

CLH2

1971

CH₂
an. no. 25

Boyd R. J.
Whitehead M. A.

J. Chem. Soc.,

1971, A, no. 22, 3549.

(Cov. BM) III

Сравнение орбит. мертвых и живых
популяций наихвоща (ЭВ).

Система параметров.

И-ла	Орбит.	I	II	III	IV	Эксер.
------	--------	---	----	-----	----	--------

ОМ ₂	σ_g	9.17	9.10	10.08(a ₁)	9.44(a ₁)	
	τ_u	13.81	12.66	13.77(b ₁)	12.82(b ₁)	
				13.86(a ₁)	13.60(a ₁)	
	σ_u	16.74	16.25	16.96(b ₂)	16.26(b ₂)	
	σ_g	24.55	31.12	26.62(a ₁)	30.05(a ₁)	

ClH₂

*4-11224

1975

Schwarz W.H.E.,

(AH⁺, Ei
J; cb-ba)

Chem. Phys., 1975

11 Vol, 217-28

70325.I725

40892

1977

MeI, Ch, Ph, TC

Cl + H₂

* 4-17654

K p.N 70325.I724

Schatz George C., Ross John. Franck

condon factors in studies of dynamics of
chemical reactions. II. Vibration-rotation
distributions in atom-diatom reactions.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N3, 1037-1053

(англ.)

0839-мк

811 822

830,

ВИНИТИ

HELL⁺

commen 6048

1978

E, 2200000,
H⁺, J, 10, 110

Jargensen W. L.
J. Amer. Chem. Soc.
1978, 100(4), 1054-61

H₂O

Comptes Rendus 8474 | 1979

Carby P., et al.

Comptes

rendus

J. Mol. Spect.

1979, 54, 247-255

H₂Cl

chem 10071

1980

V93:138259t Semi-empirical potential energy surfaces for the reactions atomic hydrogen + hydrogen chloride → diatomic hydrogen + atomic chlorine and atomic hydrogen (H') + hydrogen chloride → hydrogen chloride (H'Cl) + atomic hydrogen. Last, I.; Baer, M. (Dep. Theor. Phys. Appl. Math., Soreq Nucl. Res. Cent., Yavne, Israel). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 73(3), 514-18 (Eng). The H + HCl potential surfaces for both reaction channels are calcd. by a modified diatomics-in-mols. method including three-center mol. integrals. Using the same adjustable parameters as for the FH₂ system, authors obtain barrier height of 5.2 kcal/mol (abstraction) and 14.2 kcal/mol (exchange). Changing one adjustable parameter only and fitting the exptl. difference between the activation energies of the two reaction channels, they obtain 4.9 and 3.9 kcal/mol resp. for the abstraction and exchange barrier heights.

V₀,
homocyclic
nucleophilic

C.A. 1980, 93, N14

CH₂

[Commick 12280] 1981.

Last J., et al.

Кб. мех.
расчет
номеров.
теорет.
поверхн.

J. Chem. Phys., 1981, 75
(1) ● 288-299

ClH₂

1981

Pandey R. P., et al.

Indian J. Chem., 1981,

A20, N6, 592-593.

परिचय,
स. न.

(सं. LiH₂; III).

CH_2^+

Botschwina Peter. 1983

теор.
расчет
номериз.

ср-м
и колебает.
состоянием.

NATO Adv. Sci. Inst.
Ser., Ser B 1983, 90,
411-14.

(ср. FH_2^+ ; III)

H_2U^+ [om. 31072] 1985

De Frees D. F., McLean A. D.
et al.,

Di; J. Chem. Phys. 1985, 82,
N1, 333-341.

H₂Cl

coll. 24190

1986

Baird N.C., Hadley G.C.

сравнитель-
ный,
теор.
пред-
сказан.

Chem. Phys. Lett.,
1986, 128, N1, 31-37.

ClH_2^+

1986

19 Б1307. Модулированная магнитным полем инфракрасная лазерная спектроскопия полосы ν_2 иона хлорония (ClH_2^+). Magnetic field modulated infrared laser spectroscopy of the chloronium ClH_2^+ ion ν_2 band. Kawaguchi Kentarou, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 12, 6910—6913 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

На диодном лазерном спектрометре с модуляцией поглощения магнитным полем исследован ИК-спектр поглощения в обл. $1000\text{--}1350\text{ см}^{-1}$ молек. иона ClH_2^+ , полученного из смеси $\text{H}_2 + \text{He} + \text{HCl}$ в полом катоде. Идентифицировано 148 линий вращат. структуры полосы ν_2 ионов $^{35}\text{ClH}_2^+$ ($\nu_2 = 1184, 1256\text{ см}^{-1}$) и $^{37}\text{ClH}_2^+$ ($\nu_2 = 1183, 2165\text{ см}^{-1}$). Определены значения вращат. постоянных и постоянных кватричного и секстичного центробежного искажения для основного и возбужденного колебат. состояний этих ионов. Вычислены эффективные величины структурных параметров иона ClH_2^+ : $\text{Cl—H} = 1,3135\text{ \AA}$, $\text{HClH} = 94,3^\circ$. Е. В. Алиева

М.П.

X. 1987, 19, N 19



1986

106: 75205m Magnetic field modulated infrared laser spectroscopy of the chloronium ClH_2^+ ion ν_1 band, Kawaguchi, Kentarou; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(12), 6910-13 (Eng). ClH_2^+ was detected in the gas phase by IR diode laser spectroscopy with magnetic field modulation. The ion was generated by a hollow-cathode discharge in an H_2 , He, and HCl mixt. One hundred and forty eight lines were obsd. between 1040-1330 cm^{-1} , of which 99 and 25 were assigned to the ν_2 fundamental bands of $^{35}\text{ClH}_2^+$ and $^{37}\text{ClH}_2^+$, resp. The obsd. spectra were analyzed by using Watson's A-reduced Hamiltonian to det. the band origins [$\nu_2(^{35}\text{ClH}_2^+) = 1184.1256(2) \text{ cm}^{-1}$; $\nu_2(^{37}\text{ClH}_2^+) = 1183.2165(13) \text{ cm}^{-1}$] and rotational and centrifugal distortion consts. The r_0 structure was calcd. for $^{35}\text{ClH}_2^+$: $r_0(\text{H}-\text{Cl}) = 1.3135(87) \text{ \AA}$ and $\theta_0(\text{HClH}) = 94.3(12)^\circ$ with std. errors in parentheses.

описание
в газ. фазе.
20, 4 HClH,
Vi

C.A. 1987, 106, N 10

H_2Cl^+

1986

105: 105139s Simplest chloronium radical. A neutralization-reionization mass spectrometry study. Wesdemiotis, Chrysostomos; Feng, Rong; McLafferty, Fred W. (Chem. Dep., Cornell Univ., Ithaca, NY 14853-1301 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1986, 108(18), 5656-7 (Eng). H_2Cl^+ from HCl in a chem. ionization (CI) ion source are neutralized with Hg vapor to produce H_2Cl radicals. Some of these survive for nearly 10^{-6} s to yield upon He reionization H_2Cl^+ and fragment ions. H_2Cl is the simplest nonperdeuterated hypervalent radical with a significant obsd. exptl. lifetime in the neutralization-reionization mass spectra of the isotopically labeled precursors, $[DHCl^+] \gg [H_2Cl^+] > [D_2Cl^+]$, and these abundances are dependent on the CI source pressure. To explain these data, the HClH structure initially formed in chem. ionization may rearrange under low pressure conditions to a more stable isomer; this on neutralization yields the stable chloronium radical, suggesting the structure $HHCl$.

стабильность
изомеров.

c. A. 1986, 105, N 12.

H_2Cl^+

1987

Nordholm S.

Austral. J. Chem.,

n.n.

1987, 40, N8, 1465-
-1470.

(cur. NH_3 ; iii)

H_2O^+

(OM-26576)

1987

Sears T. J.,

бывш. экперим.
исследов.

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

H_2Cl^+

(DM. 31142)

1988

Botschwina P.,

Di,
ab initio
prerem
cmpykm.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 2. 1988, 84(9),
1263-76.

$M_2 Cl^+$

(OM 29252)

1988

Hirota E.

Philos. Trans. R. Soc.

LLK
лазерн.

London, A 1988, 324

спектр.

(1578), 131-9.

●
(сер. FHF⁻; III)

H_2Cl^+

DM. 30328

1988

110: 15270b Difference-frequency laser spectroscopy of the ν_1 and ν_3 fundamental bands of chloronium ion (H_2Cl^+): determination of the equilibrium molecular structure. Lee, Sang K.; Amano, T.; Kawaguchi, K.; Oldani, M. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc., Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 130(1), 1-19. (Eng). The gas-phase spectra of the ν_1 and ν_3 fundamental bands of H_2Cl^+ were obsd. with a difference-frequency laser spectrometer at 2525-2755 cm^{-1} . The ions were generated in a hollow cathode discharge through a gas mixt. of HCl and H_2 . A simultaneous least-squares anal. of the ν_1 and ν_3 bands with an effective vibration-rotation Hamiltonian including Coriolis interaction between the $\nu_1 = 1$ and $\nu_3 = 1$ states yielded the band origins (2643.2200 and 2630.1404 cm^{-1} for the ν_1 and ν_3 of $H_2^{35}Cl^+$, and 2641.4931 and 2628.1065 cm^{-1} for the ν_1 and ν_3 of $H_2^{37}Cl^+$, resp.), the rotational consts., and the centrifugal distortion consts. for the ground and excited states. The equil. mol. structure was detd. as $r_e(H-Cl) = 1.30412(17)$ Å and $\theta_e(H-Cl-H) = 94.243(27)^\circ$ for $H_2^{35}Cl^+$ and $r_e(H-Cl) = 1.30411(17)$ Å and $\theta_e(H-Cl-H) = 94.244(26)^\circ$ for $H_2^{37}Cl^+$.

ν_1, ν_3 ,
структур-
параметр

C.A. 1989, 110, N2

H₂Cl

от 30 328 1988

24 Б1390. Лазерная спектроскопия разностной частоты фундаментальных полос ν_1 и ν_3 H₂Cl⁺. Определение равновесной молекулярной структуры. Difference-frequency laser spectroscopy of the ν_1 and ν_3 fundamental bands of H₂Cl⁺. Determination of the equilibrium molecular structure. Lee S. K., Amano T., Kawaguchi K., Oldani M. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 130, № 1, 1—19 (англ.)

С высокой точностью ($\sim 0,001$ см⁻¹) измерены колебательно-вращат. переходы в обл. фундаментальных полос ν_1 и ν_3 (2525—2755 см⁻¹) ионов H₂³⁵Cl⁺ и H₂³⁷Cl⁺. Ионы образовывались в модулированном разряде через смесь H₂/HCl (давл. 0,7 и 0,02 мм). Использовался лазерный спектрометр разностной частоты. Начала полос соотв. при 2643, 2200 и 2630, 1404 см⁻¹ (H₂³⁵Cl⁺); 2641,4931 и 2628,1065 см⁻¹ (H₂³⁷Cl⁺). Для обоих изотопомеров приведены положение и отнесение наблюдаемых переходов; значения вращат. постоянных

М.А.

X. 1988, № 24

(A , B , C) и параметров центробежного искажения (вплоть до секстичных членов приведенного гамильтониана Ватсона A -типа в I^r представлении) в основном и возбужденном колебат. состояниях; параметры кориолисова взаимодействия (h_{13} и h_{13}'); параметры колебательно-вращат. взаимодействия (α_A , α_B , α_C). Равновесные значения A_e , B_e , C_e и геометрич. параметры R_e ($\text{H}-\text{Cl}$) и Θ_e (HClH) равны: $\text{H}_2^{35}\text{Cl}^+ - 11,22835$; $9,15450$; $5,04582 \text{ см}^{-1}$; $1,30412 \text{ \AA}$, $94,243^\circ$; $\text{H}_2^{37}\text{Cl}^+ - 11,19572$; $9,15463$; $5,03918 \text{ см}^{-1}$; $1,30411 \text{ \AA}$; $94,244^\circ$.
В. М. Ковба



H_2Cl^+

1988

12 Л170. Разностно-частотная лазерная спектроскопия основных полос ν_1 и ν_3 H_2Cl^+ : определение равновесной молекулярной структуры. Difference-frequency laser spectroscopy of the ν_1 and ν_3 fundamental bands of H_2Cl^+ : determination of the equilibrium molecular structure. Lee Sang K., Amano T., Kawaguchi K., Oldani M. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 130, № 1, 1—10 (англ.)

Методом разностно-частотной лазерной спектроскопии в области основных полос ν_1 и ν_3 изучен ИК-спектр поглощения молекулярных ионов H_2Cl^+ , образованных посредством электрич. разряда в смеси $HCl:H_2$. С точностью $\sim 0,001 \text{ см}^{-1}$ в области $2525\text{—}2755 \text{ см}^{-1}$ измерены положения ~ 1100 колебательно-вращательных линий ионов $H_2^{35}Cl^+$ и $H_2^{37}Cl^+$. В результате колебательно-вращательного анализа с учетом взаимодействия Кориолиса между ν_1 и ν_3 представлена интерпретация наблюдаемого спектра. Определены значения молекулярных постоянных ионов для основного и возбужденных колебательных состояний и геометрич. параметры равновесной конфигурации ионов. Библ. 43.
В. К.

И.А.

ср. 1988, N 12

H_2Cl^+

Om. 29402

1988

№ 16 Б1249. Микроволновый спектр иона H_2Cl^+ . The microwave spectrum of the H_2Cl^+ ion. Saito S., Yamamoto S., Kawaguchi K. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2281—2283 (англ.)

В диапазоне 270—500 ГГц измерена СТС четырех вращат. переходов ($1_{11}-0_{00}$, $2_{20}-2_{11}$, $2_{11}-2_{02}$, $3_{21}-3_{12}$) иона H_2Cl^+ . Ионы получались при пропускании смеси $HCl/H_2/He$ через разрядный источник с полым катодом постоянного тока. Ионы идентифицированы на основании анализа СТС переходов по хлору. Подтверждением образования ионов в полем катодом является также возрастание интенсивности линий при наложении внешнего магн. поля. Значения вращат. постоянных и параметров ядерного квадрупольного взаимодействия иона (в МГц): $A=337353,229$, $B=273586,425$, $C=148100,004$, $\Delta_{yh}=-71,814$, $\chi_{aa}=-53,44$, $\chi_{bb}=-15,71$, $\chi_{cc}=69,15$. В свете полученных результатов обсужден характер связи $H-Cl$ в ионе. В. М. Ковба

М.П.

Х. 1988, 19, N 16

H_2Cl^+

(Om. 29402) 1988

8 Л168. Микроволновый спектр иона H_2Cl^+ . The microwave spectrum of the H_2Cl^+ ion. Saito Shuji, Yamamoto Satoshi, Kawaguchi Kentarou. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2281—2283 (англ.)

В области 270—500 ГГц зарегистрированы вращательные переходы $1_{11}—0_{00}$, $2_{20}—2_{11}$, $2_{11}—2_{02}$ и $3_{21}—3_{12}$ молекулярного иона H_2Cl^+ . Идентификация иона выполнена по сверхтонкой структуре, обусловленной ядром атом Cl. Отнесение линий к молекулярному иону подтверждено зависимостью интенсивности линий от магн. поля. Определены вращательные постоянные, постоянная центробежного искажения, постоянные квадрупольного взаимодействия для ядра Cl.

Е. А. Ж.

М.П.

ф. 1988, 18, № 8

H_2Cl^+

Dm 29402

1988

109: 63470t The microwave spectrum of the chloronium (H_2Cl^+) ion. Saito, Shuji; Yamamoto, Satoshi; Kawaguchi, Kentaro (Fac. Sci., Nagoya Univ., Nagoya, Japan 464). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(4), 2281-3 (Eng). Four rotational transitions of the H_2Cl^+ ion were obsd. in the frequency region 270-500 GHz by using a source-modulated microwave spectrometer combined with a hollow cathode free space cell. The H_2Cl^+ ion was generated by a d.c. discharge in a mixt. of HCl, H_2 , and He. The ion was identified on the basis of the hyperfine structure of the Cl nucleus. This was further confirmed by the observation of the line intensity decrease with external magnetic field, which is a characteristic of ions in a hollow cathode discharge. The rotational consts. A , B , and C , and the centrifugal distortion const. Δ_K were detd. The nuclear quadrupole coupling consts. of the Cl nucleus were obtained for the 1st time: $\chi_{aa} = -53.44(47)$ MHz, $\chi_{bb} = -15.71(50)$ MHz, and $\chi_{cc} = 69.15(70)$ MHz with 3 std. errors in parentheses. The character of the H-Cl bond orbital is estd. from the obsd. nuclear quadrupole coupling consts. and the mol. structure.

Yb Chemps,

M.A.

C.A. 1988, 109, N8

H₂Cl

1989

4 Б1025. Глобальные поверхности потенциальной энергии для H₂Cl. Global potential-energy surfaces for H₂Cl / Schwenke D. W., Tucker S. C., Steckler R., Brown F. B., Lynch G. C., Truhlar D. G., Garrett B. C. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 6.— С. 3110—3120.— Англ.

Рассчитана Пв потенциальной энергии (ППЭ) для основного состояния молекулы H₂Cl, охватывающая широкие обл. изменения внутренних координат и предназначенная для использования при анализе возможных р-ций присоединения и обмена в данной системе. Варианты ППЭ получены на основе неэмпирич. расчетов с последующей экстраполяцией энергии, учитывающей, т. н. масштабированную внешнюю корреляцию. Параметр масштабирования выбирается с привлечением эксперим. данных по энергии диссоциации (в данном случае для H₂ и HCl). Исходный расчет

М.Л.

X.1990, №4

методами многоконфигурац. ССП и конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений выполнен с использованием базисов $(18s11p4d-1f)/[12s7p4d1f]$ для Cl и $(6s3p1d)/[4s3p1d]$ для H. Предложенные два варианта ППЭ различаются аппроксимацией сечения P_v вдоль деформационных координат $H-Cl-H$. Вычислены основные x -ки переходных состояний, а также барьеры на путях реакции. Даны оценки констант скоростей реакций $H+DCl \rightarrow HD+Cl$ и $H+DCl \rightarrow HCl+D$. А. В. Немухин

H_2Cl^+ . . . (DM. 34371)

1990

Li Y., Wang X., Jensen F.
et al.

J. Amer. Chem. Soc., 1990,
112, N 10, 3922-3926.

Energies and Properties of
Ions Involved in Electrophilic
Halogenations: singlet and

Triplet states of Halogen cations (X^+ , X_3^+ , and X_4^{2+}) and Hydrohalonium Ions (HX_2^+ and H_2X^+).

ClH_2^-

1990

Ortiz J. V.

J. Phys. Chem. 1990.

et. n. 94, N 12. C. 4762-
4763.

(ceer. OH_3^- ; III)

H_2Cl^+

Om. 35497

1991

nomens.
Hessine,
mop.
paccin

Glenwinkel-Meyer Th.,
Ch. Ottinger et al.,
Chem. Phys. 1991, 152,
N 3, 409 - 427.

MRCI potential ● energy func-

tions for the charge
transfer reactions $H^+ + HCl (X^1\Sigma^+)$
 $\rightarrow H + HCl^+ (X^2\Pi, A^2\Sigma^+)$.

H_2Cl^+

1991

10 Б1121. Модель двухатомных фрагментов в молекулах для поверхностей потенциальной энергии состояний $^1A'$ H_2Cl^+ . A diatomics-in-molecules model for the $^1A'$ potential energy surfaces of H_2Cl^+ / Kuntz P. J., Roach A. C., Hirst D. M. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 21.— С. 8364—8370.— Англ.

Методом двухатомных фрагментов в молекулах рассчитаны потенциальные поверхности (ПП) ряда низших электронных состояний типа $^1A'$ иона H_2Cl^+ . Модельный гамильтониан построен с использованием 10 базисных ф-ций без включения каких-либо подгоночных параметров для трехатомной молекулы. Метод позволил воспроизвести форму трех низших ПП, рассчитанных точными неэмпирич. методами. Полученные ПП использованы для описания пути р-ции $H^+ + HCl$ ($X^1\Sigma^+$) $\rightarrow$ $H + HCl^+$ ($A^2\Sigma^+$). Рассчитано положение конич. пересечения второй и третьей поверхности и обсуждено его влияние на динамику реакции. А. А. Сафонов

М.А.

X. 1992, № 10

H_2Cl^+

1998

130: 173283a Structure and potential energy function for the H_2Cl^+ (X^1A_1) system. Wang, Fanhou; Jiang, Gang; Jing, Fuqian; Zhong, Yanping; Zhu, Zhenghe (Lab. Shock Wave & Detonation Physics Research, Southwest Institute Fluid Physics, CAEP, Chengdu, Peop. Rep. China 523-61). *Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao* 1998, 15(4), 501-505 (Ch), Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao Bianjibu. Anal. potential energy function for the ground state of H_2Cl^+ is derived by the many body expansion method using its equil. geometry, dissoci. energy and harmonic force consts. calcd. with CID/6 - 311G. The potential surface of H_2Cl^+ (X^1A_1) has a saddle point on the $Cl+H_2^+$ channel with a barrier of 0.5eV.

X^1A_1

comp-pa u
p-ue

romeris. hum.

P.A. 1999, 130, N13

2000

F: Cl-H₂

P: 3

134:287151 Rotationally resolved infrared spectrum of the Cl-H₂ anion complex. Wild, D. A.; Wilson, R. L.; Weiser, P. S.; Bieske, E. J. School of Chemistry, The University of Melbourne, Parkville, Australia. J. Chem. Phys. (2000), 113(22), 10154-10157. in English.

The mid-IR spectrum of the ³⁷Cl-H₂ anion complex has been measured over the 3990-4050 cm⁻¹ range (H-H stretch region) using IR vibrational predissocn. spectroscopy. The spectrum features a well resolved Σ - Σ transition red shifted by 156 cm⁻¹ from the free H₂ mol. stretch. Anal. of the P and R branch line positions using a linear mol. energy level expression yields $\nu_0=4004.77\pm0.08$ cm⁻¹, $B''=0.853\pm0.002$

cm-1, $D''=(9.3\pm1.0)\times10^{-5}$ cm-1, $B'=0.919\pm0.002$ cm-1, and $D'=(9.0\pm1.0)\times10^{-5}$ cm-1. The Cl-H₂ complex appears to have a linear equil. structure, with a vibrationally averaged sepn. of 3.19 .ANG. between the Cl- and the H₂ center-of-mass. Vibrational excitation of the H-H stretch induces a 0.12 .ANG. contraction in the intermol. bond.



Cl-H₂

2007

Aquilanti, Vincenzo, et al.,

J. Phys. Chem. A 2007,
105 (11), 2401-2409

romulus-
robertxh.,
neopem-
pavem

(all.  F-H₂; III)

$\text{Cl}^- - \text{H}_2$
 $\text{Cl}^- - \text{D}_2$

2001

135: 248788h The $^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2$ and $^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2$ anion complexes: Infrared spectra and radial intermolecular potentials. Wild, D. A.; Weiser, P. S.; Bieske, E. J.; Zehnacker, A. (School of Chemistry, The University of Melbourne, Parkville, 3010 Australia). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(2), 824-832 (Eng), American Institute of Physics. Rotationally resolved mid-IR spectra of the $^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2$ and $^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2$ anion complexes are measured in the regions assocd. with the H_2 and D_2 stretch vibrations. The $^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2$ spectrum contains a single $\Sigma - \Sigma$ transition assigned to the more abundant ortho H_2 contg. species. The corresponding $^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2$ spectrum consists of two overlapping $\Sigma - \Sigma$ transitions whose origins are sepd. by 0.24 cm^{-1} , and which are due to absorptions by complexes contg. para and ortho D_2 . The spectra are consistent with linear equil. structures for $\text{Cl}^- - \text{H}_2$ and $\text{Cl}^- - \text{D}_2$, although zero-point bending vibrational excursions are expected to be substantial. Ground

UK chemist
 $\text{D}_0(^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2)$

C. A. 2001, 135, N17

state vibrationally averaged intermol. sepns. between Cl^- and the diat. center-of-mass are deduced to be $3.195 \pm 0.003 \text{ \AA}$ ($^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2$) and $3.159 \pm 0.002 \text{ \AA}$ ($^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2$). Vibrational excitation of the diat. core profoundly affects the intermol. interaction and leads to contractions of $0.118 \text{ \AA}$ ($^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2$) and $0.078 \text{ \AA}$ ($^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2$) in the vibrationally averaged intermol. sepns. Effective one-dimensional radial potential energy curves are developed. Their form near the equil. sepn. is detd. by Rydberg-Klein-Rees inversion of the spectroscopic data, and at longer ranges by averaging the dominant long range electrostatic and induction potentials over the angular motion of the atom-diat. system. On the basis of these potentials the dissocn. energies for $^{35}\text{Cl}^- - \text{H}_2(\text{o})$, $^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2(\text{p})$, and $^{35}\text{Cl}^- - \text{D}_2(\text{o})$ are estd. as 488, 499, and 559 cm^{-1} .

