of the singlet-triplet transitions are complete. The anal. shows that the ground state $X^3\Sigma^-$ belongs to Hund's case *c* with a spin coupling const. λ of $\sim 70 \text{ cm}^{-1}$. The anal. of the obsd. transitions and a discussion of the relative position and mol. configurations of the obsd. states are presented.

C.A. 1972.77.10

AsF

(u.n.)

omnium 1823

XIII - 24/13

1973

101930k Electronic states with $\sigma\pi$ configuration of arsenic monofluoride. I. $c'^1\Pi$ state. Chatalic, Andre; Danon, Nejat; Iacocca, Diodoro; Pannetier, Guy (Lab. Cinet. Chim., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1973, 70(11-12), 1600-7 (Fr). Two singlet-singlet transitions $c'-a$ and $c'-b$, and 1 singlet-triplet transition $c'-X$ of the AsF radical were studied at 2900-5600 Å. The vibrational and rotational anal. showed that the upper state common to the 3 transitions is $a'^1\Pi$ state. The mol. consts. in this state are $\omega_e = 399.38 \text{ cm}^{-1}$; $\omega_e x_e = 1.34 \text{ cm}^{-1}$; $\omega_e y_e = -0.015 \text{ cm}^{-1}$; $B_e = 0.2932 \text{ cm}^{-1}$; $\alpha_e = 0.0018 \text{ cm}^{-1}$; $D_e = 6.2 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$, and $r_e(\text{Å}) = 1.948$.

C.A. 1974. 80. N18

AsF

оттиски 1823
XIII - 2413

1973

6 Д397. Изучение электронных состояний конфигурации $\sigma\pi$ радикала AsF. Ч. I. Состояние $c'^1\Pi$. Chatalic André, Danon Néjat, Iacocca Diodoro, Pannetier Guy. Etude des états électroniques du monofluorure d'arsenic de configuration $\sigma\pi$. I. L'état $c'^1\Pi$. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1973, 70, № 11-12, 1600-1607 (франц.; рез. англ.)

Изучены полосы излучения трех систем переходов радикала AsF с общим верхним состоянием: $c''^1\Pi-b^1\Sigma^+$ (4500-5600 Å), $c'^1\Pi-a'^1\Delta$ (3500-4500 Å) и $c'^1\Pi-X^3\Sigma^-$ (2900-3100 Å). В результате анализа колебательной и вращательной структуры полос получены значения молекулярных констант состояния $c'^1\Pi$ (в см^{-1}): $\omega_e = 399,38$, $\omega_e x_e = 1,34$, $\omega_e y_e = -0,015$, $B_e = 0,2932$, $\alpha_e = 0,0018$, $D_e = 6,2 \cdot 10^{-7}$ и $r_e = 1,948$ Å. Обсуждается электронная структура радикала AsF в состояниях c' , a , b и X . Библ. 9. В. А.

Ф. 1974 N 6

оттиски 1823

1973

AsF

13 Б158. Об электронных состояниях монофторида мышьяка с конфигурацией sl . I. Состояние $c'^1\Pi$. Chatalic André, Danon Néjat, Iacossa Diodoro, Pannetier Guy. Etude des états électroniques du monofluorure d'arsenic de configuration sl . I. L'état $c'^1\Pi$. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1973, 70, № 11—12, 1600—1607 (франц., рез. англ.)

Получен спектр AsF в разрядной трубке Шюлера с разрешением 200 000 в области 2900—5600 Å. Изучены три системы полос: две синглет-синглетных $c'-a$ и $c'-b$ и одна синглет-триплетная $c'-X$. Проведен анализ вращательной структуры полос до $v'=8$ и анализ колебательной структуры. Показано, что состояние c' относится к типу $^1\Pi$. Определены постоянные этого состояния (в cm^{-1}): $T_e=32479,48$; $B_e=0,2932$; $\alpha_e=0,0018$; $D_e=6,2 \cdot 10^{-7}$; $\omega_e=399,38$; $\omega_e x_e=1,34$; $\omega_e y_e=-0,015$. Уточнены постоянные состояний $a^1\Delta$ и $b^1\Sigma^+$. Приведены волновые числа линий вращательной структуры.

Д. И. Катаев

Спектр

и.п.

24/13

XIII

X. 1974 N 13

1973

AsF

20 Б172 Д. Анализ спектров испускания и поглощения монофторида мышьяка. Спектры поглощения моногалогенидов сурьмы. Danon N. Nejat. Analyse des spectres d'émission et d'absorption du monofluorure d'arsenic. Spectres d'absorption des monohalogénures d'antimoine. Thèse doct. sci. phys. Univ. Paris, 1973. 176 p., ill. (франц.)

м.п.

Диссертация, посвященная изучению спектров испускания и поглощения AsF в области 3000—5500 Å. Выполнен анализ колебательных и вращательных тонких структур переходов $c'^1\Pi - a^1\Delta$, $c'^1\Pi - b^1\Sigma^+$, $A^3\Pi - X^3\Sigma^-$ и $c'^1\Pi - X^3\Sigma^-$; рассмотрены также спектры AsF в дальней УФ-области.

Б. В. Рассадин

α. 1975 № 20

1973

HSF

Hase H.L.Schweig A.

Theor.Chim.Acta 1973

31(3),215-20(Eng)

2e, 2, 7

CNDO 2(complete neglect

of differential overlap)

method for third-low molecules.

(em. GeHx; III)

ASF

Liu D.S

1973

Jones W.E.

(min.) "Can. J. Phys"
1972, 50, N12, 1230-51.

Снимок ASF в ближней вакуумной
ультрафиолетовой и ближней И.К. области.

P.M.X 1973 N15165.

1973

AsF:

(AsF: AsF⁺ AsF²⁺)
обсуждение

XIII - 2569

Л.А.

Ес

До

Т.г.г.

Р1974

N7

7 Д119. Монофторид мышьяка (AsF, ³Σ): энтальпия диссоциации, потенциал ионизации, сродство к электрону, дипольный момент, спектроскопические постоянные и термодинамические функции идеального газа, полученные из хартри-фоковских молекулярно-орбитальных расчетов. O'Hare P. A. G., Batana Alicia, Wahl Arnold C. Arsenic monofluoride (AsF, ³Σ): dissociation enthalpy, ionization potential electron affinity, dipole moment, spectroscopic constants, and ideal gas thermodynamic functions from a Hartree-Fock molecular orbital investigation. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6495—6501 (англ.)

Методом Рутана рассчитаны точные хартри-фоковские волн. ф-ции и энергии основного состояния (³Σ)AsF для ряда межатомных расстояний. Полученная потенц. кри-

ФДТ.гф. ФДиски AsF =

1825
См. индекс

вая была проанализирована методами Морзе и Дан-
хэма, найденные значения спектроскопич. постоянных
использованы для расчета термодинамич. ф-ций иде-
ального газа для ряда т-р в интервале 0—1000° К. На-
иболее вероятное значение $D_0^0(\text{AsF})$ равно $4,2 \pm 0,2$ эв.
Расчетные значения равновесного межатомного рас-
стояния, потенциала ионизации, сродства к электрону,
дипольного и квадрупольного моментов равны, соот-
ветственно 1,72 Å; $9,4 \pm 0,2$ эв; 1,1 эв; 1,75 ед. Дебая ($\text{As}^+ \text{F}^-$) и $-2,44 \cdot 10^{-26}$ эл.-ст. ед.·см². Кратко обсуждаются характеристики ионов AsF^+ , AsF^{2+} и AsF^- .

В. И. Барановский

лен
ониро
асде

AsF

XIII - 2569

1973

13 Б24. Монофторид мышьяка (AsF , $^3\Sigma$). Расчеты методом Хартри — Фока энтальпии диссоциации, потенциала ионизации, сродства к электрону, дипольного момента, спектроскопических постоянных и термодинамических функций в идеальном газовом состоянии. O'Hare P. A. G., Batana Alicia, Wahl Arnold C. Arsenic monofluoride (AsF , $^3\Sigma$): dissociation enthalpy, ionization potential, electron affinity, dipole moment, spectroscopic constants, and ideal gas thermodynamic functions from a Hartree—Fock molecular orbital investigation. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6495—6501 (англ.)

Ограниченным методом Хартри — Фока проведен расчет основного состояния $^3\Sigma$ молекулы AsF при 5 межъядерных расстояниях (2,9—3,5 ат. ед., включая точку хартри-фоковского минимума 3,25 ат. ед.). Базисный

отмеч 1825

X 1974. N13

⊗ (+2) нест. иониз.
SF; BiF

набор состоял из 20 слейтеровских функций s -, p -, d - и f -типа для As и 10 функций s -, p -, d -типа для F. Электронная конфигурация основного состояния ${}^3\Sigma: KKLM(z\sigma)^2(y\sigma)^2(x\sigma)^2(\omega\pi)^4(\nu\pi)^2$. При $R=3,25$ ат. ед. проведен также расчет ${}^2\Pi$ -состояний ионов AsF^+ и AsF^- ; электронные конфигурации ионов получены удалением или добавлением $\nu\pi$ -электрона. Для AsF приведены значения полной энергии, дипольного и квадрупольного моментов и орбитальных энергий при всех расстояниях, а также спектроскопич. постоянные, полученные как с потенциалом Морзе, так и на основе процедуры Данхэма. В приближении жесткий ротатор — гармонич. осциллятор вычислены термодинамич. функции идеального газового состояния AsF в области t -р $0-1000^\circ K$. Энтальпия диссоциации $D_0(AsF)$ оценена равной $4,2 \pm 0,2$ эв, вертикальный Пт ионизации — 9,4 эв, сродство к электрону — 1,1 эв. Даны оценки для первого и второго Пт ионизации SbF и BiF . Н. Ф. Степанов

31011.7329
Ph, Ch, TE, MGU

Библиотек 1227

ASF

30063

1973

(e)
Vesth L.

K p. N 31011.7328

VIII - 5743

Hund's coupling case (c) in diatomic molecules. II. Examples.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1973,
6, N 8, 1484-1496

(англ.)

0981

1/6 H, III
сч

957 963

974

ВИНИТИ

ASF

ommunic 2155 1974

Barrow R.F

Yee K.K.

"Acta phys. Acad. Sci. Hung."
Hung.

1974, 35, n 1-4, 239-46

The 3I^{T} -ground states of...

#13-4447

1974

AsF

17 Б166. Изучение электронных состояний монофторида мышьяка с конфигурацией $\sigma\pi$ II. Состояние $A^3\Pi$.
Chatalic André, Danon Néjat, Pannetier

Guy. Etude des états électroniques du monofluorure d'arsenic de configuration $\sigma\pi$ II. L'état $A^3\Pi$. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1974, 71, № 2, 243—254 (франц., рез. англ.)

Электр.
Состояние

Спектр монофторида мышьяка в ближней УФ-области содержит множество полос, затененных в длинноволновую сторону. Большинство этих полос в интервале 3250—4400 Å относятся к переходу $A^3\Pi-X^3\Sigma^-$. Анализ

X. 1974 N17

колебательной и вращательной структуры позволил распределить эти полосы по четырем подсостояниям: $A^3\Pi_2-X(1)$, $A^3\Pi_1-X(0^+)$, $A^3\Pi_0^--X(1)$ и $A^3\Pi_0^+-X(1)$. Определены предварительные значения постоянных нового состояния $A^3\Pi$ (в см.⁻¹): $T_e(A^3\Pi_2)=27\,151$; $T_e(A^3\Pi_1)=26\,347$; $T_e(A^3\Pi_0^+)=25\,754$; $T_e(A^3\Pi_0^-)=25\,718$; для $A^3\Pi_2\omega_c=412,28$; $\omega_c x_c=1,43$; $\omega_c y_c=0,031$; $B_e=0,2918$; $\alpha_e=0,0020$; $D_e\approx 6\cdot 10^{-7}$. Уточнены постоянные основного состояния. Сообщ. 1 см. РЖХим, 1974, 13Б158.

Д. И. Катаев

AsF

XU-4447

1974

(u.n)

126377y Electronic states of σx -configuration arsenic monofluoride. II. $A^2\Pi$ state. Chatalic, Andre; Danon, Nejat; Pannetier, Guy (Lab. Cinet. Chim., Univ. Paris VI, Paris; Fr.). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1974, 71(2), 243-54 (Fr). The spectrum of AsF has numerous red-shaded bands in the near uv. Most of these belong to the $A^2\Pi-X^2\Sigma^-$ transition. Vibrational and rotational anal. classified these bands into 4 sub-systems: $A^2\Pi_2-X(1)$, $A^2\Pi_1-X(0^+)$, $A^2\Pi_0-X(1)$, and $A^2\Pi_0^+-X(1)$. The vibrational and rotational consts. of the new state $A^2\Pi$ were detd. for the 1st time. The sepn. of the components of the states A and X and the values of the A doubling consts. are interpreted by interactions between electronic states.

C.A. 1974. 8D. v22

AsF

м.н.

Ф. 5. 1974-5-7

ф. 1974. МБ

8 Д455. Изучение электронных состояний AsF конфигурации $\sigma\text{П}$. Ч. II. Состояние $\text{A}^3\text{П}$. Chatalic André, Danon Néjat, Pannetier Guy. Etude des états électroniques du monofluorure d'arsenic de configuration $\delta\text{л}$. II. L'état $\text{A}^3\text{П}$. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1974, 71, № 2, 243—254 (франц.; рез. англ.)

Выполнен анализ колебательной и вращательной структуры полос с красным оттенком в спектре излучения молекулы AsF , расположенных в области 3000—3600 Å и принадлежащих переходу $\text{A}^3\text{П} \rightarrow \text{X}^3\Sigma^-$. Вследствие расщепления состояний на отдельные компоненты полосы образуют 4 подсистемы $\text{A}^3\text{П}_2 \rightarrow \text{X}(1)$, $\text{A}^3\text{П}_1 \rightarrow \text{X}(0^+)$, $\text{A}^3\text{П}_0^- \rightarrow \text{X}(1)$ и $\text{A}^3\text{П}_0^+ \rightarrow \text{X}(1)$. Впервые определены колебательные и вращательные константы и величины расщепления между компонентами состояния $\text{A}^3\text{П}$ и приведена таблица их значений. Аномальные величины констант Λ -удвоения объяснены взаимодействием между электронными состояниями. Дана сводная таблица параметров всех известных к настоящему времени электронных состояний молекулы AsF и проведено сопоставление с изоэлектронными молекулами NF , PF и BiF . Библ. 23. Ч. I см. РЖФиз, 1974, 6Д397. В. А.

1974

(+3)

☒

AsF
SbF

XIII - 2612

1974.

15 Б164. Спектры высокого разрешения радикалов AsF и SbF для определения основного $X^3\Sigma^-$ и низших возбужденных состояний. Jones W. E., Liu D. S., Wang D. K. W., Prevot Colin R. High resolution spectra of the radicals AsF and SbF characterization of the ground $X^3\Sigma^-$ and low lying excited states. «Ber. Bunsen ges. phys. Chem.», 1974, 78, № 2, 201 (англ.)

Выполнен анализ эмиссионного спектра молекул AsF и SbF в ближней ИК-области спектра, возбужденной в МВ-разряде в парах AsF₃ и в порошкообразном SbF. В обоих случаях наблюдаются переходы между низшими возбужденными электронными состояниями и основным электронным состоянием. Для этих состояний определены постоянные. Основные состояния обеих молекул характеризуются случаем Гунда с. Для AsF и SbF определены постоянные спин-спинового взаимодействия соотв., равные 69,7 и 399,1 см⁻¹. Обсуждена связь изученных переходов с другими известными переходами AsF и SbF.

С. Н. Мурзин

ч.н.

ж. 1974/15

(+1) ☒

40402.3632

TE, Ch

AsF

XIII-262
50701 02

1974

~~51.125~~

Jones W.E., Liu D.S., Wang D.K.W., Prevot
Colin R. High resolution spectra of the
radicals AsF and SbF characterization of
the ground $X^3\Sigma^-$ and low lying excited
states. "Ber. Bunsenges. phys. Chem.",
1974, 78, N 2, 201 (англ.)

(см. на обороте)

0076

061 062

0069

ВИНИТИ

Фамилия референта	
Заказ реферата	
Гонорар. Выработка	Референт
	Редактор
	Редактор
Виза редактора	

High Resolution Spectra of the Radicals AsF and SbF Characterization of the Ground $X^2\Sigma^-$ and Low Lying Excited States

By W. E. JONES, D. S. LIU, and D. K. W. WANG,
 Department of Chemistry, Dalhousie University, Halifax,
 Nova Scotia, Canada
 and F. PREVOT and R. COLIN

Laboratoire de Chimie Physique Moléculaire,
 Université Libre de Bruxelles, Brussels, Belgium

Considerable information on the two molecules AsF and SbF has been provided by the near infrared emission spectrum produced by a microwave discharge through AsF₃ vapour and over SbF powder. In both cases, transitions between low lying excited electronic states and the ground electronic state have been observed. The analysis of these transitions has permitted the determination of the constants of the states involved and has led to a better understanding of the ultraviolet spectra of AsF and SbF. The constants determined for the ground states are:

	AsF	(cm ⁻¹)	SbF	
	X_1O^+	X_1I	X_1O^+	X_1I
B_e	0.3648	0.3709 ^a)	0.278 ^b)	0.2800 ^a)
$a_e \cdot 10^3$	2.4	2.8		2.3
$D_e \cdot 10^7$	3.9	5.15		2.7
$q_0 \cdot 10^4$		3.4		3.6
ω_e	658.78	685.50	609.0	612.6
$\omega_e x_e$	3.12	2.95	2.6	2.6
r_e (Å)	1.7462	1.7319	1.922 ^b)	1.9151

^a) Average of B^+ and B^+ .

^b) Values for $v = 0$ level.

In both molecules the ground states belong to Hund's case "c" and have spin-spin interaction constants λ of 69.7 and 399.1 cm⁻¹ for AsF and SbF, respectively.

The analysis of the near infrared transitions and their relationship to other known transitions for AsF and SbF is discussed.

по рубрик.

Категория оплаты

а в набор

ASF (a.n.) - XIII-3148

1925-

Danon N. N.,

Thèse doct. sci phys. Univ. Paris, 1973,
176 p. (91 p).

Analyse des spectres d'émission et
d'absorption du monofluorure
d'arsenic. Spectres d'absorption des
monohalogénures d'antimoine.

Pu Xu, 1975, 205172 D. 10 (9)

AsF⁺

on muon 3590.

1975

As-F (2) Pabst R. E.; Meador
(A. P.) R. G.; Margrave J. L.;
Franklin J. L.

(Y) Chem. Department, Rice Univ.
Houston, Texas 77001.

Energetics of the ionization and
fragmentation of AsF₃ by electr. impact.

AsF

3 Д146. Вероятности колебательных переходов и r -центроиды систем $c^1\Pi-b^1\Sigma^+$ и $c^1\Pi-a^1\Delta$ спектра AsF. Sinha S. P., Chatterjee C. L. Vibrational transition probabilities and r -centroids of ($c^1\Pi-b^1\Sigma^+$) and ($c^1\Pi-a^1\Delta$) systems of AsF. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1975, 13, № 5, 345—347 (англ.)

Приводятся численные значения колебательных и вращательных постоянных и равновесных расстояний r_e в состояниях $c^1\Pi$, $b^1\Sigma^+$ и $a^1\Delta$ молекулы AsF. Эти постоянные использованы для вычисления факторов Франка—Кондона и r -центроид для систем полос $c^1\Pi-b^1\Sigma^+$ и $c^1\Pi-a^1\Delta$, $v'=0\div 4$, $v''=0\div 4$. Факторы Франка—Кондона вычислены без учета и с учетом изменения значений r_e ; r -центроиды определены по методу квадратного ур-ния и по графич. методу. Приведено использованное в расчете асимптотич. выражение для γ -ф-ции. Найдено, что (0, 0)-полоса наиболее интенсивна и интенсивность быстро убывает в (v', v'') -прогрессиях, r -центроиды уменьшаются с возрастанием длины волны.

М. А. Ковнер

спектр

(м.п.)

1975
566

X 1976 X3

AsF (u.n.) XIII-2649

1977

Chatalic A., Danon N., Pannetier G.,
J. Chim. phys. et phys.-chim. Biol.,
1977, 74(2), 243-54.

Electronic states of $\sigma\pi$ -configuration
arsenic monofluoride. II. $A^3\Pi$ state.

C.A. 1974. 80. N22. 126377y. 10

Ⓟ

AsF

#4-18051

1977

M.N.

87: 124853w The ultraviolet band systems of arsenic monofluoride: rotational analysis of the $e0-X_{21}$ and $f0+-X_{21}$ transitions. Vasudev, R.; Jones, W. E. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, Nova Scotia). *Can. J. Phys.* 1977, 55(4), 337-43 (Eng). The band system of AsF tentatively designated as $B-X_{21}$ by D. S. Liu and W. E. Jones (1972) consists of 2 transitions, designated as $e0-X_{21}$ and $f0+-X_{21}$. The Ω doubling in the $c1$ state, which is due to the proximity of the $e0-$ and $f0+$ states, is interpreted in terms of a model describing the interactions.

C.A. 1977, 87 n 16

AsF

45-18051

1977

У8 Д431. УФ-системы полос AsF: вращательный анализ переходов $e0^- - X_{21}$ и $f0^+ - X_{21}$. Vasudev R., Jones W. E. The ultraviolet band systems of arsenic monofluoride: rotational analysis of the $e0^- - X_{21}$ and $f0^+ - X_{21}$ transitions. «Can. J. Phys.», 1977, 55, № 4, 337—343 (англ.; рез. франц.)

М.н. Вновь проанализированы спектрограммы поглощения и испускания молекул AsF, полученные ранее Лайу и Джонсоном (см. РЖФиз, 1972, 12Д326). Анализу подвергнуты полосы поглощения 0—0 и 1—0 и испускания 0—1 и 1—4 перехода, идентифицированного первоначально как $B - X_{21}$. Показано, что система полос, идентифицированная как $B - X_{21}$, в действительности обусловлена двумя переходами $e0^- - X_{21}$ и $f0^+ - X_{21}$. С помощью модели, описывающей взаимодействия состояния $c1$ с $e0^-$ и $f0^+$, интерпретировано Ω -удвоение в состоянии $c1$.

Ф. 1977
№ 8

AS F

1978

Kristiansen P.

Can. J. Phys, 1978, 56, N10,
1399-1401

M.N.

coll. SeO - III

ASF

Commuc 9752 | 1979

krubee
nommes.
megru

Ramakrishna T. V.
et al.

Indian J. Pure Appl.
Phys., 1979, 17, 842-44

AsF

1979

Rao T. V. R. et al

Do
homocyc
Kpueae

Indian J. Pure Appl
Phys., 1979, 17(12), 842-4

(see. NF; III)

AsF

Ommuck 14506

1981

Cis. noem.
pacrem.

Rao T.V.R., Reddy R.R.,
et al.,

Acta Phys. Acad. sci.
hung., 1981, 50, N4,

● 305-311.

FAJ

[om. 27890]

1987

Kaparevich T. B.,

(Ae)

И. физ. химии, 1987,
61, N 8, 2070-2074.



AzF

(OM 34377)

1990

Fink E. H., Kruse H. et al.

Acta Phys. Hung. 1990,
67, N 1-2, 67-72.

11. High Resolution Fourier-
Transform ● spectra of the
 $a^1\Delta(g) \rightarrow X^3\Sigma(g), b^1\Sigma^+(g) \rightarrow X^3\Sigma(g)$

and $b^1\Sigma^+(g) \rightarrow a^1\Delta(g)$ systems
of O_2 , SO , S_2 and isoelectronic
molecules in the NIR Region.

AsF

10M-36724

1992

Рестерско А.М., Озерский В.И.
и др.,

жесткоп.
строение,
расчет

2д. структурн. химии,
1992, 33, № 4, 135-137.

AsF

1993

$X^3\Sigma$, $A^3\Pi$,
(*рометиз. квал.*)

120: 89440k Use of relativistic core potentials to compute potential curves and lifetimes of low-lying states of arsenic fluoride. Liebermann, Heinz-Peter; Boustani, Ihsan; Rai, Sachchida N.; Alekseyev, Aleksey B.; Hirsch, Gerhard; Bunker, Robert J. (Bergische Universität, Gesamthochschule Wuppertal, Fachbereich 9, Theoretische Chemie, Gausstrasse 20, D-42097 Wuppertal, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 214(3-4), 381-90 (Eng). The effects of spin-orbit coupling and other relativistic interactions on the electronic structure of the As fluoride mol. are analyzed with the aid of ab initio CI calcs. based on effective core potentials. The computed results for potential curves, vibrational wavefunctions and radiative transition probabilities between various low-lying states of AsF are compared with analogous data for the fluorides of the heavier Group VA atoms, Sb and Bi. Measured spin-orbit splittings for the $X^3\Sigma^-$ and $A^3\Pi$ λ -s states are accurately reproduced in the relativistic CI and computed trends in the parallel and perpendicular b_0^+-X transition probabilities for this group of fluorides agree with the observations of R. Colin et al. (1982). Inclusion of a semi-diffuse s orbital on the F atom is important in describing the σ^* MO occupied in the $A^3\Pi$ and $c^1\Pi$ λ -s states. Computed elec. dipole moments indicate that the latter states are more strongly polarized (neg. F) than their lower-energy counterparts with π^2 electronic configurations.

C.A. 1994, 120, N8

AsF

1995

Latifzadeh Lida,
Balasubramanian K.

(20)

Chem. Phys. Lett. 1995,
237 (3, 4), 222-8.

(cur.  AsF₂; II)

1996

F: AsF

P: 3

16B125. Спектроскопические константы и кривые потенциальной энергии AsF. Spectroscopic constants and potential energy curves of AsF / Latifzadeh Lida, Balasubramanian K. [Chemical Physics Letters] // Chem. Phys. Lett. - 1996. - 250, N 2. - С. 171-177. - Англ.

Неэмпирическими методами ССП в полном активном пространстве и КВ в различных вариантах рассчитаны спектроскопические константы ($R[e]$, $T[e]$, $\nu[e]$, $w[e]$, $D[e]$) и кривые потенциальной энергии для 21 электронного состояния AsF. Рассчитанные константы хорошо согласуются с эксперим. данными. Библ. 31.

РЖХ 1997

AsF

1996

/ 124: 214664x Spectroscopic constants and potential energy curves of AsF. Latifzadeh, Lida; Balasubramanian, K. (Department of Chemistry and Biochemistry, Arizona State University, Tempe, AZ 85287-1604 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 250(2), 171-7 (Eng). Spectroscopic consts. and potential energy curves of 21 electronic states of AsF are computed using the complete active space SCF (CASSCF) followed by 1st- and 2nd-order CI (FOCI, SOCI) and multi-ref. singles and doubles CI (MRSDCI) methods. The computed spectroscopic consts. agree with the exptl. values for the obsd. states.

M. A. ,
ncop. trans

C. A. 1996, 124, N 16

AsF

24 бегд. 29.
соед., М.Н.,
Геоф. памена

Latifzadeh L., Balasubra - 1996
manian

Chem. Phys. Lett.; 1996, 250,
52, p. 174-177.

Spectroscopic constants and
potential energy curves of
● AsF.