

ASY₃



Buzin

2841-III

AsJ₃ (D)

1939

Buzin K. B.

Burkov K. V.

J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.)

1939, 9, 561-5

"Molecular spectra and the
thermal dissociation of antimony and
arsenic iodides"

C.A., 1939, 9141¹

to u

Еотъ ф. р.

14 - 3297

C_2Cl_2 , CO_2 , CS_2 , AsJ_3 (*мор. гл.*) ¹⁹⁴¹

Finbak C., Hassel O.

Arch. Math. Naturvidenskab 45,
NO 3, 8 pp. (1941)

"Molecular - structure ...

C.A., 1942, 6408

10

R 313-17

1942

AsJ₃ (τ , $\angle$)

Pinbak C., Hassel O.

Molekülstrukturbestimmungen
einiger einfachen Verbindungen auf Grund
von Abstandsverteilungsfunktionen die
Elektroneninterferenzaufnahmen nach dem
sektorerfahren berechnet wurden.

1942, Archiv Math. og Naturvidenskab
45, 45

Kelley. bull. 592,
c. 331

10

1955

R. S. Mulliken

УАСВ 77, 88

Углы связи в молекулах
типа АЗУЗ и NH₃ и их
производных.

АЗУЗ $< 100^{\circ} 5'$

PJ_3 , AsJ_3 (ν_i^{III} , -1688 см⁻¹, сильная мембраны) | 1956

Stammreich H., Forneris R., Tavares K.,

J. Chem. Phys., 1956, 25, 13, 580 (aurea).

Спектры конденсационного рассеяния
и силовые поправки PZ_3 и AsZ_3 .

PLUP, 1957, W13, 43753

 1×2

1958-11

ASJ₃ (γ ; *curb. nocur*)

1956

Von der Kelen G.P., Herman H.A.

Bull. Soc. Chim. Belges, 1956, 65,

n 3-4, 350-351 (*gas phase*).

Les spectres Raman des halogé-
nures de la mono- et de la diméthyl-
ordine

Ch., 1956, n 2,
3573



1963

As I₃

Venkateswarlu K.,
Rajalakshmi K. V.

T. 8.

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1963, 1, n11, 380.

Синово море Юри-Бреда
и прилежа. св. во. Издания
нов мо. редакция тома X I₃.

см. I.

As Γ_3

Nagarajan Y.

1964

средние
амплитуды
колебания

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1964, 2, N 8,
237-41.

ВФ-3703-III

Средние амплитуды колеба-
ния. Периодические
функции некоторых триа-
лообразных элементов
у члеников. (сое. Γ_3) III

AsJ

3

ВФ - 4142 - III

1965

средняя
аллиот.
калеб.

✓ 5 Д144. Среднеквадратичные амплитуды и термодинамические функции некоторых пирамидальных тригалогенидных соединений группы Vб. Manley T. R., Williams D. A. Mean square amplitudes and thermodynamic functions of some group Vb pyramidal trihalides. «Spectrochim. acta», 1965, 21, № 9, 1467—1470 (англ.)

Вычислены среднеквадратичные амплитуды тепловых колебаний для молекул AsBr_3 , AsJ_3 , SbJ_3 , BiBr_3 и BiJ_3 . Для этих же молекул в приближении идеального газа в интервале t -р $100\text{—}1500^\circ\text{K}$ при атмосферном давлении определены теплоемкость, энтальпия, свободная энергия и энтропия.

И. Яковлев

(См. Также AsBr_3) II

ф. 1966. 58

17

1965

AsI₃

SbI₃

BiI₃

BiBr₃

(U.H. Cuenp)

(u)

The far-infrared spectra of some Group Vb trihalides. T. R. Manley and D. A. Williams (Rutherford Coll. Technol., Newcastle-upon-Tyne, Engl.). *Spectrochim. Acta* 21(10), 1773-83 (1965)(Eng). The far ir absorption spectra of the Group Vb trihalides AsI₃, SbI₃, BiBr₃, and BiI₃ were examd. in the region 500-50 cm.⁻¹ by using both grating spectrometers and a Michelson far-ir interferometric spectrometer. The spectra obtained by the 2 methods are compared and fundamental vibration frequencies are assigned. Force const. were calcd. by using a 4-const. potential function. RCSO

C.A. 1965. 63.12
15729 g

18

V 5240

1966

~~02203735~~

AsI₃, GaI₃ (Geomet.str, sil.post)

Morino Y., Ukaji T., Ito T.

Bull Chem.Soc.Japan, 1966, 39, N1, 71-78.

Molecular structure determination by gas
electron diffraction at high temperatures II
Arsenic triiodide and gallium triiodide.

RX., 1966, 17545

J,

F

Dec. 536

AsI₃

19

Koser G.W., et al.

J. Amer. Chem. Soc., 89,
N 14, 3396.

Барьеры инверсии пирамидальных молекул типа XU_3 и родственных плоских молекул, содержащих группу XU .

(соед. CH_3^-)

1968

As T_3
(крит.)

Gadri A., Decamps E.
Herbervat J. - P.

U.K.

J. chim. phys. et phys.-chim.
biol., 65, n° 5, 959.

XII-223

Спектры поглощения
в далекой ИК-области
молекулярных кристал-
лов и различных
травяных масел

кпр.

(сч. SnT_4) III

As I₃

XIII - 293

1968

ν_i

(p-p, i.b.)

111647 Vibrational spectra of arsenic triiodide. Hooper, M. A.; James, D. W. (Univ. Queensland, St. Lucia, Aust.). *Aust. J. Chem.* 1968, 21(10), 2379-83 (Eng). The Raman spectrum of AsI₃ was detd. in soln. in CS₂ and in the solid state. For the soln. the assignment of Stammreich, Forneris, and Tavares was confirmed by polarization studies. In the solid state assignment of the spectrum is only possible on the basis of space group symmetry, and an earlier assignment based on point group C_{3v} is in error. The solid state frequencies (R $\bar{3}$ symmetry) are $\nu_1(A_g)$ 185 cm.⁻¹, $\nu_2(A_g)$ 75 cm.⁻¹, $\nu_3(A_u)$ 201 cm.⁻¹, $\nu_4(A_u)$ 102 cm.⁻¹, $\nu_5(E_g)$ 205 cm.⁻¹, $\nu_6(E_g)$ 50 cm.⁻¹, $\nu_7(E_u)$ 216 cm.⁻¹, $\nu_8(E_u)$ 74 cm.⁻¹. RCGW

C.A. 1968. 69. 26

As J₃

спектры

л. 1969. 16

XIII - 243

1968

16 Б202: Колебательные спектры трийодида мышьяка. Ноорер М. А., James D. W. Vibrational spectra of arsenic triiodide. «Austral. J. Chem.», 1968, 21, № 10, 2379—2383 (англ.)

Получены спектры КР крист. AsJ_3 и его насыщенного р-ра в CS_2 ; в спектрах выполнены поляризационные измерения. Спектры КР получены на приборе LRI (при лазерном возбуждении). Выполнен теоретико-групповой анализ спектра AsJ_3 (симметрия кристалла $R\bar{3}$ с двумя молекулами в элементарной ячейке) и произведено отнесение наблюдаемых частот к различным типам колебаний. Согласно эксп. данных и теор. интерпретации подтверждает выбранную симметрию крист. AsJ_3 . Рассмотрено также поведение частот симм. вал. кол. трийодов V группы элементов (XY_3) при изменении отношения масс M_X/M_Y . Для крист. AsJ_3 частота колебания $\nu_1(\text{Ag}) = 185 \text{ см}^{-1}$ (в растворе $\sim 216 \text{ см}^{-1}$). А. Бобров

AsI₃

спектр

XIII - 293

1968

7 Д336. Колебательные спектры трийодида мышьяка. Норрег М. А., James D. W. Vibrational spectra of arsenic triiodide. «Austral. J. Chem.», 1968, 21, № 10, 2379—2383 (англ.)

Изучены спектры комб. рас. AsI₃ в растворе в CsS₂ и в твердом состоянии. Показано, что данные для растворов хорошо согласуются с измерениями поляризованных спектров. Установлено, что отнесение основных колебательных полос для кристаллич. состояния необходимо проводить на основе теории групп пространственной, а не точечной симметрии. Библ. 10. Резюме

Ф. 1969. 7Д

1969

As Y3

Cyber S.Y. uor.

J. Molec. Struct.

ср-кв
анализ.
качеств.

1969, 4, ~5-6, 341

(Cell. NF3) III

См. уст $H_3(N, P, As, Sb)$; NHF_2 XII 330
 $D_3(N, P, As, Sb)$; ND_2F_2 1969
 $F_3(N, P, As, Sb)$; $Br_3(N, P, As, Sb)$
 $Cl_3(N, P, As, Sb)$; $I_3(N, P, As, Sb)$

King Shin - Tung, Overend f.

J. Phys. Chem., 1969, 73,

N2, 406-12/10

10

10

AsJ₃

1970

1 Б264. Спектры комбинационного рассеяния монокристаллов AsJ₃ и порошков SbJ₃ и BiJ₃. Kiefer W. Raman-Spektren eines AsJ₃-Einkristalls und von SbJ₃-und BiJ₃-Kristallpulvern. «Z. Naturforsch.», 1970, 25a, № 7, 1101—1107 (нем., рез. англ.)

спектр-КР

Получены спектры КР монокристалла AsJ₃, его р-ра и спектры КР порошкообразных SbJ₃ и BiJ₃. Спектры возбуждались линией λ 6943 А рубинового лазера, работающего в квазинепрерывном режиме, и регистрировались фотоэлектрически, в спектрах AsJ₃ выполнены поляризац. измерения. Произведено отнесение наблюдаемых частот к различным типам внутренних и внешних (кол. крист. решетки) кол. AsJ₃, SbJ₃, BiJ₃. Кристаллам приписана симм. $R\bar{3}(C_{3i})$ (фактор-группа S_6). При переходе от As к Bi происходит значит. понижение частот почти всех кол. (за исключением вырожденных кол. ν_6, ν_8). А. Бобров.

(+2)

X. 1974. 1

⊗

cur. n, n. n. (PF_3 , PCl_3 , PBr_3 , PI_3 , 1970
XIV 563 AsF_3 , $AsCl_3$, $AsBr_3$, AsI_3)

Rai S. N., Thakur S. N., 13

Austral. J. Chem., 1970, 23, 55, 881-886.
(auri).

Kinematical evaluation of force
constants: application to trihalides
of phosphorus and arsenic.

RuXau, 1970, 23-567

Есть оригинал.

W

⑦

$\text{PF}_3, \text{P}\text{Cl}_3, \text{P}\text{Br}_3, \text{PI}_3,$
 $\text{AsF}_3, \text{AsCl}_3, \text{AsBr}_3, \text{AsI}_3,$
 $\text{SbF}_3, \text{SbCl}_3, \text{SbBr}_3, \text{SbI}_3,$
 $\text{BiF}_3, \text{BiCl}_3, \text{BiBr}_3, \text{BiI}_3$

(и.п.)

13

1971

XIII 2003

Пшеницкий В.С., Годнев И.Н.

Оптика и спектроскопия, 1971,
31, №6, 1027-1029 (русск.)

Посетительные кармашки
взаимодействия гамма-излучения
элементов V группы. 20

№ 1000 0504

12

(Ф)

As₂

Rai S. N.

1971

Thakur S. N.

cell.
room.

Indian J. Pure and
Appl. Phys. 1971, 9, 1
61-62



(Cu. PF₃)II

Fe_3 ; AsFe_3 ; SbFe_3 ; BiFe_3 ; BFe_3 ; XIII 233
 Al_3 ; AsCl_3 ; SbCl_3 ; BiCl_3 ; BCl_3 ; 1972
 PBr_3 ; AsBr_3 ; SbBr_3 ; BiBr_3 ; BBr_3 ; (по ст.
 PI_3 ; AsI_3 ; SbI_3 ; BiI_3 ; BI_3 успро-
сению.
распада

Милонин В.С., Тогиев И.И.

Изв. Всес. ун-в. зав. физ., 1972,
 15, N 12, 141-3 (русск).

PF_3 , PCl_3 , PBr_3 , AsF_3 , AsCl_3 , 1974.
 AsBr_3 , AsI_3 , SbCl_3 , SbBr_3 , SbI_3 XIII 2772
(vi, m.n., termog. q-p-yuu)

Clark R. J. H., Rippon D. M.,
J. Mol. Spectrosc., 1974, 52 (1),
58-71.

Vapor phase Raman spectra. Raman
band contour analyses, Coriolis const.
force const. and values for termog. q-p-yuu
of the trihalides of group V.

C.A. 1974. 81 Nb. 31386g. 10 (7) 15.

40506.8763
TE, Ch, Ph

As I₃

40892 02
материал
сметы

1974
2083

Lee Ting Ho, Rabalais J. Wayne.

Model for spin-orbit interactions with
inclusion of d electrons: applications to
photoelectron spectroscopy.

"J.Chem.Phys.", 1974, 60, N 3, 1172-1176

(англ.)

0103

084 036

- 095

ВИНИТИ

1975

AsI₃AsI₂

13 Б192. Спектроскопия комбинационного рассеяния при высоких температурах. Исследование газообразной системы мышьяк—иод при температурах до 900°. Hillel R., Bouix J., Favre R. Spectroscopie Raman à haute température. Étude du système gazeux arsenic-iodé jusqu'à 900° C. «Bull. Soc. chim. France», 1975, № 11—12, part. 1, 2458—2462, VI (франц., рез. англ.)

С помощью спектроскопии КР ($\lambda=5145$ Å) исследован процесс диссоциации AsI₃ и AsI₃ с примесью As при т-рах 200—900°. Исследуемый образец помещали в запаянную кварцевую ампулу с плоским выходным окошком, к-рую обогревали снаружи, наблюдение вели под углом 90° к возбуждающему лазерному пучку. Одновременно измеряли давление пара в запаянном объеме. Показано, что чистый AsI₃ при т-рах выше 450° разлагается с образованием AsI₂ и I₂. Рассчитаны константы диссоциации для различных т-р. В присутствии мышьяка AsI₃ разлагается с образованием сначала As₂I₄, а затем AsI₂. В обоих случаях имеет также место диссоциация молекул I₂.

А. Бобров



(+1)

(P)

с микр
красочн.
рассеян.
диссоц.
(P)

X/1976 N13

As J3

OMM 4468

1975

As J4

Kulkarni K.S. et al

Judian J. Pure and
Appl. Phys., 1975, 13, N11,
780-2.

(parent
in chg)

(au C73) III

AsI₃

Mohan S., 1976
Thirugnansambadam P.

"Acta Cienc. Indica",
1976, 2(4), 359-63.
(curr.
no curr.)

● $\overline{\text{III}}$
(curr. PF₃)

As J3

* 43-13546

1976

Murrell J N, et al.

(Do J,
'murell')

J Chem Soc Dalton Trans,
1976, N9, 818-22.

(cell PFs; III)

AsBr₃

№ 14845

1976

AsI₃

2 Д305. Фотоэлектронные спектры AsBr₃ и AsI₃.
Peel J. B., Willett G. D. The photoelectron spectra
of arsenic tribromide and arsenic triiodide. «J. Electron
Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1976, 9, № 3, 175—183
(англ.)

Получены HeI-фотоэлектронные спектры AsBr₃ (I) и
AsI₃ (II). Вертикальные потенциалы ионизации I, II
равны (в эв): I — 10,21; 10,73; 10,82; 11,05; 11,56; 11,56;
12,79; 13,58; 13,69; II — 9,00; 9,18; 9,30; 9,97; 10,19;
10,36; 11,44; 12,10; 12,35; 20,43. Фотоэлектронные
спектры интерпретированы при помощи неэмпирич. рас-
четов энергий МО и полуэмпирич. расчетов спин-орби-
тального расщепления. Библ. 14. Ю. В. Чижов.

у. фото-

Д. Стеккер

(+1) A



Р. 1947. №2

AsI₃

AsBr₃

фотоэлектр.
спектр

(+1) X

л. 1977 №3

* 4 - 14845

1976

3 Б93. Фотоэлектронные спектры трибромида и трииодида мышьяка. Peel J. B., Willett G. D. The photoelectron spectra of arsenic tribromide and arsenic triiodide. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1976, 9, № 3, 175—183 (англ.)

При возбуждении источником He-I получены спектры паров AsI₃ и AsBr₃. Интерпретация первых полос спектров затруднена спин-орбитальным взаимодействием. Для интерпретации спектров проведены неэмпирич. расчеты электронной структуры исследованных молекул. Спин-орбитальное расщепление учтено в рамках полуэмпирич. метода. Для обеих молекул предложен след. порядок следования орбиталей 4a₁, 4e, 1a₂, 3e, 3a₁, 2e. Спин-орбитальное расщепление в случае AsI₃ столь велико, что анализ спектров приходится вести в рамках модели симметрии C_{3v}¹.

В. И. Нефедов

As₂I₃

ommuen 5792 1974

matung
J.

Shimanouchi T

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 993-1102.

As I₃

[omitted 7265] 1978.

Bouix y; et al.

Crack
K.P.

y. Raman Spectrosc.

1978, 4 (6), 346-48

(cm. $AsCl_3$; III)

1978

AsI₂-I

(Do)

ср. 1978, N10

10 Д169. Фотодиссоциация молекулярных пучков трийодида мышьяка. Kawasaki M., Bersohn R. Photodissociation of molecular beams of arsenic tri-iodide. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 5, 2105—2108 (англ.)
Проведено измерение распределения по времени пролета фрагментов AsI₂, получающихся при фотодиссоциации молекулярного пучка AsI₃ светом с длинами волн 280 и 300 нм. Фотодиссоциация проводилась лучом лазера на красителях, перпендикулярным молекулярному пучку, а регистрация фрагментов — квадрупольным масс-спектрометром с ионизацией электронным ударом (т. е. фактически регистрировались ионы AsI⁺). На основании измеренного распределения вычислены средние кинетич. энергии фрагментов: 13,5 и 10,5 ккал/моль. Проведен энергетич. анализ процесса фотодиссоциации молекулярного пучка и сделаны следующие выводы: атом йода отрывается в возбужденном ²P_{1/2} состоянии, вращательная энергия фрагмента AsI₂ приблизительно равна его полной поступательной энергии, а колебательное возбуждение фрагмента мало. Для энергии диссоциации связи AsI₂—I получено значение 55,9 ± ±3,0 ккал/моль.
Е. П. Смирнов

Om 3777

AsJ₃

фотодис-
социация

До

18 Б79. Фотодиссоциация в молекулярных пучках триодида арсения. Kawasaki M., Bersohn R. Photodissociation of molecular beams of arsenic tri-iodide «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 5, 2105—2108 (англ.)

На установке со скрещенными лазерным и молек. пучками исследована фотодиссоциация AsJ₃. Нейтр. продукты диссоциации регистрировались с помощью квадрупольного масс-спектрометра с ионным источником электронного удара. Определены распределения по временам пролета (РВП) фрагментов AsJ₂ (I) из измеренных зависимостей токов ионов AsJ⁺ в масс-спектрометре от времени между импульсом лазера с $\lambda = 280$ нм и 300 нм и моментом регистрации ионов. Из РВП определено распределение энергии по поступательным степеням свободы I и средн. поступательная энергия для двух значений λ ; $E = 13,5$ ккал/моль и $E = 10,5$ ккал/моль соотв. В предположении, что диссоциация атома J происходит по направлению связи As—J, показано, что вращательная энергия I близка к его поступательной энергии. Установлено, что средн. колебательная энергия I составляет $3,9 \pm 1,5$ ккал/моль для обеих длин волн. Показано, что образующийся при диссоциации атом J находится в состоянии $^2P_{1/2}$. Из баланса энергий определена энергия связи AsJ₂—J: $D_0 = 55,9 \pm 3,0$ ккал/моль.

Б. Николев

1978
171
37
171
Om

х. 1978, 11/18

AsI₂-I

Im 37171

1978

88: 200996h Photodissociation of molecular beams of arsenic triiodide. Kawasaki, M.; Bersohn, R. (Dep. Chem., Columbia Univ., New York, N. Y.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(5), 2105-8 (Eng). A mol. beam of AsI₃ was photodissocd. at 280 and 300 nm and the time of flight distribution of the AsI₂ fragments was measured. From the broad distributions obsd., av. total fragment kinetic energies of 13.5 and 10.5 kcal/mol were calcd. If the I atom dissocs. along the As-I bond direction, the rotational energy of the AsI₂ fragment is nearly equal to the total translational energy. Arguments are given to show that there is little vibrational excitation of the AsI₂ fragment and that the I atom leaves in the ²P_{1/2} state. The bond energy D₀(AsI₂-I) is 55.9 ± 3.0 kcal/mol.

Do

C.A. 1978, 88, N26

AsI₃

номер 8504

1979

Scharfenberg P.

нб. укр.
паочет

Chem. Phys. Lett.,
1979, 65 (2), 304-309.

Аз 3

1980

взаимосвязь
геометрии и
потенциала
полюсов

Лашинцев Р. Т.
Докл. АН СССР, 1980,
254, №4, 934-8

Сел. NF₃-10

As I₃

(Im. 20331)

1984

Grodzicki M., Walther H.,
Elbel Susanne.

Фотоспектр.
спектрал,
структ.,
У, дипольн.
момент.

Z. Naturforsch., 1984,
B39, N10, 1319-1330.

●
(ср. NH₃ ; III)

As Y₃

[om. 18842]

1984

Xin M., Chow Chiu L.,
et al.

Ромодэлектр.
спект,
раірэі

J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom.,
1984, 33, ● N 2, 93-105.

AsI₃

1988

Sakai Y., Miyoshi E.

J. Chem. Phys. 1988.

vol. 17. 89, N 7, C. 4452-4453.

(ccu.  SBF₃ ; III)

As₃I₃

[OM · 36909]

1992

геометрия,
колл. ам.
расстояние,
ИК и КЭНС;
анал. полн.,
ab initio
расчет

Breidung J., Thiel W.,
J. Comput. Chem.,
1992, 13, N2, 165-176.

As $\mathbb{Z}$

(on 36871)

1992

Завод Н.С.,

М.П. Ал. физ. химии, 1992,
66, N 12, с. 3258-63



(all. PF₃; III)

As I₃

1993

Singh Prem,
Publish A. K.

in. Indian J. Pure and
Appl. Phys. 1993. 31,
N3. C. 193-194.
(cer. BF₃; III)

F: AsI3

P: 3

2001

134:372013 **Density Functional Studies on the Lone Pair Effect of the Trivalent Group (V) Elements: I. Electronic Structure, Vibronic Coupling, and Chemical Criteria for the Occurrence of Lone Pair Distortions in AX₃ Molecules (A=N to Bi; X=H, and F to I).** Atanasov, M.; Reinen, D. Fachbereich Chemie, Philipps-Universitaet und Zentrum fuer Materialwissenschaften, Marburg, Germany. J. Phys. Chem. A (2001), 105(22), 5450-5467. in English.

The energetic, steric, and bonding properties of mols. AX₃ (A = N to Bi; X = H, F to I) are analyzed using d. functional theory. It is found that the "lone pair" in the initial D_{3h} geometry is of central atom pz character for the NX₃ and AH₃ mols., whereas it possesses s symmetry in all other cases - here generally with a strong delocalization toward the ligands. The stabilization of the distorted C_{3v} geometry is due mainly



to covalency effects, whereas steric interaction forces according to the Gillespie-Nyholm model do not seem to play a significant role. The application of the conventional vibronic pseudo Jahn-Teller coupling approach (PJT), here for the $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ transition [$A_1' \otimes (\alpha_2'' + \alpha_1') \otimes A_2''$ interaction], is an appropriate means for inorg. chemists to predict trends for the extent of distortion and for the corresponding energy gain. The vibronic coupling const. and the vibronic stabilization energies, which mainly det. the total $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ energy gain, vary according to the sequences $F > H > Cl > Br > I$ (A: N to Bi), and $N > P > As > Sb > Bi$ (X: H, F), the dependence on A being only small or not present (X: Cl to I). Thus, the hardest mols. are the most susceptible to vibronic coupling, the latter energy being approx. imaged by the hardness difference $\eta(C_{3v}) - \eta(D_{3h})$. A roughly inverse trend is obsd. if the extent of the angular distortion $\tau\alpha$ from D_{3h} to C_{3v} symmetry is considered; here, the softest mols. such as $Sb(Bi)Br_3$ exhibit the largest and NH_3 the smallest deviations from D_{3h} geometry. The different sequences for $\tau\alpha$ are due to the strong influence of the force const., which represents the $C_{3v} \rightarrow D_{3h}$ restoring energy. It is remarkable that the vibronic coupling energy is strongly correlated with the chem. hardness η (an observable quantity), while the stabilization energy for the $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ transition is not directly reflected by η , in contrast to what is generally called the "principle of max. hardness".

As 23

DM. 41471

2002

Virko S. et al.,

ab initio
param

J. Mol. Struct. (Theochem)
2002 582, 137-142