

М.В.

1985

1 Л198. Экспериментальное определение температурной зависимости ширины уширенных азотом линий полосы $1 \leftarrow 0$ HCl. Experimental determination of the temperature dependence of nitrogenbroadened line widths in the $1 \leftarrow 0$ band of HCl. Ballard J., Johnston W. B., Moffat P. H., Llewellyn-Jones D. T. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1985, 33, № 4, 365—371 (англ.)

С использованием фурье-спектрометра с разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$ получены спектры ИК-поглощения газообразного HCl в смеси с азотом в области полосы $1 \leftarrow 0$. Профили линий описаны контуром Фойгта, из параметров которого определены коэф. уширений линий от $P(8)$ до $R(7)$ при T -рах от 215 до 296 К. Температурные изменения коэф. уширений γ описаны законом $\gamma = \gamma_0 (T_0/T)^n$. Параметры n уменьшаются с увеличением номера линии от $\sim 0,8$ до $\sim 0,25$.
М. В. Т.

М.В.

ср. 1986, 18, №1

1985

24 Б1203. Экспериментальное определение температурной зависимости уширения азотом линий в полосе 1—0 HCl. Experimental determination of the temperature dependence of nitrogenbroadened line widths in the 1←0 band of HCl. Ballard J., Johnston W. B., Moffat P. H., Llewellyn-Jones D. T. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. transfer», 1985, 33, № 4, 365—371 (англ.)

В интервале т-р 215—293 К исследована т-рная зависимость уширения давлением азота линий вращат. структуры полосы 1—0 в ИК-спектре поглощения HCl [от линии R(7) до P(8)]. Использовался интерферометрич. спектрофотометр с разрешением 0,01 см⁻¹ и термостатируемая оптич. ячейка с двойными стенками. Зависимость ширины линий (α) от т-ры описывается выражением $\alpha(T) = [\alpha(T_0)] (T/T_0)^n$, где T_0 — стандартная т-ра. Приведены значения n для отдельных линий (n меняется в интервале от -0,20 до -0,88). Отмечается, что для линий вблизи начала полосы значение параметра n от -0,76 до -0,88 существенно отличается от $n = -0,5$ предсказываемого простой кинетич. теорией в приближении жестких столкновений.

Р. М. Ковба

MCL

Спектр

X. 1985, 19, № 24

HCl

(Om. 22307)

1985

103: 186044r Observation of IR absorption-band rotational structure for hydrogen chloride and hydrogen fluoride dissolved in liquefied noble gases. Bernikov, M. A.; Bulanin, M. O.; Tokhadze, K. G. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1985, 59(2), 241-3 (Russ). IR spectra of HCl (2500-3300 cm^{-1}) and HF (3600-4200 cm^{-1}) in liq. Kr (168-186 K) and Xe (216-250 K) showed that the processes controlling the formation of contours of vibrational-rotational bands in spectra of liq. systems are more complex than expected. Compared to gaseous systems, the shifts of rotational structure are asym. and this effect is significantly stronger for the R- than for the P-branch. The magnitude of the shift in liqs. tends to sat. on increasing the rotational quantum no. J .

UK chempr
b. sample -
HCl

⊠(7) HF



C.A. 1985, 103, N 22

HCl

1985

Bieger W., Seifert G., et al.

Расчет
энергии
ионизации,
М

Z. phys. Chem. (DDR),
1985, 266, N4, 757-
- 763.

● (св. CO; III)

HCl

1985

7 Б1345. Фундаментальная колебательная полоса HCl. Интенсивности линий и температурная зависимость коэффициентов самоуширения. HCl vibrational fundamental band: Line intensities and temperature dependence of self-broadening coefficients. Chackerian C., Goorvitch D., Giver L. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 2, 373—387 (англ.)

На фурье-спектрометре измерены коэф. самоуширения линий вращат. структуры, $P(9) - R(11)$, фундаментальной ИК-полосы поглощения HCl при t -рах 297,5; 253 и 201 К (P и I соотв. в атм и см — 0,1036 и 0,197; 0,0593 и 0,448; 0,0588 и 0,448). Самоуширение обратно пропорционально t -ре для колебательно-вращат. переходов вблизи больцмановского максимума заселенности вращат. уровней и становится монотонно меньше зависящей от t -ры по мере роста вращат. квантового числа. Величина безвращат. момента перехода, $R^2 = (5,57 \pm \pm 0,13) \cdot 10^{-3}$ Д², значение 1-го коэф. Германа-Уоллиса, $C = -(2,543 \pm 0,019) \cdot 10^{-2}$, $|RC|_{\text{векп}} = 1,898 \cdot 10^{-3}$ Д.

В. М. Ковба

M.A.

X. 1986, 19, №7.

НСС

1985

4 Л198. Основная колебательная полоса HCl. Интенсивности линий и температурная ~~зависимость~~ коэффициентов самоуширения. HCl vibrational fundamental band. Line intensities and temperature dependence of self-broadening coefficients. Chackerian C., Jr., Gornvitch D., Giver L. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 2, 373—387 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии исследовано самоуширение ряда вращательных линий основной колебательно-вращательной полосы H^{35}Cl , H^{37}Cl . При t -рах 297, 253 и 201 К, в интервале давл. $(0,6-1) \cdot 10^{-1}$ атм, измерены коэф. самоуширения вращательных линий в P - и R -ветвях и определены их температурные зависимости. Отмечено, что самоуширение вращательных линий при переходах с уровней J , расположенных вблизи максимума больцмановского распределения заселенностей, обратно-пропорционально изменению t -ры и становится независимым от t -ры с увеличением J . При тех же условиях выполнены абс. измерения ин-

МН.

ср. 1986, 18, № 4

тенсивности линий, найдено среднее значение вращательного момента перехода $(5,57 \pm 0,13) \cdot 10^{-3} \text{ D}^2$ и рассчитан первый из факторов Германа—Уоллиса. Показано, что наблюдаемое уширение линий в основной полосе H^{35}Cl и H^{37}Cl хорошо описывается с помощью трех параметров в рамках теории Вильямса и др. Для каждой из т-р определены значения параметров. В. К. Библи. 27.

Нсе

1985

6 Б1035. Итерационный метод расчета факторов Франка-Кондона с использованием потенциальной функции Морзе для оценки равновесных межъядерных расстояний двухатомных молекул в возбужденных состояниях. An iterative method for Franck-Condon factor calculations with the use of the morse potential function to estimate equilibrium bond lengths of diatomic molecules in excited states; Chau Foo Tim. «Comput. and Chem.», 1985, 9, № 1, 19—22 (англ.)

Предложен способ оценки равновесных расстояний в возбужденных или ионизованных состояниях двухатомных молекул. Способ основан на итерац. подгонке рассчитываемых факторов Франка-Кондона к эксперим. значениям, оцениваемым по интенсивностям спектральных линий. Для колебат. волновых ф-ций использованы ф-ции осциллятора Морзе. Результаты, полученные для ряда возбужденных состояний молекул HCl , H_2 , N_2 , CO и O_2 хорошо воспроизводят эксперим. равновесные расстояния. Отмечено, что интенсивности низших колебат. переходов хорошо описываются и с ф-циями гармонич. осциллятора.

А. В. Немухин

Ze, расчит

74

X. 1986, 19, № 6.

HCL

1985

Chau F.T., McDowell C.A.

Cent. Assoc., J. Biol. Struct. 1985,
J, re; 129 (1-2), 169-73.

(Cen. F₂; III)

НСС

1985

15 Б1176. Колебательные спектры хлористого водорода в растворах в жидком и твердом ксеноне. Vibrational spectroscopy of hydrogen chloride in liquid and solid xenon solutions Chesnoy J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 114, № 2, 220—228 (англ.)

Получены спектры поглощения, флуоресценции (Фл) и возбуждения Фл HCl в жидк. и тв. ксеноне. Отмечено влияние симметрии окружения на картину спектра: в жидк. фазе спектр содержит кроме вращат. P - и R -ветвей запрещенную центральную Q -ветвь, к-рая отсутствует в тв. фазе. Обсуждены закономерности, наблюдаемые в спектрах. Появление Q -ветви связывают со смешиванием состояний для соседних свободно вращающихся молекул из-за наличия медленно меняющегося случайного барьера вращения. Исчезновение Q -ветви в тв. фазе указывает на роль усредненной симметрии и квазистатич. природу возмущения в жидк. фазе. Количеств. интерпретация данных требует знания ангармонич. членов в выражении для колебат. Пт и учета межмолек. колебательно-вращат. взаимодействия.

Б. В. Локшин

спектр в
тв. атомах Xe

Х. 1985, 19, N 15

HCl

ф - 24076.

1985

* 12 Л160. Вращательный анализ системы $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ молекулы $H^{35}Cl$. Rotational analysis of the $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system of $H^{35}Cl$. Coxon J. A., Roychowdhury U. K. «Can. J. Phys.», 1985, 63, № 12, 1485—1497 (англ.)

С высоким разрешением (линейная дисперсия $0,3 \text{ \AA} \cdot \text{мм}^{-1}$) сфотографирован спектр излучения перехода $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ (155—250 нм) молекулы HCl при возбуждении в микроволн. разряде. В спектре идентифицировано 39 полос молекулы $H^{35}Cl$ со значениями колебательных чисел $v' = 0-6$, $v'' = 7-17$. На основании детального анализа полученного спектра определены молекулярные постоянные и потенциал RKR состояний $B^1\Sigma^+$ и $X^1\Sigma^+$.
В. А. Е.

(Л.Н.)

ф. 1986, 18, N 12.

HCl

on, 24076

1985

У 18 Б1201. Вращательный анализ системы $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ $H^{35}Cl$. Rotational analysis of the $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system of $H^{35}Cl$. Coxon J. A., Roychowdhury U. K. «Can. J. Phys.», 1985, 63, № 12, 1485—1497 (англ.)

В обл. 155—250 нм с высоким разрешением сфотографирована система полос перехода $B^1\Sigma^+ (v'=0-6) \rightarrow X^1\Sigma^+ (v''=7-17)$ молекулы $H^{35}Cl$. Спектр возбуждали в микроволновом разряде в атмосфере смеси HCl/He (давл. ~ 4 мм). Выполнен анализ вращат. структуры полос, рассчитаны и приведены волновые числа начал полос, значения G_v , B_v , D_v , H_v , L_v , M_v для указанных колебат. уровней. В спектре наблюдали также переходы в квазисвязанные состояния ряда высоколежащих колебат. уровней, лежащих выше диссоционного предела основного электронного состояния. Рассчитаны потенц. кривые резонансного КР $H^{35}Cl$ в состояниях $B^1\Sigma^+ (v=0-6)$ и $X^1\Sigma^+ (v=0-17)$, приведены значения $G_v + Y_{00}$, B_v , поворотные точки потенциальной кривой.

В. М. Ковба

(М.П.)

X. 1986, 19, N 18

HCl

(Om. 24076)

1985

104: 158547j Rotational analysis of the $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system of hydrogen chloride ($H^{35}Cl$). Coxon, J. A.; Roychowdhury, U. K. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *Can. J. Phys.* 1985, 63(12), 1485-97 (Eng). The $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system of HCl was recorded photog. at high resolu. at 155-250 nm. Rotational assignments of the measured line positions were made for 39 bands of $H^{35}Cl$ with $0 \leq v' \leq 6$ and $7 \leq v'' \leq 17$. Least squares parameter ests. from individual bands were merged to obtain a set of single-valued parameters that reproduces most of the exptl. data to within the measurement precision. First-order Rydberg-Klein-Rees (RKR) turning points for the B and X states are reported from a 2nd set of parameters derived from a truncated data set. The reliability of the ground-state RKR potential is discussed in terms of the 1st-order approxn. and Born-Oppenheimer breakdown. Transitions were obsd. to quasibound states of several high-lying vibrational levels of the ground state.

(B¹Σ⁺ - X¹Σ⁺)C. A. 1986, 104, N 18.

HCl

1985

Dannenberg J. J.,
Rayer J. C., et al.

No; THEOCHEM 1985, 24,
(3-4), 343-59.

(cer.  H₂; III)

HCl

1985

12 Б1095. Расчет сечений колебательного возбуждения и диссоциативного присоединения для HCl и DCl вне приближения локального комплексного потенциала. Calculation of cross sections of vibrational excitation and dissociative attachment in HCl and DCl beyond the local-complex-potential approximation. Domcke W., Mündel C. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 22, 4491—4509 (англ.).

В рамках резонансной модели с учетом дипольного Пт рассчитаны сечения возбуждения колебат. состояний и диссоциативного присоединения электрона при рассеянии низкоэнергетич. электронов на молекулах HCl и DCl. Динамика ядер в неустойчивом столкновит. комплексе описывается без привлечения приближения локального комплексного потенциала. Полученные интегральные сечения для изучаемых процессов полуколич. согласуются с эксперим. данными.

В. Б. Павлов-Веревкин

(11) 

X. 1986, 19, № 12

HCl

HCl⁺

1995

123: 155296h The vibrational spectra of molecular ions isolated in solid neon. XIII. HCl^+ , $(\text{HCl})_2^+$, ClHCl^- , and O_2HCl^+ . Forney, Daniel; Jacox, Marilyn E.; Thompson, Warren E. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Standards Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(5), 1755-66 (Eng). When a Ne:HCl or a Ne:DCl sample is codeposited at approx. 5 K with a beam of neon atoms that have been excited in a microwave discharge, the IR spectrum of the solid deposit includes the fundamental absorption of HCl^+ or DCl^+ , which appears about 1% below the corresponding gas-phase band center. Another absorption, intermediate between the fundamentals of HCl and of HCl^+ , is contributed by an HCl-stretching fundamental of $(\text{HCl})_2^+$. Among the important anion species present in the solid is ClHCl^- , IR absorptions of which are identified. Charge delocalization is sufficiently reduced in solid neon, compared to the heavier rare gases, that ion prodn. from HCl does not occur at or below 10.2 eV. The elec. field of the ions trapped in from polarized light microscopy are in good agreement with those obtained from micro-Raman images.

CHRMF
6

sample

(+3) 

C. A. 1995, 123, N12

HCl

Dom. 22 923

1985

Gaspár R., Gáspár R., Jr.,

ab initio
praeiis

Can. J. Chem., 1985,
63, N 7, 1922-1924.

МЦ

№ 22317

1985

Коптев Г. С., Салбеган С. Х.

потемц.

и др.

кривые
для основ-
ного
состоя-
ния

Вестн. ЛГУ. Химия,
1985, 26, N 5, 450-
- 454.

HCL

1985

Круачко Eugene S.

и.п.

Chem. Phys. Lett., 1985,

116, N 5, 411-414.

К теории взаимодействия двух атомов. Нола
Трёхпараметрическая функция  потенциальной энергии Z^2 атомных молекул
(сл. Zn H; III)

HCl

От. 21359 1985

22 Б1010. Распространение упрощенного метода расчета энергии корреляции на системы, содержащие атомы третьего периода. II. Расчет молекул HCl, HCl⁺, ClO и NClO и NCl. Extension of a simplified method for molecular correlation energy calculations to molecules containing third row atoms. II. Application to HCl, HCl⁺, ClO and NCl molecules. Lievin J., Metz J.-Y. «Theor. Chim. acta», 1985, 67, № 5, 391—407 (англ.)

Li, N, F, Cl

Приближенный вариант метода псевдопотенциала для расчета энергии корреляции в системах, содержащих атомы 3-го периода (см. пред. реф.), использован для построения кривых потенциальной энергии четырех хлорсодержащих двухатомных систем: HCl(¹Σ⁺), HCl(²π), ClO(²Π) и NCl(X³Σ⁻, a¹Δ, b¹Σ⁺). Рассчитаны энергии диссоциации (D_e) частоты колебаний (ω_e) и равновесные длины связей (R_0). Представлены также данные расчета потенциала ионизации (ПИ) в HCl,

(42)

X. 1985, 19, N 22

сродства к протону (СП) для атома Cl и энергии возбужденных термов радикала NCl. Показано, что результаты крайне чувствительны к корреляционным эффектам и что рассчитанные с учетом корреляции значения СП, D_e , T_e и ω_e с точностью до 10% воспроизводят эксперим. данные. Еще более точные значения получены для равновесных длин связей и ПИ. Предсказаны верхние пределы энергий диссоциации для радикала NCl: 2,14 эВ — $X^3\Sigma^-$, 3,28 эВ — $a^1\Delta$ и 2,47 эВ — $b^1\Sigma^+$. С целью выяснения роли 3d-орбиталей Cl проведено сопоставление результатов, полученных для NCl и NCl⁺, с аналогичными результатами для HF и HF⁺.

С. П. Долин

HCl

DM. 21359

1985

10 Д102. Распространение упрощенного метода расчетов молекулярной корреляционной энергии на молекулы, содержащие атомы элементов третьего периода. Ч. II. Применение к молекулам HCl, HCl⁺, ClO и NCl. Extension of a simplified method for molecular correlation energy calculations to molecules containing third row atoms. II. Application to HCl, HCl⁺, ClO and NCl molecules. Lievin Jacques., Metz Jean-Yves. «Theor. Chim. acta», 1985, 67, № 5, 391—407 (англ.)

расчет М.Л.

⊗(43)

Развита в ч. I. см. реф: 10Д101 процедура расчета молекулярных кулоновских корреляц. энергий (КЭ) применена для построения кривых потенц. энергии молекул HCl (электронное состояние $^1\Sigma^+$; ClO ($^2\Pi$), NCl ($^3\Sigma^-$, $^1\Delta$, $^1\Sigma^+$) и иона HCl⁺ ($^2\Pi$). Определены основные спектроскопич. постоянные (R_e, ω_e, D_e, T_e). Полученные результаты согласуются с данными экспериментов и неэмпирич. расчетов с точностью $\sim 10\%$ для T_e, ω_e и D_e и $\sim 2\%$ для R_e . Отмечено, что учет только внутренней КЭ, как правило, позволяет получать удовлетворительные оценки молекулярных постоянных.

А. В. Зайцевский

ф. 1985, 18, № 10

HCl⁺

[Om. 21359]

1985

Lievin Jacques,
Metz Jean Yves.

потемнел.
красное,
расчет,

Theor. Chim. Acta
1985, 67(5), 391-407.

Do;

(ср. HCl; III)

HCl.

Om. 21359

1985

103: 59512s Extension of a simplified method for molecular correlation energy calculations to molecules containing third row atoms. II. Application to HCl, HCl⁺, ClO and NCl molecules. Lievin, Jacques; Metz, Jean Yves (Fac. Sci., Univ. Libre Bruxelles, B-1050 Brussels, Belg.). *Theor. Chim. Acta* 1985, 67(5), 391-407 (Eng). A simplified method for mol. correlation energy calcs. developed earlier (L. and M., 1985) is applied to the detn. of the potential curves of some diat. Cl-contg. mols. HCl(¹Σ⁺), HCl(²Π), ClO(²Π) and NCl(X³Σ⁻, a¹Δ, b¹Σ⁺). Dissocn. energies, vibrational frequencies and equil. internuclear distances are derived from these curves. The ionization (*I_p*) of HCl, the proton affinity (PA) of Cl, and the term energies of the excited states of the NCl radical are also calcd. The results are very sensitive to correlation effects and the correlated results converge to the corresponding exptl. values within 10% for PA, *D_e*, *T_e* and *ω_e*, 2% for *R_e* and 0.3% for *I_p*. This agreement allows one to predict the following lower limits for the dissociation energies of the NCl radical: 2.14, 3.28 and 2.47 eV, resp., for the X³Σ⁻, a¹Δ and b¹Σ⁺ states. Results on HF and HF⁺ are also discussed and compared with those obtained for HCl and HCl⁺.

homelies.
krubke,
paerem, Do

(+3) 

C. A. 1985, 103, N 8.

МСС

1985

УДБ1119. Сродство к протону галогеноводородов, метил- и трифторметилгалогенидов из масс-спектрометрических данных для равновесий в импульсном электронном пучке при высоких давлениях. Proton affinities of the hydrogen, methyl, and trifluoromethyl halides from pulsed electron beam high pressure mass spectrometric equilibria measurements. McMahon T. B., Kebarle P. «Can J. Chem.», 1985, 63, № 11, 3160—3167 (англ.; рез. фр.)

Метод импульсной МС высокого давл. использован для колич. изучения р-ций переноса протона между HX , CF_3X , ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{J}$) и их ионами. Определено сродство к протону (СП) для HCl , HBr , HJ , CF_3Cl , CF_3Br и CF_3J (137,5; 142,9; 150,5; 139,0, 141,3 и 150,4 ккал/моль соотв.) и сродство к CH_3^+ -катиону для HF , HCl , HBr и HJ (15 ± 2 ; 19,8; 21,3 и 31,7 ккал/моль соотв.). Полученные оценки сродства к CH_3^+ использованы для предсказания СП для CH_3Cl , CH_3Br и CH_3J (160,8, 164,8 и 171 ккал/моль). Найдены линейные корреляции СП с энергиями удаления валентных электронов из нейтр. молекул изученных соединений, а также СП со сродством к CH_3 . Д. В. Загоревский

Ар;

⊗ (+9)

X. 1986, 19, n 11

HCl

1985

Medvedev E. S.

расчёт
 d_{mn} обер-
тонных
переходов.

J. Mol. Spectrosc.,
1985, 114, N1, 1-12.

(см. HF; III)

М.С.

1985

~~2 Д89.~~ Определение новой молекулярной постоянной для двухатомных систем из обертоновых колебательных спектров. Медведев Э. С. «Докл. АН СССР», 1985, 284, № 4, 841—843

Получено квазиклассич. выражение для матричного элемента дипольного момента, которое позволяет связать наблюдаемые вероятности переходов $n \leftrightarrow m$ при $n - m \gg 1$ с отталкивательной ветвью молекулярного потенциала $E(q)$ при $q < 0$ ($q = r - r_e$). Эта ветвь аппроксимирована экспонентой $E(q) \sim \exp(-2\beta q)$, где β — постоянная, и получена следующая зависимость силы осциллятора f_{mn} от энергии верхнего уровня ϵ_n : $\ln f_{mn} = \text{const} - \lambda \sqrt{\epsilon_n / \hbar \omega}$, где const есть ф-ция только от m , λ — постоянная, пропорциональная $1/\beta$. Эксперим. данные по поглощению СН и CD колебаний в бензоле хорошо ложатся на прямые на графике $\ln f_{mn}$ от $\sqrt{\epsilon_n}$, из наклона которых определено β . Приводится таблица значений β для нескольких многоатомных и двухатомных молекул. Предсказывается существование полос аномально слабой интенсивности в спектрах поглощения двухатомных молекул. Эксперим. данные для HCl подтверждают наличие этих аномалий. Автореферат

М.П.

ф. 1986, 18, № 2

Мел

OM 36747a"

1985

1 D255. Возбужденные состояния HCl и DCl и их отрицательные ионы при энергиях 12,5—28 эВ. Excited states of HCl and DCl and their negative ions between 12,5 and 28 eV. Nasrallah H. K., Marmet P. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 10, 111-119 (англ.) 2075-2086

Получены кривые эффективности ионизации электронным ударом HCl и DCl в диапазоне энергий электронов 12,75—26 эВ с использованием метода пересекающихся пучков, электростатического электронного селектора, обеспечивающего разрешение 0,04 эВ и электронный ток $3 \cdot 10^{-9}$ А, квадрупольного фильтра масс и многоканального анализатора для усреднения эксперим. за-

Σ;

ср. 1986, 18, N1

(H) DCl,



висимостей и получения большого отношения сигнала к шуму. На кривых эффективности ионизации четко проявляются структуры, связанные с возбужденными состояниями HCl^* , DCI^* , HCl^{-*} , DCI^{-*} . Наблюдались ридберговские состояния с колебательным возбуждением, связанные с конфигурациями $(3p\sigma)(3p\pi)^4 4s$, $3d$, и их соответствующие состояния отрицат. ионов. Кроме того, обнаружены два состояния, связанные с уровнями $(3s\sigma)(3p\sigma)^2(3p\pi)^4 4s$ и $4p$. Г. К.

Cl²⁺

1995

Nepedova V.V., Boldyrev A.I.,
Simons J.,

номер.
ф-ил,
объем,
расчет

Int. J. Quantum. Chem.,
1995, 55 (6), 441-57

(all. Mg²⁺ ; III)

HCl

1985

10 Б4006. Колебательная релаксация двухатомных гидридов в инертных газах. Расчеты констант скоростей. ~~Vibrational relaxation~~ of diatomic hydrides in inert gases. Rate constant calculations. Ovchinnikova M. Y. «Chem. Phys.», 1985, 93, № 1, 101—113 (англ.)

колебательн-
релаксационн

(43) $\square$ X. 1985, 19, N10
В рамках статич. модели VR-процесса выполнены систематич. расчеты констант скоростей колебат. дезактивации 1-го уровня молекул HCl и HF (и их дейтерозамещ. аналогов) при столкновениях с атомами инертных газов X. Вероятности переходов индуцировались заторможенным вращением гидридов в поле анизотропного Пт взаимодействия AH—X, параметрически зависящего от межмолек. расстояния. Траектории заторможенного вращения, а также компоненты Фурье взаимодействия, вызывающего колебат. переход, вычислялись численно. Усредненные вероятности по различным расстояниям между партнерами позволило получить константы скорости релаксации $k(E, T)$ (T — т-ра поступат. степеней свободы) в зависимости от вращат. энергии молекулы HX. Послед. усреднение по E давало термич. константу релаксации $k(T)$. Вычисления HF, DCl, DF

констант проведено для Пт, различающихся в основном экспоненциальным или степенным характером отталкивания при тесном сближении партнеров. Показано, что степенные Пт дают сильно завышенные результаты по сравнению с экспоненциальными, а последние удовлетворительно воспроизводят эксперим. результаты по скоростям дезактивации. Анализ траекторий заторможенного вращения показал, что колебат. релаксация вызывается в основном квазисвободным вращением молекулы, когда направление углового момента при столкновении не меняется. Анализ зависимости $k(E, T)$ от E привел к выводу, что время резонансного VR-обмена для колебательно-возбужденных молекул HF, возникающих в р-ции фотоотщепления от CH_2CF_2 , заметно превосходит время задержки генерации лазерного излучения в этой системе. На этом основании сделан вывод, что VR-обмен не является ответственным за создание инверсной заселенности по вращат. состояниям HF в указанной системе. Е. Е. Никитин

HCl

1985

Pine A.S., Fried A.,
et al.

u. n. J. Mol. Spectrosc., 1985,
109, N 1, 30-45.

(cur. HF; III)

HCl

1985

Pine A. S., Fried A.

checkmp J. Mol. Spectrosc., 1985,
114, N 1, 148-162.

(cell. HF; III)

HCl^+

1985

3 Б1131. Моменты переходов в системе полос $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ HCl^+ . Transition moments in the band system $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ HCl^+ . Rodrigues A., Campos J. «17th Eur. Congr. Mol. Spectrosc., Madrid, 8—13 Sept., 1985: EUCMOS XVII. Abstr.» S. 1, s. a., P.—85 (англ.)

Измерены относит. интенсивности 42 полос системы $A^2\Sigma^+ (v' = 0-6) - X^2\Pi (v'' = 0-5)$ в спектре испускания HCl^+ возбуждаемом в разрядном источнике с полым катодом. Приведена (в виде графика) зависимость относит. величины электронного момента перехода от λ -центрорды (1,1—1,8 Å). В. М. Ковба

$A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$

Х. 1986, 19, №3

Нс⁺

1985

3 Л178. Изучение молекулярных ионов, важных для астрофизики, с использованием высокочувствительных лазерных методов в инфракрасной области. Studies of astrophysically important molecular ions with ultrasensitive infrared laser techniques. Saykally Richard J. «Mol. Astrophys.: State Art and Future Dir. Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Bad Windsheim, 8—14 July, 1984». Dordrecht e. a., 1985, 403—419 (англ.)

(Vi)

Краткий обзор результатов исследований вращательных и колебательно-вращательных спектров поглощения, выполненных в последние годы методами лазерного магн. резонанса и модуляции скорости ионов в газовых разрядах: высокая чувствительность этих методов позволяет детектировать до 10^6 ионов в 1 см^3 . Кратко обсуждаются результаты изучения спектров

(+6) X

ср. 1986, 18, №3.

ионов HCl^+ , HCO^+ , HNN^+ , HCNH^+ , H_3O^+ , NH_4^+ , OH^+ ,
из которых в межзвездной среде обнаружены только
ионы HCO^+ и HNN^+ (а также ион HCS^+ , не детек-
тированный еще в лаборатории). Библ. 71. М. Р. Алиев

HCL

1985

Singh Surjit.

u.n.

J. Mol. Struct., 1985,
127, N3-4, 203-208.

(see OM; III)

HCl

1985

Singh Surjit, Luck W. A. P.

суд. Spectrosc. Lett, 1985,
носу. 18, N3, 229-238.

(суд. HF; III)

HCl

1985

Tossell J. A., Moore J. H.
et al.

Inorg. Chem., 1985, 24,
N 7, 1100-1103.

сильней-
шая

(ср. SiH_4 ; III)

МЦ

[Ом. 21274]

1985

Trautwein A. X.,

Lauer S., et al.,

теоретическая,
свойства
постоянные,
расчет.

Theor. chim. acta,
1985, 67, n3, 175-185.

НЦ

1985

7 8 Б1026. Потенциальные поверхности метода КВ—НИК с использованием сбалансированных базисных наборов. III. HCl и N₂. MRD-Cl potential surfaces using balanced basis sets. III. HCl and N₂. Wright James S., Buenker Robert J. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 8, 4059—4068 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методами конфигурац. взаимодействия с учетом однократных и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям (КВ НИК) рассчитаны потенциальные кривые основных электронных состояний молекул HCl и N₂. Используются раз-

М.П.

(7) 10

Х. 1987, 19, № 8

01 (1)
СТОЯ

личные базисы сгруппированных гауссовых ф-ций, включающие ф-ции, центрированные на связи. Показано, что расширение набора ф-ций на связи может привести к завышению энергии диссоциации. Для правильного описания потенциальных кривых оптимальными являются двухэкспонентные базисы с поляризац. ф-циями на ядрах, дополненные одним набором s и p -ф-ций на связи в случае HCl и двумя наборами s , p - и d -ф-ций на связи в случае N₂. Сбалансированные базисы относительно небольшой размерности позволили определить потенциальные кривые, весьма близкие к эксперим. кривым метода РКР. Полученные кривые аппроксимированы пятипараметрич. обобщенными ф-циями Морзе. Найдены след. значения спектроскопич. постоянных (в скобках — эксперим. значения): для HCl $D_e=4,62$ (4,62) эВ, $R_e=1,277$ (1,275) А, $\omega_e=3023$ (2989) см⁻¹, $\omega_e x_e=52,9$ (51,2) см⁻¹, $B_e=10,67$ (10,71) см⁻¹, $\alpha_e=0,338$ (0,341) см⁻¹; для N₂ $D_e=9,96$ (9,91) эВ, $R_e=1,106$ (1,098) А, $\omega_e=2344$ (2363) см⁻¹, $\omega_e x_e=13,9$ (14,7) см⁻¹, $B_e=1,934$ (1,960) см⁻¹, $\alpha_e=0,014$ (0,015) см⁻¹.

А. А. Сафонов

HCl

От 23890

1985

12 Д75. Потенциальные поверхности, полученные методом КВ НИК с использованием сбалансированных базисных наборов. Ч. III. HCl и N₂. MRD-CI potential surfaces using balanced basis sets. III. HCl and N₂. Wright James S., Buenker Robert J. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 8, 4059—4068 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Функции потенц. энергии и спектроскопич. постоянные молекул HCl и N₂ рассчитаны методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений набора исходных конфигураций (КВ НИК). Со- поставлены результаты расчетов с орбитальными базами различного состава. Показано, что близкие к эмпирическим потенц. кривые могут быть получены с использованием базисов относительно небольшой размерности (33 ф-ции для HCl, 52 — для N₂), включающих связевые ф-ции ((1s1p) в случае HCl и (2s2p2d) — для N₂). Оценки энергии диссоциации в

М.П.

20 (4)

сп. 1987, 18, N 12

N₂

этих базисах воспроизводят экспериментальные с точностью до 0,05 эВ. Для достижения сопоставимой точности описания потенц. кривых с базисами, состоящими только из атомно-центрированных ф-ций, необходимо значительное увеличение размерности задачи. Библ. 34. А. В. Зайцевский



HCl

OM 23890

1985

/ 103: 185954a MRD-CI potential surfaces using balanced basis sets. III. Hydrogen chloride and molecular nitrogen. Wright, James S.; Buenker, Robert J. (Dep. Chem., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(8), 4059-68 (Eng). Multiref. CI methods are used to calc. potential curves, dissocn. energies, and vibration-rotation energy levels for HCl and N₂. These calcs. use basis sets optimized in a previous study. The potential curves show very good agreement with exptl. Rydberg-Klein-Rees (RKR) data. Both CI and RKR data are accurately fitted by 5-parameter generalized Morse functions. Spectroscopic parameters calcd. for HCl are $D_e = 4.62$ eV, $R_e = 1.277$ Å, $\omega_e = 3023$ cm⁻¹, $\omega_e x_e = 52.9$ cm⁻¹, $B_e = 10.67$ cm⁻¹, and $\alpha_e = 0.338$ cm⁻¹ (exptl. v, J values give 4.62 eV, 1.275 Å, 2989, 51.2, 10.71, and 0.341 cm⁻¹, resp.) and for N₂ are $D_e = 9.96$ eV, $R_e = 1.106$ Å, $\omega_e = 2344$ cm⁻¹, $\omega_e x_e = 13.9$ cm⁻¹, $B_e = 1.934$ cm⁻¹, $\alpha_e = 0.014$ cm⁻¹ (exptl. v, J values give 9.91 eV, 1.098 Å, 2363, 14.7, 1.960, and 0.015 cm⁻¹, resp.). This good agreement with expt. is obtained using small but carefully balanced basis sets contg. bond functions, an approach which should be adopted in calcs. involving mol. dissocn.

M.N., pacnem

(H) N₂C.A. 1985, 103, N 22

HCl

1986

1 Л328. Фотоэлектронные спектры высокого разрешения для внутренних оболочек молекулы HCl. Highly resolved photoelectron spectra of the HCl inner valence shell. Adam M. Y. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 128, № 3, 280—286 (англ.)

С использованием для возбуждения монохроматизированного синхротронного излучения в области 30—90 эВ получены разрешенные по углу фотоэлектронные спектры паров HCl. Анализ полученных результатов позволил авторам сделать следующие основные выводы: 1) в спектрах наблюдаются две интенсивные линии, уверенно отождествляемые как дырочные состояния $4\sigma^{-1}$; 2) обнаружены сателлиты линий, отвечающих ионизации внешних оболочек; 3) существует минимум в спектральных зависимостях парциальных сечений фотоионизации в области энергий ~ 40 эВ. Отмечено, что для полного описания процессов фотоионизации валентной оболочки HCl необходим учет межканального взаимодействия.

М. Т.

(М.П.)

ф. 1987, 18, № 1

НСР

1986
Berkov M. A.,
Bulanin M. O., et al.,

ИК-спектры
поглощения ж. Mol. Liq., 1986,
32, N1, 25-40.

(см.  HF; III)

Нсl *

1986

12 B4385. Образование и реакции электронно-возбужденных [молекул] HCl. Formation and reactions of electronically excited HCl. Brown M. A., Cartwright P. C., Donovan R. J., Langridge-Smith P. R. R., Lawley K. P. «9th Int. Symp. Gas Kinet., Bordeaux, 20—25 July, 1986. Abstr.» [Bordeaux], s. a., F 6/1—F 6/2 (англ.)

спектр

Исследованы р-ции электронно-возбужденных молекул HCl*, получаемых при многофотонном возбуждении перестраиваемым лазерным УФ-излучением, с атомами инертных газов в основном состоянии. Изучена многофотонная ионизация и спектры Фл. HCl. Хл. HeCl ($B_2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$), обсуждаются р-ции HCl* с др. инертными газами.

Л. Ю. Мельников

(H) X HeCl

X. 1987, 19, N 12.

Нсе

1986

5 Б1102. Эффекты нарушения приближения Борна—Оппенгеймера при определении двухатомных межъядерных потенциалов. Применение подгоночной процедуры метода наименьших квадратов к молекуле HCl. Born—Oppenheimer breakdown effects in the determination of diatomic internuclear potentials: application of a least-squares fitting procedure to the HCl molecule. Сохон J. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 361—387 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Обсуждена процедура построения эффективного межъядерного потенциала для двухатомных молекул в электронном состоянии типа $X^1\Sigma$ по эксперим. данным, основанная на использовании метода наименьших квадратов. В рамках процедуры построения потенциала м. б. привлечены данные по колебательно-вращат. переходам и по электронно-колебат. переходам. Применение метода показано на примере состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы HCl. Из сравнения Пт для $H^{35}Cl$, $H^{37}Cl$ и $D^{35}Cl$ получены эффективные Пт для HCl в приближении Борна—Оппенгеймера. Найденный Пт использован для расчета колебательно-вращат. спектра $D^{37}Cl$.

Б. И. Жилинский

М.А.

1987

X. 1987, 19, N5

Н.С.

1986

1 Д57. Влияние нарушения приближения Борна-Оппенгеймера при определении межъядерных потенциалов в двухатомных молекулах: применение метода наименьших квадратов к молекуле HCl . Born-Oppenheimer breakdown effects in the determination of diatomic internuclear potentials: Application of a least-squares fitting procedure to the HCl molecule. Сохон J. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 361—387 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

(М.П.)

Предложен новый метод восстановления вида межъядерного эффективного потенциала двухатомных молекул по спектральным данным. Упрощение вычислительной процедуры достигнуто за счет явного учета неаддитивч. членов (вплоть до восьмого порядка) в выражении для колебательно-вращательного гамильтониана. На основе спектральных данных, полученных автором для молекул H^{35}Cl , H^{37}Cl и D^{35}Cl определены весовые параметры метода наименьших квадратов, с использованием которых определен борн-оппенгеймеровский потенциал молекулы HCl в состоянии $X^1\Sigma^+$ и эффективный гамильтониан изотопа D^{37}Cl . Для последнего получено хорошее согласие расчетных данных с результатами фурье-спектроскопии.

В. В. Росихин

ср. 1987, 18, №1

HCl

1986

104: 233194x Born-Oppenheimer breakdown effects in the determination of diatomic internuclear potentials: application of a least-squares fitting procedure to the hydrogen chloride molecule. Coxon, J. A. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(2), 361-87 (Eng). A least-squares fitting procedure is described for the redn. of measured line positions in $^1\Sigma$ diat. spectra to effective internuclear potentials. The procedure, which is based on 1st-order perturbation theory, was applied to data within a single electronic state, or to such data in combination with those of an electronic transition. Following recent theor. work on Born-Oppenheimer breakdown, a modified, or effective, vibration-rotation Hamiltonian was employed to take account of non-adiabatic effects. An unlimited amt. of data was fitted simultaneously, with appropriate weighting. Results are described from an application of the procedure to the extensive data available for H^{35}Cl ($X^1\Sigma^+$), including those from a recent study of the $\delta-X$ system. Combined with similar result from vibration-rotation data for H^{37}Cl and D^{35}Cl , the effective potentials for the ground states of the 3 isotopes led to a detn. of the Born-Oppenheimer potential for HCl ($X^1\Sigma^+$). The synthetic vibration-rotation spectrum of D^{37}Cl , obtained from the eigenvalues of the calcd. effective Hamiltonian for this isotope, is in agreement with the precise exptl. data from Fourier transform spectroscopy.

nomerics.

qs - ucl

C.A. 1986, 104, N26

HCl^+

1986

✓ 18 Б1199. Инфракрасная лазерная спектроскопия: HCl^+ с детектированием методом модуляции по скоростям. Infrared laser velocity modulation detection of HCl^+ . Davies P. B., Hamilton P. A., Johnson S. A. «Mol. Phys.», 1986, 57, № 1, 217—220. (англ.)

(М.Н.)
С использованием метода модуляции ионов по скоростям для детектирования полупроводниковых ИК-лазерных спектров поглощения («J. Chem. Phys.», 1984, 81, 1598) измерено положение 17 колебательно-вращат. переходов ионов H^{35}Cl^+ и H^{37}Cl^+ в состояниях $X^2\Pi_{3/2}$ и $X^2\Pi_{1/2}$. Наблюдались также линии предварительно отнесенные к горячим полосам. В. М. Ковба.

X. 1986, 19, № 18

HCl^+

1986

12 Л194. ИК-лазерное детектирование ионов HCl^+ методом модуляции скорости. Infrared laser velocity modulation detection of HCl^+ . Davies P. B., Hamilton P. A., Johnson S. A. «Mol. Phys.», 1986, 57, № 1, 217—220 (англ.)

С использованием метода ИК-лазерной модуляции скорости (Gudeman C. S. et al. «Phys. Rev. Lett.», 1983, 50, 727) получены ИК-спектры поглощения 17 переходов в области фундаментальной полосы поглощения иона HCl^+ . На основании абс. положения полос и с использованием литературных данных по Λ -удвоению в оптич. спектрах эти полосы приписаны состояниям $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$ изотопов H^{35}Cl^+ и H^{37}Cl^+ . В спектрах идентифицировано также несколько горячих полос.
В. А. Е.

(М.А.)

7. 1986, 18, N 12.

HCl⁺

1986

/104: 119003j Infrared laser velocity modulation detection hydrogen chloride cation (HCl⁺). Davies, P. B.; Hamilton, P. A.; Johnson, S. A. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EP). *Mol. Phys.* 1986, 57(1), 217-20 (Eng). By using velocity modulation detection, IR diode laser absorption spectra of 17 transitions of the fundamental band of HCl⁺ were measured covering both $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ states of H³⁵Cl⁺ and H³⁷Cl⁺. The transitions were assigned on the basis of their abs. positions and Λ doublet splittings predicted by earlier optical spectra. Some of the additional lines detected, but not yet accurately measured, are assigned tentatively to hot band transitions in HCl⁺.

(crekmp)

C. A. 1986, 104, N14.

Мел

1986

3 Л173. Расчет отношения выхода фрагментов $\text{Cl}(^2P_{3/2})/\text{Cl}(^2P_{1/2})$ при фотодиссоциации HCl . Prediction of the $\text{Cl}(^2P_{3/2})/\text{Cl}(^2P_{1/2})$ branching ratio in the photodissociation of HCl . Givertz Simon C., Balint-Kurti Gabriel. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1986, Pt2, 82, № 8, 1231—1242 (англ.)

Предложен метод расчета отношения квантовых выходов образования фотофрагментов в определенных состояниях при фотодиссоциации двухатомных молекул. Метод применен для определения отношения $\text{Cl}(^2P_{3/2})/\text{Cl}(^2P_{1/2})$ при диссоционном переходе $\bar{A}^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы HCl . Потенц. кривая возбужденного состояния и зависимость дипольного момента перехода от межъядерного расстояния определены методом подгонки на основании эксперим. данных. Рассчитанные сечения фотодиссоциации как полное, так и для отношения $(^2P_{3/2}/^2P_{1/2})$, проявляют квазипериодич. зависимость от энергии возбуждения, что отражает колебательную структуру исходных волн. функций. М. А.

(Мел-П.)

ф. 1987, 18, №3

HCl

(DM. 25951)

1986

Kenner R.D., Maack H.R.,
Stuhl F.,

Кристаллы
ионных
жидкостей

J. Chem. Phys., 1986,
85, N 4, 1915-1923.

HCl

1986

Ma Zhongsun Dai
Shushan.

Хуаюэ тунбао,

с.п. Chemistry, 1986, № 11,
35-36.

(с.с. HF; III)

НЦ

1986

Д 6 Д59. Аномалии интенсивностей в обертоновых колебательных спектрах молекул. Медведев Э. С. «Хим. физ.», 1986, 5, № 2, 156—164

Получено квазиклассич. выражение для предэкспоненц. фактора в матричном элементе дипольного момента. Показано, что он может обращаться в нуль при некоторых значениях разности энергий начального и конечного колебательных состояний, приводя к ослаблению интенсивностей отдельных полос спектра по отношению к их норм. значениям. Аномальные полосы идентифицированы в спектрах поглощения HCl, HBr и HI. Предсказывается аномальное ослабление полосы поглощения $5 \leftarrow 0$ в CO. Резюме

(м.п.)

(+2) ☒

ср. 1986, 18, № 6

МСС

1986

3 Б1216. Количественное исследование фотопоглощения и флуоресценции HCl в вакуумном ультрафиолете. Quantitative photoabsorption and fluorescence study of HCl in vacuum ultraviolet. Nee J. B., Suto Masako, Lee L. C. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 2, 719—724 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

В обл. 106—185 нм с использованием излучения синхротрона измерены сечения поглощения молекул HCl в газ. фазе, связанные с переходами на состояния $b^3\Pi_i$ ($v=0-2$), $C^1\Pi$ ($v=0-2$), $H^1\Sigma^+$ ($v=0$), $K^1\Pi$ ($v=0$), $M^1\Pi$ ($v=0$) и $R^1\Pi$ ($v=0$). Из полученных сечений рассчитаны силы осцилляторов для наблюдаемых переходов, к-рые хорошо согласуются с теорет. значениями. Погрешность расчета оценена в 15%. Достаточно высокие сечения обнаружены и для ряда триплетных состояний, что свидетельствует о сильном спин-орбитальном взаимодействии. Обсуждены ридберговские х-ки измеренных полос поглощения. Зарегистрированы полосы флуоресценции из состояний $V(B)$.

М.Н.

Х. 1987, 19, № 3

H , M и R и определены соотв. сечения. Выход флуоресценции чрезвычайно мал ($< 0,4\%$), что связано с сильной предиссоциацией возбужденных состояний $HC1$.
С. Б. Осин

НЦ

1986

8 Д106. Связанные электронные состояния HCl^- .
Bound electronic states of HCl^- . O Neil S. V., Ros-
mus P., Norcross D. W., Werner H.-J. «J. Chem. Phys.»,
1986, 85, № 12, 7232—7240 (англ.) Место хранения
ГПНТБ СССР

Проводится неэмпирич. расчет в приближении Бор-
на—Оппенгеймера $X^1\Sigma$ состояния HCl и $1^2\Sigma$, $2^2\Sigma$ и $2^2\Pi$
состояний HCl^- на межъядерных расстояниях, при ко-
торых эти состояния связаны. В процессе расчетов по-
лучены статич. поляризуемость Cl^- и воспроизведены
известные поляризуемости H , Cl и H^- . Расчет $X^1\Sigma$ со-
стояния HCl приводит к величине энергии диссоциации,
совпадающей с экспериментальной с точностью 0,1 эВ, и
к величине частоты колебаний, совпадающей с экспе-
риментальной с точностью 3 см^{-1} . Для $1^2\Sigma$ состояния
 HCl^- потенциал притягивающий и проявляется сущест-
венный переход заряда. Напр., на расстоянии между

М.П.

ф. 1987, 18, № 8

ядрами $1,72 \text{ \AA}$ примерно $1/3$ плотности дополнительно-го электрона находится на атоме Н. Потенциалы для $^2\Pi$ и $2^2\Sigma$ состояний отталкивающие даже при больших расстояниях между ядрами. Полученные данные представляют интерес для интерпретации процессов ассоциативного отрыва электрона.

Г. К.

Нсl⁻

1986

16 Б1028. Связанные электронные состояния HCl⁻. Bound electronic states of HCl⁻. O Neil S. V., Rosmus P., Norcross D. W., Werner H.-J. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 12, 7232—7240 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные кривые электронных состояний $1^2\Sigma$, $2^2\Sigma$ и $2^2\Pi$ иона HCl⁻, а также состояния $X^1\Sigma$ нейтр. молекулы HCl. МО получены многоконфигурац. методом ССП. Базис включал наборы сгруппированных гауссовых ф-ций $(15s12p5d1f)/[12s10p5d1f]$ на Cl и $(9s5p1d)/[7s5p1d]$ на H. Используемая методика расчета позволила воспроизвести эксперим. значения поляризуемости атомов H, Cl и H⁻; рассчитана поляризуемость Cl⁻. Спектроскопич. постоянные, полученные для состояния $X^1\Sigma$ HCl, согласуются с эксперим. данными, различия для энергии

М.Н.

X. 1987, 19, N 16

диссоциации и колебательной частоты составляют 0,10 эВ и 3 см^{-1} соотв. Потенциальные кривые состояний $1^2\Sigma$, $2^2\Sigma$ и $2^2\Pi$ HCl^- рассчитаны в обл. межъядерных расстояний, где эти состояния являются связанными относительно диссоциации $\text{HCl} + e$. Состояние $1^2\Sigma$ является связанным относительно диссоциации на $\text{Cl}^- + \text{H}$, состояния $2^2\Pi$ и $2^2\Sigma$ — отталкивательными. Проанализирована локализация отриц. заряда в HCl^- , для чего построена разностная электронная плотность. Обсужден характер переноса заряда в HCl^- . А. А. Сафонов



HCl⁺ (Om. 26241) 1986

O'Neil S.V., Rosmus P.,
et al.,

ab initio
param

J. Chem. Phys., 1986,
85, N12, 7232-7240.

HCl

HCl⁻

neopem.
pacrim

1986

106: 90386q Bound electronic states of hydrochloric acid ion(1-). O'Neil, S. V.; Rosmus, P.; Norcross, D. W.; Werner, H. J. (Natl. Bur. Stand., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(12), 7232-40 (Eng). Ab initio Born-Oppenheimer calcs. on the $X^1\Sigma$ state of HCl and on the $1^2\Sigma$, $2^2\Sigma$, and $^2\Pi$ states of HCl- for internuclear distances at which these states are electronically bound were performed. The calcs. employed square-integrable CI wave functions which included all single and double replacements from multiconfiguration ref. functions. The MC-SCF ref. configurations and the Gaussian at. basis encompass the dominant effects which govern the electronic states studied. The static polarizability of Cl- was calcd. and the known polarizabilities of H, Cl, and H- were reproduced. D_e On the $X^1\Sigma$ state of HCl is within 0.10 eV of the measured value, and ω_e is within 3 cm⁻¹ of the measured value. For the mol. ion, the potential of the $1^2\Sigma$ state of HCl- is attractive and undergoes substantial charge transfer, whereas the potentials of the $^2\Pi$ and $2^2\Sigma$ states are repulsive even at large internuclear sepns. ...

c. A. 1987, 106, N 12

HCl⁺

1986

Requena A., Zuñiga J.,
et al.,

et al., J. Quant. Spectrosc. and
Ei; Radiat. Transfer, 1986,
35, N1, 29-37.

( CN; III)

HCl Requena A, Zúñiga J., 1986
et al.

meopem.
porcem.

J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer, 1986,
35, N1, 29-37.

( CN; III)

HCl

1986

106: 128030j Force constants of hydrogen chloride in organic solvents. Shverina, V. G.; Karétnikov, G. S. (Gor'k. Politekh. Inst., Gorkiy, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1986, 60(11), 2877-8 (Russ). The force consts. (K_f) and internuclear distances (D) of HCl in nitroalkene, nitrile, ester, ketone, ether, alc., and neutral phosphate solvents were dtd. from the IR vibrational frequencies. A correlation was established between the relative shift of the vibrational frequencies of HCl during dissoln. in org. solvents, soly., K_f , and D . The strength of H bonds between HCl and solvent mols. depends on the nature of functional groups of the latter. The K_f decreases and D increases with increasing strength of H bonds.

Cul. noem.)

2e B payn. per
bopst

C.A. 1987, 106, N 16.

АЦ

Салман Сафардин Холлар, 1986

Автореферат диссертации
на соискание ученой сте-
пени К.Х.Н., Москва, 1986.

Расчет
параметр.
потенц.
ф-ции
основного
состоя-
ния.

Некоторые новые формулы
потенц. функции двух-
атом. молекул.

HCl^+

1986

9 Б1090. Эмиссия $HCl^+(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi)$ и $HBr^+(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi)$ в результате пеннинговской ионизации HCl и HBr метастабильными атомами $He(2^3S)$ и $Ne(3P_{0,2})$ в тлеющем разряде низкого давления. The $HCl^+(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi)$ and $HBr^+(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi)$ emissions produced by the $He(2^3S)$, $Ne(3P_{0,2})-HCl$, HBr penning ionization in low-pressure flowing afterglows. Tsuji M., Maier J. P., Obase H., Nishimura Y. «Chem. Phys.», 1986, 110, № 1, 17—26 (англ.)

(М.П.)

Исследованы эмиссионные спектры продуктов пеннинговской ионизации молекул HCl , HBr метастабильными атомами $He(2^3S)$ и $Ne(3P_{0,2})$, образующимися в тлеющем разряде при низком давлении инертных газов от 25 до 1000 МТорр. Из анализа структуры линий, обусловленных излучательными переходами $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ в HCl и HBr определены заселенности $P(v)$ колебат.

(41) 

X. 1987, 19, № 9

уровней состояния $A^2\Sigma^+$ и вращательные т-ры. Установлено, что $P(\nu)$ сдвинуты в сторону меньших ν по сравнению с распределениями, предсказанными из франк-кондоновских факторов. Для системы Ne—HC эти результаты объяснены влиянием короткодействующего отталкивания при распаде $\text{NeHCl}^+(A) \rightarrow \text{Ne} + \text{HCl}^+(A)$. Для остальных систем колебат. релаксация уровней с высокими ν отнесена к процессам столкновений в камере ионизации.

О. А. Басченко

HCl

1986

Zink Lyndon Robert.

u.n. Diss. Abstr. Int. B 1987,
47 (11), 4563.

(cur. ● CO; III)

Нс

Дм. 28061

1987

7 Б1220. Аналитические колебательно-вращательные матричные элементы для инфракрасных переходов в двухатомных молекулах с высокими значениями Δv . Analytic vibration—rotational matrix elements for high Δv infrared transitions of diatomic molecules. Boua-nich J. P. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1987, 38, № 2, 89—112 (англ.)

М.П.

Приведены теор. аналитич. выражения для матричных элементов колебательно-вращат. переходов $v, J \rightarrow v', J'$ в ИК-спектрах двухат. молекул с $\Delta v = v' - v'' = 4, 5, 6, 7$. Применимость полученных выражений проверена на переходах в молекулах HCl ($v'' = 0 \rightarrow v' = 0-7$, $v'' = 5 \rightarrow v' = 5-10$, $v'' = 10 \rightarrow v' = 10-15$) и CO ($\Delta v = 4$, $v'' = 0, 10, 20$). В. М. Ковба

Х. 1988, 19, № 7

HCl

OM 27452

1987

4 B1212. Резонансно усиленная двухфотонная спектроскопия HCl и DCl в области $77\,000\text{--}87\,000\text{ см}^{-1}$. Resonantly enhanced two-photon spectroscopy of HCl and DCl in the $77\,000\text{--}87\,000\text{ см}^{-1}$ region. Callaghan Robert, Arepalli Sivaram, Gordon Robert J. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 10, 5273—5280 (англ.)

Методом резонансно усиленной многофотонной ионизации исследованы спектры двухфотонного возбуждения молекул HCl и DCl в состоянии с энергией $87\,000\text{--}77\,000\text{ см}^{-1}$ (часть результатов опубликована в «Chem. Phys. Lett.», 1985, 118, 88). Для возбуждения использовались лазеры на красителях с удвоением частоты излучения, с шириной полосы возбуждения $0,3\text{--}0,4\text{ см}^{-1}$. Выполнен анализ вращ. структуры полос. Наблюдались след. состояния (приведены положения начал полос и значения B_v') H^{35}Cl : состояние $V^1\Sigma^+$, $v=9, 11, 12, 13, 15, 16$ — соотв., 82 835, 3,9; 84 203, 4,3; 84 742, 4,0; 85 272, 4,3; 86 404, 3,7; 86 926, 3,9;

M.N.

X. 1988, 19, N4

состояние $E^1\Sigma^+$, $v=0, 1$ — соотв. 83 776, 6,5; 85 916, 6,1; состояние $f^3\Delta_2$, $v=0$ —82 010, 10,705, $D_v'=1,3\cdot 10^{-3}$; состояние $F^1\Delta_2$, $v=0, 1$ — соотв. 82 843, 10,219, 0,2 $\cdot 10^{-3}$; 85 358, 10,173, 0,8 $\cdot 10^{-3}$; состояние $g^3\Sigma^-$ $v=0$ —83 084, 7,6; состояние $d^3\Pi_1$, $v=0$ —81 730, 10. Аналогичные данные приведены для $H^{37}Cl$, $D^{35}Cl$ и $D^{37}Cl$. Результаты сопоставлены с данными, полученными методом спектроскопии однофотонного поглощения и неэмпирич. расчетами. Дан вывод правил отбора для двухфотонных электронно-колебательно-вращат. переходов.

В. М. Ковба

HCl

Om 27452

1987

Q-2 Л175. Резонансно-усиленная двухфотонная спектроскопия HCl и DCl в области $77\,000\text{--}87\,000\text{ см}^{-1}$. Resonantly enhanced two-photon spectroscopy of HCl and DCl in the $77\,000\text{--}87\,000\text{ см}^{-1}$ region. Callaghan Robert, Arepalli Sivaram, Gordon Robert J. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 10, 5273—5280 (англ.)

Методом резонансно-усиленной многофотонной ионизации изучены двухфотонные спектры HCl и DCl в области $77\,000\text{--}87\,000\text{ см}^{-1}$. С разрешением $\sim 0,4\text{ см}^{-1}$ исследованы колебательно-вращательные структуры $X^1\Sigma^+ \rightarrow V^1\Sigma^+$, $E^1\Sigma^+$, $F^1\Delta_2$, $d^3\Pi_1$, $f^3\Delta_2$ и $g^3\Sigma^-$ -электронных переходов. В результате анализа эксперим. данных представлена интерпретация колебательно-вращательных структур, относящихся к изотопомерам

(H)

cf 1988, 18, N2.

H^{35}Cl , H^{37}Cl , D^{35}Cl , D^{37}Cl . Определены положения начал колебательных подполос и найдены значения вращательных постоянных изотопомеров в возбужденных электронно-колебательных состояниях. Отмечено, что полученные данные находятся в согласии с результатами квантово-химич. расчетов. Библ. 22. В. К.

HCl

(Om. 27452)

1987

107: 48581v Resonantly enhanced two-photon spectroscopy of hydrogen chloride and deuterium chloride in the 77,000-87,000 cm⁻¹ region. Callaghan, Robert; Arepalli, Sivaram; Gordon, Robert J. (Dep. Chem., Univ. Illinois, Chicago, IL 60680 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(10), 5273-80 (Eng). The 2-photon spectra of HCl and DCl were studied using resonantly enhanced multiphoton ionization. Rovibrational bands were obsd. for the X ¹Σ⁺ - V ¹Σ⁺, E ¹Σ⁺, F ¹Δ₂, d ³Π₁, f ³Δ₂, and g ³Σ⁻ transitions. The results were compared with the single photon spectra of M.L. Ginter and co-workers (1970, 1971, 1980), A.E. Douglas and F.R. Greening (1979), and with the MO calcs. of M.L. Bettendorf et al. (1982).

2^x photore-
chem

X ¹Σ⁺ → V ¹Σ⁺,
E ¹Σ⁺, F ¹Δ₂, d ³Π₁,
f ³Δ₂ u g ³Σ⁻

⊕ ⊗ DCl

C.A. 1987, 107, N 6

HCl

1987

Feller David, Boyle
Caroline M., et al.

M.N.

J. Chem. Phys., 1987,
86, N6, 3424-3440.

(corr. $\bullet$ H_2O ; III)

HCl^{2+}

OM-28522 1987

107: 223518d Theoretical and experimental studies of the doubly charged ion hydrogen chloride($2+$). Fournier, P. G.; Mousselmal, M.; Peyerimhoff, S. D.; Banichevich, A.; Adam, M. Y.; Morgan, T. J. (Univ. Paris-Sud, F-91405 Orsay, Fr.). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1987, 36(6), 2594-602 (Eng). Energies of excited states of HCl^{2+} were detd. exptl. by the technique of double charge transfer and are compared with present results of a multireference single- and double-excitation configuration-interaction calcn. The calcn. shows the existence of 4 bound states. The good agreement obtained permits a direct assignment of the 4 lowest-energy excited states with singlet symmetry. Comparison with previous information obtained from photoion-photoion coincidence, electron impact, charge stripping, and also from HCl xuv Auger anal. is given. The double-ionization energies of stable states $^3\Sigma^-$, $^1\Delta$, and Σ^+ HCl^{2+} and of dissociative states $^1\Pi$ and $2^1\Sigma^+$ are given.

неоп. параметр.
на-ко-модель.

C.A. 1987, 107, N 24

М.С.

[OM. 27745]

1987

Madlinger G., Tergiman Y. S.,
et al.,

Рассет
гидроном.
ампул.
элемент,
1/2 сост.

J. Chem. Phys., 1987,
87, N 4, 2143-2150.



HCl

(Om. 27885)

1987

u.n., mepmoj.
p-uee, meop-
pacrem

+ (2) HBr

C.A. 1987, 107, N 20

i 107: 184112v Ab initio MO study on the acidity scale of hydrogen chloride and hydrogen bromide. Ikuta, Shigeru; Nomura, Okio (Gen. Educ. Dep., Tokyo Metrop. Univ., Tokyo, Japan 152). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(6), 3701-2 (Eng). Calcd. results are given on the abs. acidities of HCl and HBr. The MP2 method was used for both the geometric surveys and frequency calcns. Final calcns. were done by using the MP4-SDTA. Calcd. total energies, mol. constns. and thermodyn. data are in agreement with the literature exptl. and theor. data.

1) HCl } m.p.
2) HBr }
3) HCl (u.n., m.p., teop.
- g. a. v. f.)

AK

(OM 28285)

1987

Jenč F., Brandt B.A.,

помещ.
сп-из осн.
состов-
муж.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 1,
83, N 9, 2857-66.

ACE

1987

Molt, J. G.; Radostitz, J. V.;
et al

спав.
ноч

J. Mol. Spectrosc. 1987,
125(2), 274-87.

Рес. CO;  III)

HCl^{2+}

1987

U18 B1025. Потенциальные кривые HCl^{2+} , рассчитанные методом ССП ПАП-КВ. CASSCF-Cl potential curves of HCl^{2+} . Olsson B. J., Larsson M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1987, 20, № 5, L137—L141 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые состояний $^3\Sigma^-$, $^1\Delta$ и $^3\Pi$ молек. дикатиона HCl^{2+} . Использованы базисы гауссовых ф-ций $(14s10p5d)/[7s5p3d]$ для Cl и $(9s4p1d)/[4s3p1d]$ для H. На первом этапе решена задача МК ССП в варианте полного активного пространства (ССП ПАП). На втором этапе с полученными МО проведен расчет в приближении сгруппированного конфигурац. взаимодействия (КВ) с несколькими исходными конфигурациями. Найдено, что состояние $^3\Pi$ является несвязанным, а потенциальные кривые состояний $^3\Sigma^-$ и $^1\Delta$ имеют локальные минимумы, расположенные выше соотв. диссоциац. пределов. Определены спектроскопич. постоянные и скорости преддиссоциации для квазисвязанных колебат. уровней в локальных ямах. Отмечено, что время жизни состояний $^3\Sigma^-$ и $^1\Delta$ при возбуждении с основного состояния HCl достаточно велико, чтобы можно было экспериментально зафиксировать дикатион HCl^{2+} .

А. В. Немухин

М.П.

X.1987, 19, N18

HCl²⁺

1987

106: 162863t CAS-SCF-CI potential curves of hydrogen chloride ion (2+). Olsson, B. J.; Larsson, M. (Res. Inst. Phys., S-104 05 Stockholm, Swed.). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1987, 20(5), L137-L141 (Eng). The CAS-SCF and contracted CI methods were used to generate electronic wave functions and potential-energy curves for the $^3\Sigma^-$, $^1\Delta$ and $^3\Pi$ states of HCl²⁺. Calcns. on the ground state of HCl at its equil. geometry and dissocn. limit were performed, and the vertical double ionization energies were deduced. These results were compared with existing exptl. results following recent photoion-photoion-coincidence expts. Mol. consts. and predissocn. rates are given for the $^3\Sigma^-$ and $^1\Delta$ states, which both possess local min. above their dissocn. limits.

nometic. p- u_{el}

$^3\Sigma^+$, $^1\Delta$ & $^3\Pi$ conf

C.A. 1987, 106, N20.

HCl^{2+}

1987

10 Д54. Потенциальные кривые HCl^{2+} , полученные методом ССП-ППАО-КВ. CASSCF-CI potential curves of HCl^{2+} . Olsson B. J., Larsson M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1987, 20, № 5, L137—L141 (англ.)

Выполнены неэмпирич. расчеты потенц. кривых электронных состояний $^3\Sigma^-$, $^1\Delta$ и $^3\Pi$ иона HCl^{2+} . На первом этапе расчет проводился многоконфигурац. методом ССП в варианте полного пространства активных орбиталей (ССП-ППАО). Второй этап включал расчет методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с выбором исходных конфигураций, имеющих коэф., превышающие 0,05 в разложении ф-ции метода ССП-ППАО. Базис АО включал наборы гауссовых ф-ций: $(14s10p5d)/[7s5p3d]$ на Cl и $(9s4p1d)/[4s3p1d]$ на H. Потенц. кривая состояния $^3\Pi$ не имеет минимума. Для состояний $^3\Sigma^-$ и $^1\Delta$ найдены локальные минимумы при межъядерном расстоянии 2,7 ат. ед., что указывает на возможность существования метастабильных ионов HCl^{2+} в этих состояниях. Рассчитаны также потенциалы ионизации молекулы HCl при равновесном значении межъядерного расстояния.

А. И. Дементьев

М.А.

ф. 1987, 18, № 10

Hcl

1987

Requena Rodriguez, A.;
Capel Tuero, M.

уровни
энергии

J. Chim. Phys. Phys.-Chim.
Biol. 1987, 84(5), 711-13.

(сск. DF,  III)

HCl^+

1987

21 Б1194. Электронный момент перехода для системы $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ иона HCl^+ . Electronic transition moments for the $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ system of HCl^+ . Rodriguez A., Campos J. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 8, 4401—4405 (англ.)

В обл. 2000—5000 Å исследован спектр излучения молек. иона HCl^+ , возбуждаемый в полом катоде. Измерены относит. интенсивности полос с $v' \leq 7$, $v'' \leq 5$ системы электронного $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ в обл. 2700—5000 Å. Из лит. данных по спектроскопич. постоянным с использованием потенц. ф-ции Морза вычислены факторы Франка — Кондона (ФК) для этих полос. Из измеренных интенсивностей полос и вычисленных факторов ФК в r -центридном приближении найдена зависимость электронного момента перехода от r -центрида вида $R_e^2 = 0,543 r^{3,29} \exp(-2,69 r^2)$. Оценены также времена жизни возбужденных состояний $A^2\Sigma^+$, $v' \leq 6$.

Е. В. Алиева

М.А.

X. 1987, 19, № 21

HCl^+

1987

11 Л246. Электронные моменты перехода в системе $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ иона HCl^+ . Electronic transition moments for the $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ system of HCl^+ . Rodriguez A., Campos J. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 8, 4401—4405 (англ.)

Из разряда в полом катоде получен спектр излучения иона HCl^+ в области 329—352 нм. Методом численного моделирования спектра найдены относит. интенсивности частично перекрывающихся электронно-колебательных полос системы $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$. Получена зависимость электронных моментов перехода от r -центроида и предложено эмпирич. выражение, описывающее эту зависимость.

Е. Н. Т.

М. П.

ф. 1987, 18, N 11

HCl⁺

1987

106: 223489z Electronic transition moments for the $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ system of chloroniumyl (HCl⁺). Rodriguez, A.; Campos, J. (Lab. Fis. At. Nucl., CIEMAT, Madrid, Spain). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(8), 4401-5, (Eng). The emission spectra of 31 bands of HCl⁺ ($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$) were obtained using hollow cathode discharges. Relative intensities were detd. by comparison with computer generated spectra. Treatment of the data within the r -centroid ($F_{v'v''}$) approxn. shows that the electronic transition moment decreases strongly for large internuclear distances (r centroid). The transition moment can be fitted by the expression $R_{e,2}^2 = 0.543 r_{v'v''}^{3.29} \times \exp(-2.69 F_{v'v''}^{-2})$ in at. units for $1.1 < r_{v'v''} < 1.8$ Å.

($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$)

C.A. 1987, 106, N26

HL⁺

[orn. 26576]

1987

Sears T. J.,

библиогр.
эксперим.
исследов.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2, 83,
N1, 111-126.

HCl

от 26899

1987

20 Б1101. Спектроскопия лазерной ионизации HCl с разрешением по массе. Mass-resolved laser ionization spectroscopy of HCl. Spiglanin Thomas A., Chandler David W., Parker David H. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 137, № 5, 414—420 (англ.)

На примере HCl показана применимость метода многофотонной ионизации (двухфотонная ионизация с суммарной энергией $82\,000\text{--}89\,000\text{ см}^{-1}$) с разрешением по массе для селективного детектирования состояний малых молекул. Образующиеся в результате двухфотонной лазерной ионизации HCl атомные продукты отвечают состояниям исходной молекулы ($V^1\Sigma^+$ и $E^1\Sigma^+$) с большими длинами связи. Подобие в поведении этих состояний указывает на то, что они являются частью одного двухъямного потенциального минимума. Взаимодействие указанных состояний при $83\,087\text{ см}^{-1}$ дает состояние $g^3\Sigma^-(O^+)$. На основании полученных данных пересчитаны вращательные констан-

вращат. пост.

X. 1987, 19, № 20

ты и энергетич. терм для состояния $F^1\Delta_2 (\bar{\nu}=1)$. Аномальное распределение интенсивностей ~~вращательных~~ переходов и полученные факторы коррекции могут использоваться для определения заселенности вращательных состояний.

Д. В. Загоревский

HCl⁺

1987

15 B1279. Многоканальные взаимодействия при резонансной фотоионизации HCl. Multichannel interactions in the resonant photoionization of HCl. White M. G., Leroi G. E., Ho M.-H., Poliakoff E. D. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6553—6558 (англ.)

Измерены спектры флуоресценции ионов HCl⁺, возбуждаемых при фотоионизации HCl резонансными линиями He-I (581 Å) и Ne-I (736/744 Å). Рассчитано распределение ионов по колебат. состояниям в возбужденном состоянии A²Σ⁺HCl⁺ и показано, что увеличение заселенностей уровней $v'=0$ и $v'=1$ при переходе от линий He-I к Ne-I связано с колебат. автоионизацией ридберговских состояний HCl с низкими значениями l и высокими значениями v ($v \geq 4$). Отмечено, что поскольку этот процесс осуществляется вопреки правилу предпочтительности ожидаемому для колебат. автоионизации, должны осуществляться др. многоканальные

М.Н.

Х. 1988, 19, N 15

взаимодействия, отличные от рассматриваемых ранее. В частности, предложен механизм непрямой автоионизации, включающий сильное взаимодействие ридберговских и отталкиват. валентных состояний. На основании анализа интенсивности флуоресценции фрагментов, образующихся при диссоциации (атомов и ионов), а также результатов пред. измерений абс. выхода ионизации сделан вывод о действительной преддиссоциации ридберговских уровней.

С. Б. Осин

HCL

Om. 287091

1987

Woods R., Henderson G.,

и.п.и.
Фурье-
чекмт,
и.м.и.
рабона
гид
ЛТБ.

г. Chem. Educ.,
1987, 64, N 11, 921-
924.

НЦР²⁺

DM 29355

1988

№ 9 Д58. Потенциальные кривые и скорости преддиссоциации HCl^{2+} и DCl^{2+} . Potential curves and predissociation rates for the species HCl^{2+} and DCl^{2+} . Banichevich A., Peyerimhoff S. D., Van Hemert M. C., Fournier P. G. «Chem. Phys.», 1988, 121, № 3, 351—359 (англ.)

Рассчитаны кривые потенциальных энергий для всех состояний HCl^{2+} , коррелирующих с первыми пятью пределами диссоциации. Проводился учет взаимодействия конфигураций в гауссовском АО базисе, содержащем до 6 d - и одну f -ф-ции для Cl и 2 ф-ции p для H. Рассчитаны скорости туннелирования для $X^3\Sigma^+$, $a^1\Delta$ и $b^1\Sigma^+$ колебательных уровней в HCl^{2+} и DCl^{2+} и скорость преддиссоциации для колебательных уровней состояний $a^1\Delta$ и $b^1\Sigma^+$ при спин-орбитальном взаимодействии с $^3\Pi$ -состоянием. Константы спин-орбитального взаимодействия вычислялись точно с применением оператора Брейта — Паули и рассчитанных волн. ф-ций.

Г. К.

М.А.



ср. 1988, 18, № 9

HCl^{2+}

(Om. 29355)

1988

109: 135332z Potential curves and predissociation rates for the species hydrogen chloride ion (HCl^{2+}) and deuterium chloride ion (DCl^{2+}). Banichevich, A.; Peyerimhoff, S. D.; Van Hemert, M. C.; Fournier, P. G. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1988, 121(3), 351-9 (Eng). Potential-energy curves for all HCl^{2+} states which correlate with the first five dissociation limits were calcd. employing multireference double-excitation configuration-interaction (MRD-CI) treatments with a Gaussian AO contg. up to four d and one f function for chlorine and two p functions for hydrogen. Tunneling rates for the $X^3\Sigma$, $a^1\Delta$, and $b^1\Sigma^+$ vibrational levels in HCl^{2+} and CCl^{2+} were calcd., as well as predissocn. rates for vibrational levels of the $a^1\Delta$ and $b^1\Sigma^+$ states due to spin-orbit interaction with the $^3\Pi$ state. The spin-orbit coupling elements were evaluated explicitly by employing the Breit-Pauli operator and the MRD-CI wave functions. Comparison with previous works is given.

nomenu.
Kpudal

(+) HCl^{2+}



C.A. 1988, 109, N 16

HL

(DM. 29379)

1988

Barclay V. J., Wright J. S.,

потенц.
кривые,
основн.
состоян.,
и.п.

Chem. Phys., 1988,
121, N 3, 381-391.



НСС

1988

Горшечков В.М.,
Рачков Т.м. и др.,

м.п.

20 Всес. съезд по спектроскопии,
Киев, сент., 1988: Тез. докл.
Ч.1.- Киев.-1988.-с. 242.

(св. I_2 ; III)

HCl⁺

OM-29621

1988

У 10 Л206. Измерение электронного момента перехода $\text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Pi)$ с использованием квазирезонансного переноса заряда при низкой энергии. Measurement of the $\text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Pi)$ electronic transition moment using quasiresonant charge transfer at low energy. Glenewinkel-Meyer Th., Müller B., Ottinger Ch., Tischer H. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 6, 3475—3480 (англ.)

Измерены интенсивности 16 полос системы в спектре излучения $\text{HCl}^+(\text{A}-\text{X})$ при селективном возбуждении $\text{HCl}^+(\text{A}, \bar{\nu}=0, 3, 5, 6)$ за счет квазирезонансного переноса заряда при низкой энергии соударения. Определена зависимость электронного момента перехода $M(R)$ от межъядерного расстояния в области $R=1,1-1,8\text{Å}$. В. С. Иванов

М.П.

Ф. 1988, 18, N 10

HCl⁺

OM-29621

1988

М. ЛОМОВИЧ
РЕПЕРЖА

108: 195067f Measurement of the chloroniumyl (HCl^+) ($A^2\Sigma^+-X^2\Pi$) electronic transition moment using quasiresonant charge transfer at low energy. Glenwinkel-Meyer, T.; Mueller, B.; Ottinger, C.; Tischer, H. (Max-Planck-Inst. Stroemungsforsch., 2400 Goettingen, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(6), 3475-80 (Eng). $\text{HCl}^+(A)$ was selectively prepd. in the $v' = 0, 3, 5$, and 6 levels using ion impact excitation. The resulting A-X spectra are largely free from band overlap. From intensity measurements on 16 bands, the electronic transition moment function $M(R)$ was derived in the region of $R = 1.1-1.8$ Å. Computer simulations based on this $M(R)$ function were performed both for these and for addnl. spectra excited by electron impact. In all cases reprodn. of the measured spectra was achieved. The $M(R)$ dependence obtained in this work agree with a large-scale ab initio calcn.

C.A. 1988, 108, N 22

HCl⁺

DM. 29621

1988

18 B1277. Измерение электронного момента перехода $\text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Pi)$, используя квазирезонансный перенос заряда при низкой энергии. Measurement of the $\text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+ - \text{X}^2\Pi)$ electronic transition moment using quasiresonant charge transfer at low energy. Glene-winkel-Meyer Th., Müller B., Ottinger Ch., Tischer H. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 6, 3475—3480 (англ.)

Получены спектры испускания иона HCl^+ с отдельных уровней ($v' = 0, 3, 5, 6$) состояния $\text{A}^2\Sigma^+$ (переход $\text{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \text{X}^2\Pi$, 275—450 нм), возбуждаемые при квазирезонансном переносе заряда в ходе процессов: $\text{F}^+(\text{}^3\text{P}) + \text{HCl}(\text{X}^1\Sigma^+) \rightarrow \text{F}(\text{}^2\text{P}) + \text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+, v' = 5 \text{ и } 6)$; $0^+(\text{}^2\text{D}) + \text{HCl}(\text{X}) \rightarrow \text{O}(\text{}^3\text{P}) + \text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+, v' = 3)$; $0^+(\text{}^2\text{P}) + \text{HCl}(\text{X}) \rightarrow \text{O}(\text{}^1\text{D}) + \text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+, v' = 1)$; $\text{He}^+ + \text{HCl}(\text{X}) \rightarrow \text{He} + \text{HCl}^+(\text{A}^2\Sigma^+, v' = 0)$. Из измерений интенсивности 16 полос системы получена след. зависимость от R ф-ции электронного момента перехода $M(R) = -0,0103 + 4,7963R - 9,3240R^2 + 7,6984R^3 - 3,1263R^4 + 0,5070R^5$. Нормировка

М.П.

X. 1988, 19, N 18

проведена на основании величины $M(R) = 0,54$, полученной в ходе неэмпирич. расчетов для $R = 1,0$ А. С использованием найденной зависимости $M(R)$ (для диапазона $R = 1,1 - 1,8$ А) построен синтетич. спектр испускания при возбуждении HCl электронным ударом с энергией 1000 эВ, хорошо воспроизводящий эксперим. Зависимость $M(R)$ согласуется также с данными неэмпирич. расчетов. В. М. Ковба



HCl

(Om. 30 600)

1988

DCl

Kaiser E.W.,

восточн.
хвостовый
высший.

Y. Mol. Spectrosc.

1988, 131, N2, 403 -
404.

Non - Born -



Oppenheimer

Effects on the Chlorine
Quadrupole Coupling Constants
of $H^{35}Cl$ and $D^{35}Cl$.

НС

1988

Каюмова Т. В.,
Москаленко Н. И.

20 Всес. съезд по
спектроскопии,
Киев, сентябрь, 1988:

Тез. докл. 4.1. Киев,
1988. С. 266.

(см. СО; II)

атлас
параметров
спектраль-
ных линий

HCl

1988

Konefam
frausam-
Cnempr

110: 29304c The energy levels and potential functions of diatomic molecules. Koptev, G. S.; Tatevskii, V. M. (USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1988, 29(5), 446-51 (Russ). The generalized Morse function proposed (K., et al., 1985) for describing vibrational-rotational states of diat. mols. is analyzed. The function can be calcd. anal. from exptl. spectroscopic data. A numerical example of fitting it to the HCl rotational-vibrational spectra is given.

c.A. 1989, 110, ~4

HCl

1988

108: 103445b Spin-orbit and electronic autoionization in hydrogen chloride. Lefebvre-Brion, H.; Dehmer, P. M.; Chupka, W. A. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(2), 811-17 (Eng). The high res. relative photoionization cross section for HCl is reported at 720-975 Å. Results of calcs. are presented for spin-orbit autoionization in the energy region between the $X^2\Pi_{3/2}$ and $X^2\Pi_{1/2}$ ionization thresholds and for electrostatic autoionization in the energy region containing Rydberg series converging to the $A^2\Sigma^+$ excited ionic state. For the case of spin-orbit autoionization in the region just above the $X^2\Pi_{1/2}$ ionic threshold, the energy positions of the 1st peaks are approximately correct if the ionization potential is modified by ~ 80 cm $^{-1}$; the intensities of the peaks are strongly perturbed, most probably by high lying vibrational levels of the $V^1\Sigma^+$ valence state. At 780-800 Å, 2 progressions of Rydberg states converging to the $A^2\Sigma^+$ excited ionic state and autoionized by electrostatic interaction were studied by ab initio multichannel quantum defect theory. Qual. agreement with the exptl. data was obtained by a slight adjustment of some quantum defects, the other parameters being those obtained by ab initio calcs. Comparison with the absorption spectra of both HCl and DCl was made.

(9)

C.A. 1988, 108, N12

HCl⁻

(DM. 31024)

1988

Murray K.K., Leopold A.G.
et al.,

оромо-
электр.
спект.

J. Chem. Phys. 1988, 89, N 9,
5442-5453.

Photoelectron spectroscopy of
the halocarbenes anions

HCF^- , HCCl^- , $\text{HCB}r^-$, HCl^- ,
 CF_2^- , and CCl_2^- .

MLL

(DM. 29424)

1988

Peterson R.A.,
Woods R.C.

расчет
спектров.
построен.

J. Chem. Phys., 1988,
88, N 2, 1074-1079.

Нсl-

1988

3 Б1020. Исследование валентного характера состояний HCl^- с помощью почти адиабатических расчетов методом КВ. Research of valence character HCl^- states through nearly diabatic CI calculations / Rajzmann M., Spiegelmann F., Malrieu J. P. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 1.— С. 433—440.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с несколькими исходными конфигурациями в рамках алгоритма CIPSI рассчитаны потенциальные кривые ряда электронных состояний иона HCl^- . Использован эффективный основной Пт для Cl. Базис сгруппированных гауссовых ф-ций включал наборы $(5s5p1d)/[3s3p1d]$ на Cl и $(5s2p)/[3s2p]$ на H. С помощью процедуры, основанной на квазивырожденной теории возмущений, получены адиабатич. потенциальные кривые, что позволило различить вал. отталкиват. состояния и ридбергов. состояния, потенциальные кривые к-рых симпатны потенциальным кривым нейтр. молекулы. Рассмотрена зависимость от базиса потенциальных кривых различ-

Нсl-

X. 1989, №3

ных состояний; отмечена сильная зависимость в случае ридберговских состояний и слабая зависимость в случае вал. состояний. Для резонансных состояний рассчитаны ширины как ф-ции межъядерного расстояния. При равновесном межъядерном расстоянии нейтр. молекулы резонансные состояния ($1^2\Sigma^+$, $2^2\Pi$ и $2^2\Sigma^+$) HCl^- расположены на 2,3; 7,1 и 9,4 эВ выше уровня $v=0$ молекулы HCl и имеют ширины 2,0; 1,2 и 2,5 эВ соотв.

А. А. Сафонов

HCl-

1988

109: 197461z Research of valence character hydrogen chloride ion(1-) (HCl-) states through nearly diabatic CI calculations. Rajzmann, M.; Spiegelmann, F.; Malrieu, J. P. (Lab. Phys. Quantique, Univ. Paul Sabatier, 31062 Toulouse, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(1), 433-40 (Eng). Ab initio CI calcs. were performed on HCl- using moderately large basis sets. For large interat. distances, the potential curves of the three bound states (two $2\Sigma^+$ and one 2Π) compare favorably with those previously computed with very large basis sets. The extension of a recently published procedure yields nearly diabatic potential curves for the unbound region, and enables to discriminate between valence-like resonant states, of essentially mol. curves; the former are nearly basis-set independent while the latter are sensitive to the basis. Estns. of the widths are also given. For the HCl equil. distance, the first $2\Sigma^+$ "resonant state" is located at 2.3 eV above the $v = 0$ level of HCl, with a large width of 2 eV; the second $2\Sigma^+$ and 2Π resonant states are located at 9.4 and 7.1 eV, resp., with widths of 2.5 and 1.2 eV.

мюрем.
 паврм
 очкх. и
 боруаг.
 космох.

C.A. 1988, 109, N 22

Нсl⁻

1988

2 Д107. Исследование валентного характера состояний HCl⁻ в почти адиабатических КВ расчетах. Research of valence character HCl⁻ states through nearly diabatic CI calculations / Rajzmann M., Spiegelmann F., Malrieu J. P. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 1.— С. 433—440.— Англ.

Неэмпирические расчеты КВ выполнены для системы HCl⁻ с использованием умеренно большого базиса. Для больших межатомных расстояний потенц. кривые трех связанных состояний (два $^2\Sigma^+$ и одно $^2\Pi$) согласуются с кривыми, вычисленными ранее с очень большим базисом. Получены почти адиабатические потенц. кривые для несвязанной области. Разделены валентно подобные резонансные состояния и диффузные состояния, потенц. кривые которых параллельны одной из кривых нейтральной молекулы. Первые почти не зависят

М.П.

ф. 1989, № 2

от базиса, тогда как вторые чувствительны к нему. Для равновесного расстояния HCl первое резонансное состояние $^2\Sigma^+$ лежит на 2,3 эВ выше уровня $v=0$ HCl с шириной 2 эВ. Для вторых резонансных состояний $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$, которые лежат при 9,4 и 7,1 эВ соответственно, ширины равны 2,5 и 1,2 эВ. Л. Д. Б.



HCl

(Om 31647)

1988

Svensson L, Karlsson L.
et al.,

фотометр.

чекмр

J. Chem. Phys., 1988,

89, N 12, 7193 - 7200.

The photoelectron spectrum

* HCl and DCl studied
with ultraviolet excitation,
high resolution X-ray exci-
tation, and synchrotron
radiation excitation: Iso-
tope effects on line pro-
files.

HCL⁺

1988

Waite J., Papadopoulos
M.G.

J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 164, N3-4,
413-415.

(see HF⁺; III)

M.N.

КС

1989

23 Б1261. Спектры однофотонной лазерной флуоресценции HCl и HBr в вакуумном ультрафиолете. Single-photon VUV laser-induced fluorescence spectra of HCl and HBr // Callaghan R., Huang Y.-L., Arepalli S., Gordon R. // Chem. phys. lett.— 1989.— 158, № 6.— С. 531—534.— Англ.,

Методом однофотонной лазерной Фл получены спектры поглощения HCl и HBr в обл. 110,0—116,3 нм с разрешением порядка 0,001 нм. Излучение в УФ-диапазоне обеспечивалось утроением частоты в ячейке, заполненной Kr или Xe, ранее уже удвоенного по частоте излучения УФ-лазера на красителях. Спектры измеряли в статич. условиях для HCl и режиме молек. пучка для HBr. В случае HCl обнаружены сильные линии переходов $X^1\Sigma^+(v''=0) \rightarrow V^1\Sigma^+(v'=15, 16, 17)$, подтвердившие отсутствие вращат. структуры. Для HBr впервые найдены две сильных полосы с центрами на 115,9 нм и 115,5 нм. Первая из них м. б. отнесена к низко лежащему ридбергескому состоянию $M'\Pi(v=1) 6s\sigma$, а вторая, по мнению авторов, к состоянию $6d\pi(v'=0)$.

Н. В. Кулакова

Li-A.

(4)

X. 1989, N 23

HCl

1989

12 Л487. Спектры флуоресценции HCl и HBr с од-
нофотонным ВУФ-лазерным возбуждением. Single-pho-
ton VUV laser-induced fluorescence spectra of HCl and
HBr / Callaghan Robert, Huang Yu-Lin, Arepalli Siva-
ram, Gordon Robert J. // Chem. Phys. Lett.— 1989.—
158, № 6.— С. 531—534.— Англ.

С использованием 3-й гармоники криптонового или
ксенонового лазеров получены спектры возбуждения
флуоресценции HCl и HBr в интервале длин волн
110,0—116,3 нм с разрешением 0,001 нм. Проведено
отнесение спектров. Для молекулы HCl полученный
спектр хорошо согласуется со спектром поглощения из
работы Д. С. Гинтера и др. (J. Mol. Spectrosc.— 1981.—
90.— С. 152). В спектре возбуждения флуоресценции
HBr обнаружены две новые полосы, приписанные пере-
ходам на уровни $v'=0$ ридберговских состояний $6s\sigma$
и $6d\pi$. Отмечено, что использованная эксперим. техника
может применяться для исследования динамики элемен-
тарных химич. реакций.

Е. П. Смирнов

M.A.

⑦

фз. 1989, № 12

HBr

HCl

1989

111: 104865n Single-photon VUV laser-induced fluorescence spectra of hydrogen chloride and hydrogen bromide. Callaghan, Robert; Huang, Yu Lin; Arepalli, Sivaram; Gordon, Robert J. (Dep. Chem., Univ. Illinois, Chicago, IL 60680 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 158(6), 531-4 (Eng). The absorption spectra of HCl and HBr were measured at 110.0-116.3 nm by single-photon vacuum UV laser-induced fluorescence. The HCl spectrum is in agreement with the previous work of D.S. Ginter and M.L. Ginter (1981). For HBr 2 new bands are reported and assigned to the $v' = 0$ level of the 6σ Rydberg state and the $v' = 0$ level of the $6d\pi$ Rydberg state.

(BYP CREMP)

C.A. 1989, 111, ~12

HCl

DM 31445

1989

110: 84317j Application of an improved fitting procedure for diatomic internuclear potentials and Born-Oppenheimer breakdown functions: the $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system of chlorine-35- and chlorine-37-labelled hydrogen chloride. Coxon, J. A. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 133(1), 96-115 (Eng). A numerical procedure for direct fitting of effective $^1\Sigma$ Hamiltonian to spectroscopic data of diat. mols. is described. Approx. Hamiltonians for the X and B states of $H^{37}Cl$, derived from fitted Hamiltonians for $H^{35}Cl$, provided predicted line positions in the $B \rightarrow X$ system of $H^{37}Cl$ that were accurate to $\sim 0.05 \text{ cm}^{-1}$. These calcns. permitted the 1st extensive rotational assignments for 31 bands of this isotopomer ($0 \leq v' \leq 6$; $7 \leq v'' \leq 17$) in spectra recorded previously using HCl prepd. from naturally occurring Cl. The entire $B \rightarrow X$ data set for $H^{35}Cl$ (2010 line positions) and $H^{37}Cl$ (928 line positions), together with 573 vibration-rotation and pure rotation transitions in the X state, were employed simultaneously in fits to the effective X- and B-state Hamiltonians of the 2 isotopomers. Born-Oppenheimer breakdown effects in the $X^1\Sigma^+$ state of HCl are dominated at large internuclear sepns. by coupling to the repulsive $1^1\Pi$ state correlating with ground state atoms.

(B-X)

homework - ul



C.A. 1989, 110, N10

HCl

От 31 445

1989

6 Д94. Применение улучшенной подгоночной процедуры для определения межъядерных потенциалов двухатомных молекул и функций, описывающих эффекты нарушения приближения Борна — Оппенгеймера: система $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ в изотопах $H^{35}Cl$ и $H^{37}Cl$. Application of an improved fitting procedure for diatomic internuclear potentials and Born — Oppenheimer breakdown functions: The $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ system of $H^{35}Cl$ and $H^{37}Cl$ / Coxon J. A. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 133, № 1.— С. 96—115.— Англ..

Описывается численная процедура прямой подгонки параметров эффективных гамильтонианов двухатомных молекул в $^1\Sigma$ -состояниях по экспериментальным спектроскопич. данным. С помощью этой процедуры получены приближенные значения параметров гамильтонианов X - и B -состояний изотопа $H^{37}Cl$ по ранее найденным значениям параметров для изотопа $H^{35}Cl$. Обработка

 $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$

ср. 1989, № 6

эксперим. данных по $B \rightarrow X$ -переходу в рассматриваемых изотопах позволила выяснить условия нарушения для них приближения Борна — Оппенгеймера. Показано, что это приближение нарушается при больших межъядерных расстояниях (высокие колебательные уровни) за счет связи X^1E^+ -состояния с $^1\Pi$ -состоянием. Определены параметры ф-ций, описывающих эффекты нарушения приближения Борна — Оппенгеймера, в предлагаемых модельных гамильтонианах. В. М. Стрельченя



МС

1989

Горюшков В. М.,
Гарков Т. М. и др.

Горбк. ун-т. Горбкий, 1989.

м. п. 18с. Библиогр. 3 маэв. Рус.

Деп. в ВНИИТИ 21. 03. 89,

№ 1785-● В89.

(См. У₂; III)

HCl^+

Om. 33110

1989

DCl^+

Heringer M., Feristev S.
et al.,

$(2\frac{1}{2}, 3\frac{1}{2}, v=1)$

J. Chem. Soc., Faraday

τ

Trans. 2, 1989, 85(10),

1705-

1712.

Radiative

• Lifetimes

of Vibrationally Excited
Ions HCl^+ and DCl^+ ($2/7_{1/2}, 3/2, v=1$)

HCl

1989

Mirva Pipsa,

Pakkanen Tapani.

Смрххм., THEOCHEM 1989,
теор.
раерім 53 (1-2), 79-85.

(См. ● NaH; III)

HCl 1989
HCl - Karlstroem Gunnar.

теор.
расчет,
эксперимент-
тура

J. Phys. Chem. 1989,
93 (12), 4952-5.
(сер. HF; III)

HCl

1989

Keshari A.V.,
Chandra P.

u. n.

7. Mol. Street. 1989.
192, N 3-4. C. 263-270.

(see.  LiCl; III)

М.А. +

(От 32017)

1989

Л-19 Б1225. Вращательная спектроскопия лазерного магнитного резонанса молекулярных ионов галогеноводородов. H^{35}Cl^+ и H^{37}Cl^+ . Laser magnetic resonance rotational spectroscopy of the hydrogen halide molecular ions: H^{35}Cl^+ and H^{37}Cl^+ / Lubic K. G., Ray D., Hovde D. C., Veseth L., Saykally R. J. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 134, № 1.— С. 1—20.— Англ.

Методом лазерного магн. резонанса (ЛМР) в далекой ИК-обл. измерены чисто вращат. спектры молек. ионов H^{35}Cl^+ и H^{37}Cl^+ в состоянии $X^2\Pi$ ($v=0$). Дано подробное описание ЛМР-спектрометра с внутрирезонаторным разрядным источником постоянного тока. Детально описан также теорет. формализм, использованный при анализе спектров ЛМР молек. ионов HF^+ , HCl^+ и HBr^+ (отдельные разделы посвящены тонкой

М.А.

Х. 1989, N 19

и СТ структуре переходов, эффекту Зеемана). Из анализа спектров определены след. значения (в МГц) вращат. постоянной B ; параметра тонкой структуры q ; параметров СТС h , b , eQq_0 , eQq_2 ; электронного орбитального и ядерного вращат. g -факторов, g_e' и g_R ($^2\Pi_{3/2}$): H^{35}Cl^+ (X , $v=0$) — 293441,830; —334,55; 359,8; 132; —7,8; —143; 0,99945; $5,32 \cdot 10^{-4}$; H^{37}Cl^+ (X , $v=0$) — 292999,489; —332,68; 299,1; 99; —8,8; —90; 0,99927; $4,74 \cdot 10^{-4}$. Согласно полученным данным по СТС параметрам электронная плотность в ионах сильно локализована на хлоре при положит. заряде на водороде ($\text{H}^+ : \text{Cl}$). Сопоставлены значения g -факторов для изоэлектронных HCl^+ и SH .

В. М. Ковба

HCl^+

DM 32017

1989

№ 9 Л173.

Вращательная спектроскопия лазерного магнитного резонанса галоидоводородных молекулярных ионов: H^{35}Cl^+ и H^{37}Cl^+ . Laser magnetic resonance rotational spectroscopy of the hydrogen halide molecular ions: H^{35}Cl^+ and H^{37}Cl^+ / Lubic Karen G., Ray Douglas, Hovde David C., Veseth Leif, Saykally Richard J. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 134, № 1.— С. 1—20.— Англ.

Получены спектры лазерного магн. резонанса образованных в разряде ионов HCl^+ на линиях генерации длинноволн. лазера 115,8; 147,9 и 149,3 мкм. Подробно описана конструкция и комплектация спектрометра с поперечной накачкой длинноволн. лазера излучением CO_2 -лазера. Приведены частоты наблюдаемых резонансов и их отнесение к вращательным переходам ионов H^{35}Cl^+ и H^{37}Cl^+ . В основном вибронном состоянии $^2\Pi$, $\bar{\nu}=0$. В использованном для анализа гамильтониане подробно описан учет зеемановского расщепления, даны

М.П.

ф. 1989, № 9

выражения для спин-вращательного и сверхтонкого расщепления. По частотам резонансов определены вращательные постоянные, константы центробежного, спин-вращательного и сверхтонкого расщепления, g -факторы. Полученные данные подтверждают преимущественную конц-ию электронной плотности на атоме Cl. Библ. 46.

М. В. Т.



$H^{35}Cl$

1989

7-3 Б1171. Силы линий в колебательно-вращательной полосе 3—0 газообразного $H^{35}Cl$ и функция электрического дипольного момента. Linestrengths in the 3—0 vibration—rotational band of gaseous $H^{35}Cl$ and the electric dipole moment function / Ogilvie J. F., Lee Yu-an-Pern // Chem. Phys. Lett.— 1989.—159, № 2—3.— С. 239—244.— Англ.

М.П.

Измерены интенсивности линий P - и R -ветвей ($J \leq 11$) вращат. структуры полосы 3—0 в ИК-спектре поглощения молекул $H^{35}Cl$ и $H^{37}Cl$, а также полосы 2—0 (по этой полосе данные не приводятся, лишь

Х. 1990, № 3

отмечается, что они согласуются с выполненными ранее измерениями, см. // Spectrochim. Acta.— 1975.— 31A.— 463). Средняя величина матричного элемента чисто колебат. перехода $\langle 0|M(R)|3\rangle = +(1,875 \pm 0,024) \cdot 10^{-33}$ Кл·м ($\langle 0|M(R)|2\rangle = -(2,712 \pm 0,030) \cdot 10^{-32}$ Кл·м). В результате совместного анализа данных по полосам 3—0 и 3—0 получены и приведены наборы параметров разложения (M_j или P_j , $j=0-7$) ф-ции дипольного момента в $M(x)$ и $M(z)$ представлениях $M(x) = \sum M_j x^j$, $x = (R - R_e)/R_e$; $M(z) = \sum P_j Z^j$, $Z = 2(R - R_e)/(R + R_e)$. В. М. Ковба

HCl^+

1989

Kotzian Manfred,

Rösch Notker, et al.

u. n. Chem. Phys. Lett. 1989.

160, N 2. C: 168-174.

(Cur. ● HF^+ ,)