

C - инертные
газы



He-C₂H₂ (mix)

1971.

Herzberg G.

"Quarterly Rev"

1971, 25 v2,

201-222.

enclp

cm m u c e 1687

CO+Ne

1973

Borrell, Peter;

Mullward, Geoffrey E.

J. Chem. Soc., Faraday Trans.
2: 1973, 69 (Pt. 7), 1060-70.

Время
реакции

Jan 20; (III)

40911.1327

Ch, Ph, TC

CO_2 -Ar (mix) 1974
4-6146

Dagg I.R., Reesor G.E., Urbaniak J.L.

Collision induced microwave absorption

in CO_2 -Ar, CO_2 -CH₄ mixtures in the 2.3 cm^{-1}
region.

"Can. J. Phys.", 1974, 52, N11, 973-978

(англ., рез. франц.)

147

153

180

0188

ВИНИТИ

40911.1301

A, TC

HeC²⁺ ; HeC⁺ (E)
38226 02

1974

2417

Harrison S.W., Henderson G.A., Massa L.J.,
Solomon P. Hartree-Fock bound states for
molecule-ions HeC²⁺ and HeC⁺.

"Astrophys. J.", 1974, 189, N3, Part 1, 605-607
(англ.)

0188

152 155

ВИНИТИ

40906.6085

Ch, TC

41245

Xe - C₂F₆

1974

* 4-6021

Sieck L.W., Gorden R., Jr, Ausloos P.
Reactions of fluorocarbon ions in C₂ F₆.
Implications for the radiolysis.

"J.Res.Nat.Bur.Stand.", 1974, A78, N2,
151-156

(англ.)

0136 БИЛТ 1

151 153



ВИНИТИ

40906.6085

Ch, TC

41245

 $K_2 + C_2F_6$

1974

* 4-6021

протониз.

Sieck L.W., Gorden R., Jr, Ausloos P.
Reactions of fluorocarbon ions in C_2F_6 .
Implications for the radiolysis.

"J. Res. Nat. Bur. Stand.", 1974, A78, N2,
151-156

(англ.)

0186 БСН

151 153

8

ВИНИТИ

40916.9038

96200

02

1974

Ph, Ch, TE

 $Ne + CO \rightarrow C^+ + Ne + O$ * 4-6261Teloy E., Gerlich D.

Integral cross sections for ion-molecule reactions. I. The guided beam technique. "Chem. Phys.", 1974, 4, N 3, 417-427
(англ.)

0190 1974

152 155

ВИНИТИ

41003.84218

Ch, Ph, TG

30088

CH₄-He (Di) D

1974

2517

Varanasi Prasad, Pugh Larry A., Bangaru
 Babu R.P. Measurement of multiplet intensities and noble gas-broadened line widths in the γ ; fundamental of methane.

"J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer",
 1974, 14, N 9, 829-838

(англ.) 0205 пик

166 168

-10.

ВИНИТИ

41003.84218

Ch, Ph, TS

30088

CH₄-Ne (Di) D

1974

2517

Varanasi Prasad, Pugh Larry A., Bangaru
 Babu R.P. Measurement of multiplet inten-
 sities and noble gas-broadened line widths
 in the γ ; fundamental of methane.

"J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer",
 1974, 14, N 9, 829-838

(англ.) 0205 пик

166 168

-19-

ВИНИТИ

41003.84218

Ch, Ph, TG

30088

CH₄-Ar (217)

1974

2517

Varanasi Prasad, Pugh Larry A., Bangaru
 Babu R.P. Measurement of multiplet inten-
 sities and noble gas-broadened line widths
 in the γ ; fundamental of methane.

"J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer",
 1974, 14, N 9, 829-838

(англ.)

0205 пик

166 168

-19.

ВИНИТИ

60102.6607

TC, Ch, Ph

96201

 $\text{CH}_4 + \text{Ar}$

1975

3628

Behrens Richard, Jr. Freedman Andrew,
Herm Ronald R., Parr Timothy P.

Elastic differential cross sections and
intermolecular potentials for $\text{Ar} + \text{CH}_4$

and $\text{Ar} + \text{NH}_3$. "Chem. Phys. Lett.", 1975,
36, N 4, 446-450

(англ.)

0534 ПМК

504 506

528

ВИНИТИ

51128.3424

4 1125

1975

Ch, Ph, TC, LGU

 $C_4H:Ar$

1370852

Dismuke K.I., Graham W.R.M., Weltner W.,
Jr. Optical and ESR spectra of the C_4H
radical in rare gas matrices at 4K.

"J.Mol.Spectrosc.", 1975, 57, N 1, 127-137

(англ.)

0517 пик

480 481

ВИНИТИ

He- H₂CO

1975

Green, Skeldon, et al.

nomencl. nov.

J. Chem Phys 1975
63(3) 1154-61 (eng)

(all Li⁺-H₂; III)

М. В. спектр, структур.

50904.7316
Ph, TC, MGU

40892
ArOCS

1975

* 4-9725

Harris Stephen J., Janda Kenneth C.,
Novick Stewart E., Klemperer William.
Intermolecular potential between an
atom and a linear molecule: the
structure of ArOCS.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 2, 881-884
(англ.)

0413

415 415 0435

ВИНИТИ

51209.6763

Ch, MGU, TC

 $Ar^+ + CO_2$
96559
 $Ar^+ + N_2O$

1975

3540

Harland P.W., Ryan K.R. Some low
energy electron transfer processes for
 CO_2 and N_2O . "Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys.", 1975, 18, N 3, 215-
227

(англ.)

0520 цнк

480 485

ВИНИТИ

CO-Ar

1976

Гайдаенко В.И.

Ж. техн. физ. 1976, 46, №
852-6.

(мем. л. л.)
(ист. л. л.)

(См N₂-Ar) III

61123.7291.

Ch, Ph, Ex-C TC

Ar: HCCl_2F
93200

(абсорбционные хара-
ктеристики)

1976

4802

Jacox Marilyn E., ¹Miligan Dolphus E.

Matrix isolation study of the products
of the interaction of electrons and
metastable argon atoms with HCCl_2F .

"Chem. Phys.", 1976, 16, N 2, 195-208
(англ.)

0751 пик

714 715

7 4 3

ВИНИТИ

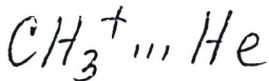
1976

 C^+-He Li^+-H_2 Li^+-N_2 Na^+-N_2 K^+-N_2 номери.
клуба

85: 68530h Computation of interaction potentials between closed-shell particles and between open-shell and closed-shell particles. Ishikawa, Toshiaki; Kita, Shigetomo; Inouye, Hokotomo (Res. Inst. Sci. Meas., Tohoku Univ., Sendai, Japan). *J. Phys. Soc. Jpn.* 1976, 40(5), 1446-8 (Eng). The electron-gas model (R. G. Gordon and Y. S. Kim, 1972; Y. S. K. and G., 1974) was used to calc. the interat. potentials [$V(r)$, r = internuclear distance] for the systems M^+-Xe (M = Li, Na, or K), Rb^+-R , and Cs^+-R (R = helium-group-gas atom). A modification of the electron-gas model was used to calc. $V(r)$ for M^+-H , M^+-X , and X^+-R (M^+ = alkali metal ion; X = C, N, or O; R = helium-group-gas atom). The ion-diat. mol. repulsive potentials for M^+-N_2 and M^+-CO (M^+ = alkali metal ion) were calcd. by using the dumbbell model (I. Amdur, et al., 1957), in generally good agreement with the available exptl. data. Representative numerical results are presented for the systems C^+-He , Li^+-H_2 , and M^+-N_2 (M = Li, Na, or K).


 (+4) ☒

C.A. 1976 85 N10



1977

21 Б22. Неэмпирический расчет энергии взаимодействия метильного катиона с атомом гелия. Беспалов В. Я., Коробочко Н. А. «Ж. структур. химии», 1977, 18, № 2, 381—382

кв. мет.
расчет

Неэмпирическим методом ССП МО в миним. и расширенном гауссовых базисах построена потенциальная кривая энергии взаимодействия плоского катиона CH_3^+ с атомом гелия (симметрия комплекса $\text{CH}_3^+ \cdots \text{He } C_{3v}$). По данным расчета в расширенном базисе минимум энергии достигается при $R_{\text{He}} = 4,47$ ат. ед., энергия связи равна 0,73 ккал/моль.

В. Я. Беспалов

Х. 1977 № 21

Ar - CD

1947

Lloyd J., et al.

J. Chem. Soc.

Faraday Trans. 2, 1947,

73, N2, 234-44.

(-civ)

(между
потенц.)

He + CO

[в журн. ошн 3363a] 1977

Monchick L.

J. Chem. Phys. 66
N7, 3085-93

(шмолк.
заговорит
сечение)

He + CO₂ [ommuu 7225] 1978.

Keil M. et al.

методом.

поверхности.

Chem. Phys. Lett.

1978, 59 (3), 443-48

ArOCs

ArCO₂

monom.

oligom.

Klemperer W.

"Adv. Laser. Chem. Proc.
Conf., Pasadena, 1978."
Berlin, 1978, 389-407

(see Ar₂; III)

CO-Ar

форма
полос.

ж. 1979, № 4

7578
7 Б213. Вклад колебательно-фононного взаимодействия в форму колебательных полос двухатомных молекул в матрицах инертных газов. Metiu Horia, Korzeniewski Gregory E., Hone Daniel. The contribution of vibration phonon interaction to the vibrational line-shape of diatomics in noble gas matrices. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 58, № 3, 473—477 (англ.)

Предложена одномерная, анигармонич. модель для расчета формы полос в колебательных спектрах двухатомных молекул, изолированных в матрице инертного газа. Для проверки теор. выводов выбрана система CO-Ar. Расчеты проведены с помощью теории возмущений многих тел для цепочки, содержащей молекулу CO и по десять атомов аргона с каждой стороны. Вычисленные ширины полос значительно меньше измеренных и линейно зависят от T -ры при $T < 20$ К. Рассчитанные сдвиги полос отличаются от наблюдаемых по знаку и, кроме того, зависят от T -ры, что противоречит эксперим. результатам. Сделан вывод, что существенный вклад в результаты расчета должны внести либрац. (вращательные) степени свободы, а также различия в окружении молекул CO. В. М. Ковба

Ag-CO

1978

9 Б68. Поверхности межмолекулярной потенциальной энергии, полученные методами электронного газа. III. Зависимость взаимодействия Ag—CO от угла, расстояния и колебательной координаты. Parker Gregory A., Pack Russell T. Intermolecular potential energy surfaces from electron gas methods. III. Angle, distance, and vibrational dependence of the Ag—CO interaction. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 7, 3268—3278 (англ.)

Методом электронного газа рассчитаны участки поверхности потенциальной энергии системы Ag—CO в области короткодействующего отталкивания в зависимости от расстояния r между атомом Ag и центром масс молекулы CO, угла между осью CO и прямой, вдоль которой отсчитывается расстояние r , и колебательной координаты — межъядерного расстояния в молекуле CO. Использованы хартри-фоковские волновые функции, полученные Клементи для атома Ag и Мак-Лином и Йошиминем для молекулы CO. В некоторых точках результаты вычислений сопоставлены с данными расчетов

расчет
поверхности
потенциальной
энергии

Т. 1978, № 9

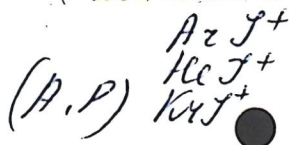
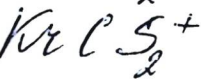
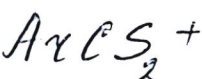
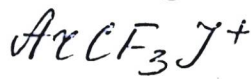
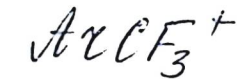
методом Харгиса—Фока. Отмечено, что расхождения между энергиями, полученными двумя методами, не превышают 10%. Для анализа дальнедействующей области потенциальной энергии методом определены коэф. C_6 , C_7 и C_8 ван-дер-ваальсова разложения потенциала взаимодействия $Ar-CO$. Результаты представлены также для систем $He-CO$, $Ne-CO$, $Kr-CO$ и $Xe-CO$. Проведена аналитич. аппроксимация точек поверхности, найденных методом электронного газа, и двумя способами согласованы между собой области короткодействия и дальнего действия. С построенными едиными потенциалами рассчитаны значения второго вириального коэф. как функции T -ры. Сопоставление с эксперим. данными позволяет сделать заключение, что один из построенных потенциалов приводит к несколько лучшим результатам.

А. В. Немухин

мен.
динг

1978

90: 43984z Formation of complex ions during collisions of metastable atoms of inert gases with carbon disulfide, sulfur hexafluoride, and trifluoroiodomethane molecules. Stepanov, A. N.; Perov, A. A.; Kupriyanov, S. E.; Kabanov, S. P. (Nauchno-Issled. Fiz. Khim. Inst. im. Karpova, Moscow, USSR). *Khim. Vys. Energ.* 1978, 12(6), 552-4 (Russ). The associative ionization in binary mixts. of inert gases (He, Ar, Kr) with SF_6 , CS_2 , and CF_3I at thermal energies was studied mass-spectrometrically. The complex ions ArCF_3^+ , ArCF_3I^+ , ArI^+ , HeI^+ , KrCF_3I^+ , KrI^+ , ArCS_2^+ , KrCS_2^+ , KrSF_5^+ , and KrSF_6^+ were obsd. The results indicate that, with the exception of KrSF_5^+ and KrSF_6^+ , all complex ions are formed during interaction of metastable inert gas atoms with mols. The formation of KrSF_5^+ is attributed to interaction of highly-excited (~ 14 eV) Kr atoms with SF_6 .



(+8)

C.A. 1979, 99, 26

$KrCF_5^+$ Степанов А.Н. и др.

1948

Хим. физ. Жерг., 1948, 12(6),
552-4.

(A.P.)

(см. $ArCF_3^+$; III)

ArC⁺

summary 7949

1979

nonces
p-445

90: 157349b The potential energy curves of ArC⁺. Hillier, I. H.; Guest, M. F.; Ding, A.; Karlau, J.; Weise, J. (Dep. Chem., Univ. Manchester, Manchester, Engl.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(2), 864-9 (Eng). Potential energy curves for different states of the mol. ArC⁺ were detd. by exptl. and theor. methods. Elastic scattering cross sections obtained from the scattering of C⁺(²P) and C⁺(⁴P) on Ar were used to det. the bound ground state X²II with the use of an inversion method, and to discuss qual. higher excited states. CI calcns. performed for several doublet and quartet states dissocg. into C⁺(²P)+Ar(1S), C⁺(⁴P)+Ar(1S), and C(³P)+Ar(²P) are in good agreement with the exptl. findings. The nature of the bonding is discussed and spectroscopic consts. for the bound potential curves are given.

C.A. 1979. 90 n 20

ArC^+

кривая
потенциала

9 Д154. Кривая потенциальной энергии ArC^+ . Hil-
lier I. H., Guest M. F., Ding A., Karlau J., We-
ise J. The potential energy curves of ArC^+ . «J. Chem.
Phys.», 1979, 70, № 2, 864—869 (англ.) 1979

Измерено угловое распределение ионов C^+ , рассеян-
ных на Ar , в области энергий 4—100 эв в Л-системе ко-
ординат. Полученные результаты использованы для по-
строения потенц. кривой (ПК) основного состояния си-
стемы ArC^+ . Для этой же системы рассчитаны ПК со-
стояний $X^2\Pi$, $^2\Sigma^-$ (диссоциативный предел — $C^+(^2P) +$
 $+Ar(^1S)$), $1^4\Sigma^-$, $^4\Pi$, $^2\Sigma^+(C(^3P) + Ar(^2P))$ и $2^4\Sigma^-(C^+$
 $(^4P) + Ar(^1S))$. Расчеты выполнены в приближениях
ССП и КВ, учитывались (с некоторыми ограничениями)
одно- и двукратно возбужденные валентные конфигу-
рации. На ПК основного состояния $X^2\Pi$ имеется мини-
мум глубиной 0,33 эв при 2,2 Å (приближение ССП)
или 1,2 эв при 2,0 Å (КВ). ПК термов $^2\Sigma^-$,
 $^2\Sigma^+$, $2^4\Sigma^-$ имеют репульсивный характер. В области
межатомных расстояний около 3 Å наблюдается квази-
пересечение двух термов $^4\Sigma^-$. Определены значения
спектроскопич. параметров состояний $^2\Pi$ (эксперимен-
тальные и теоретические) и $1^4\Sigma^-$ и $1^4\Pi$ (теоретические).
В. И. Барановский 6667 2990

Ф. 1549, № 9

$C_2H_4:Ag$

И. и. к.
1 спектр

1979

17 Б228. Инфракрасные спектры матрично изолированного и твердого этилена. Образование этиленовых димеров. Rytter Erling, Gruen Dieter M. Infrared spectra of matrix isolated and solid ethylene. Formation of ethylene dimers. «Spectrochim. acta», 1979, А35, № 3, 199—207. (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения ($200-4000\text{ см}^{-1}$) этилена в Ag^+ -матрицах при соотношениях $C_2H_4:Ag$ от 1:1 до 1:999 и в матрице ксенона $C_2H_4:Xe$ (1:24) в т-рном интервале 15—105 К. Из изменений относит. интенсивностей полос, их смещений и статистич. расчетов предложена схема интерпретации данных мономер → димер → агрегат → кристалл. Наиболее характерные полосы димерных и мономерных молекул C_2H_4 в Ag (данные для мономера в скобках): ν_{10} 824 сл. (831 сл.), ν_7 950 о. о. с. (948 о. о. с.), ν_{12} 1438 о. с. (1441 о. с.), ν_{11} 2984 с. (2997 с.), $\nu_2 + \nu_{12}$ 3073 ср. (3084 ср.), ν_9 3099 см^{-1} с. (3114 см^{-1} с.); в матрице Xe частоты димера составляют 825, 947, 1434, 2978, 3067, 3096 (с. =

1979, N 14

=сильная, ср.=средняя, сл.=слабая, о.=очень). Для димера $(C_2H_4)_2$ предложен тип симметрии D_{2d} , димер стабилизирован четырьмя очень слабыми Н-связями С—Н...л при заметном вкладе сил отталкивания водород — водород. Измерены также ИК-спектры тв. C_2H_4 в т-рном интервале 15—85 К и подтверждено наличие в нем двух фазовых модификаций. Б. В. Рассадин

Spec

AgCH₃Cl

м.б. спектр

Оттиски 9150

1979

10 Б251. Микроволновый спектр комплекса аргон-метилхлорид. Steed Joseph M., Bernstein Lawrence S., Dixon Thomas A., Janda Kenneth C., Klemperer William. The microwave spectrum of argon methyl chloride. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 11, 4189—4191 (англ.)

Методом электр. резонанса в молек. пучке измерены МВ-спектры низкого разрешения комплекса AgCH₃Cl в области частот от 1 до 22 ГГц. Измерены частоты 27 переходов для AgCH₃³⁵Cl и 9 переходов для AgCH₃³⁷Cl. Ввиду достаточной сложности спектры не могут быть интерпретированы в рамках модели жесткого симм. волчка. Большинство МВ-переходов не м. б. также связано с квадрупольной СТС. Отсюда сделан вывод, что комплекс не является симм. волчком, и атом аргона отклонен от оси, соединяющей атомы углерода и хлора.

С. Н. Мурзин

Х. 1980. №10

1416 - 9141

от.

Ar... CH₃Cl

Оттиск 9150

1979

6 Д395. Микроволновый спектр комплекса Ar...
...CH₃Cl. The microwave spectrum of argon methyl chloride. Steed Joseph M., Bernstein Lawrence S., Dixon Thomas A., Janda Kenneth C., Klemperer William. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 11, 4189—4191 (англ.)

М. В. Скляр
Методом электрич. резонанса в молекулярном пучке исследован вращательный спектр ван-дер-ваальсового комплекса Ar...CH₃Cl (I). В диапазоне 1—20 Гц обнаружены 27 линий I—³⁵Cl и 9 линий I—³⁷Cl, которые не могут быть интерпретированы в рамках модели симметричного волчка. М. Р. Алиев

Ф 1980 №6

1516 - 714
XII - 714

1979

ArCO₂

91: 29925v Determination of the structure of ArCO₂ by radiofrequency and microwave spectroscopy. Steed, J. M.; Dixon, T. A.; Klemperer, W. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(9), 4095-100 (Eng). The species ArCO₂ produced by adiabatic expansion was structurally characterized by mol. beam elec. resonance spectroscopy. ArCO₂ is shown to have C_{2v} symmetry. The spectroscopic and structural consts. are given. Comparison is made with a no. of proposed Ar-CO₂ intermol. potentials. The detd. force consts. are poorly fitted by a spherical Ar-O interaction.

Cmpd.

Elect. prop.

M. S. Encl.

C.A. 1979, 91, N4

XIV-9060

AgCO_2

м.н.; измер.

Х. 1080. №2

011. XIV-9064 19 79

2 Б303. Определение структуры AgCO_2 методами радиочастотной и микроволновой спектроскопии. Steed J. M., Dixon T. A., Klemperer W. Determination of the structure of AgCO_2 by radiofrequency and microwave spectroscopy. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 9, 4095—4100 (англ.)

Методом электрич. резонанса в молек. пучке измерены частоты вращательных переходов $\Delta J=1$, $\Delta K=0$ со значением $K=2$ в области 10—20 ГГц и асимм. дублетных переходов для $K=2$ и $K=4$ в области 0—230 МГц для комплекса AgCO_2 , полученного при адиабатич. расширении газовой смеси 4% CO_2 в Ag при т-ре $\sim 200^\circ \text{K}$. Попытки наблюдать вращательные переходы $\Delta J=1$ для $K=0$ и $K=4$ оказались безуспешными. Анализ спектра выполнен в приближении плоского асимм. полужесткого волчка с использованием гамильтониана в представлении Вильсона — Говарда с включением центробежной поправки. Вращательные постоянные равны (МГц) $A=$

$=11\,914(80)$, $B=1979,87(25)$, $C=1682,75(70)$ и постоянные центробежного искажения (в кгц) — $\tau_{aaaa}=-15,97$, $\tau_{bbbb}=-98,3(20)$, $\tau_{aabb}=0$, $\tau_{abab}=-907(120)$. По эффекту Штарка 2-го порядка для перехода $2_{21}-2_{20}$ определен дипольный момент комплекса $\mu=0,06793(20)$ D. На основе полученных данных определены структурные параметры $r(\text{Ag}-\text{C})=3,493(10)$ А, $\angle \text{OSAg}=82,5(20)^\circ$, силовые постоянные и колебательные частоты для $\text{Ag}-\text{C}$ колебаний $\omega_s=37,5(7)$ см $^{-1}$, для торс. кол. CO_2 -группы относительно оси $\text{Ag}-\text{C}$ $\omega_b=27,5(20)$ см $^{-1}$ и плоских колебаний CO_2 -группы $\omega_b=670(1)$ см $^{-1}$. Полученные значения структурных параметров и силовых постоянных согласуются с величинами, вычисленными при помощи модельных потенциалов.

С. Н. Мурзин



1979

AgCO₂

2 Д440. Определение структуры комплекса "AgCO₂" методами радиочастотной и микроволновой спектроскопии. Determination of the structure of AgCO₂ by radio-frequency and microwave spectroscopy. Steed J. M.,

Dixon T. A., Klemperger W. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 9, 4095—4100 (англ.)

В диапазонах 8 Кгц — 225 Мгц и 11—18,5 Ггц методом электрич. резонанса в молекулярном пучке исследован вращательный спектр ван-дер-ваальсового комплекса Ag...CO₂, полученного в сверхзвуковом сопле. Идентифицированы линии 13 вращательных переходов основного колебательного состояния. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных: $A=11\,914$, $B=1979,87$, $C=1682,75$ Мгц; $\tau_{aaa}=-15,97$, $\tau_{bbb}=-98,3$, $\tau_{abab}=-907$ кгц. Показано, что AgCO₂ имеет T-образную структуру с симметрией C_{2v}.

М. Р. Алиев

M.T.

молекуляр.
структ.

Ф. 1580. №2

6.906
XIV - 9064

$\text{CF}_4\text{—He}$

1980

и.к. спектр
погл.

12 Д411. Индуцированный столкновениями трансляционный спектр газовой смеси $\text{CF}_4\text{—He}$. The collision-induced translational spectrum of $\text{CF}_4\text{—He}$ gas mixtures. Afanasev A. D., Bulanin M. O., Tonkov M. V. «Соп. Ж. Физ.», 1980, 58, № 6, 836—839 (англ.; рез. франц.)

Получены спектры ИК-поглощения чистого CF_4 и его газовой смеси с гелием при $t \approx 213 \text{ K}$ в области $25\text{—}400 \text{ см}^{-1}$. Описана использованная в опытах многоходовая газовая кювета высокого давления с темпера-

Ф. 1980 N 12

турной регулировкой. В спектре чистого CF_4 в области $180\text{--}400\text{ см}^{-1}$ наблюдаются полосы, отнесенные к разностным переходам разрешенного спектра, приведены частоты и интенсивности этих полос. Полоса, расположенная в области $25\text{--}100\text{ см}^{-1}$, связана с индуцированным столкновениями вращательным спектром CF_4 . В спектре смеси $\text{CF}_4\text{--He}$ обнаружена широкая полоса с максимумом вблизи 150 см^{-1} , отнесенная к трансляционным переходам пары $\text{CF}_4\text{--He}$. Эта полоса связана с появлением дипольного момента, возникающего при перекрывании электронных оболочек сталкивающихся молекул. С использованием спектральных моментов этой полосы определены параметры индуцированного дипольного момента. Интерпретация спектра $\text{CF}_4\text{--He}$ подтверждается совпадением рассчитанного и наблюдаемого контуров. Библ. 25. М. Т.

ArC₂H₂

ошибка 10182

1980

молекула
структ;
св-ва

✓ 93: 140229b Structure and properties of the argon-acetylene van der Waals molecule. DeLeon, Robert L.; Muentner, J. S. (Dep. Chem., Univ. Rochester, Rochester, NY 14627 USA). J. Chem. Phys. 1980, 72(11), 6020-3 (Eng). Radio-frequency spectroscopy and Stark effect measurements were carried out on Ar.HC:CH and Ar.DC:CD produced in HC:CH seeded Ar beams. Because of the very small elec. dipole moment, $\mu = 0.02697(3)$ D, only the 1₁₀-1₁₁ transition and low frequency pure Stark transitions were obsd. Observations are only compatible with a T-shaped equil. structure with an Ar to HC:CH distance of 3.25(1) Å. D hyperfine data provide a 204.4(10) kHz value for eqQ of HC:CH and $\arccos(\sqrt{\langle \cos^2\theta \rangle}) = 72(1)^\circ$ for the complex.

ацет
ко

24.1980, 93, N14

$\text{Ar} \cdot \text{HC} \equiv \text{CH}$

оптисси 10182

1980

3 Б256. Структура и свойства ван-дер-ваальсовой молекулы—аргон—ацетилен. DeLeon Robert L., Muentner J. S. Structure and properties of the argon-acetylene van der Waals molecule. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 11, 6020—6023 (англ.)

Исследованы МВ-спектры комплексов $\text{Ar} \cdot \text{HC} \equiv \text{CH}$ и $\text{Ar} \cdot \text{DC} \equiv \text{CD}$ в холодной струе Ар, содержащей добавку $\text{HC} \equiv \text{CH}$ или $\text{DC} \equiv \text{CD}$ проведены также измерения штарк-эффекта. В спектре наблюдался только переход $1_{10} \rightarrow 1_{11}$, комплекс обладает очень малым дипольным моментом $\mu = 0,02697(3)D$. Характер спектра согласуется с T-образной структурой комплекса с расстоянием Ар—ацетилен, равным 3,25 (1) А, что на 0,25 А меньше суммы ван-дер-ваальсовых радиусов. Большая амплитуда колебаний комплекса и тот факт, что приведенная масса для деф. кол. примерно равна вращательной постоянной ацетилена, указывают на очень низкую частоту деф. кол., вероятно, меньшую чем 10 см^{-1} .

Я. М. Кимельфельд

М. П.,
структура

X. 1981 N3

Ar-C₂H₂

оттиски 10182

1980

Ar-C₂D₂

структура
и св-ва,

М. П.

Ф. 1981
N 1

1 Д370. Структура и свойства ван-дер-ваальсовой молекулы аргон-ацетилен. Structure and properties of the argon-acetylene van der Waals molecule. De Leon Robert L., Muentner J. S. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 11, 6020—6023 (англ.)

В диапазоне 10—1000 МГц исследованы микроволн. спектры поглощения ван-дер-ваальсовых молекул Ar-C₂H₂ и Ar-C₂D₂, образованных при истечении молекулярной струи из сверхзвукового сопла с диаметром 25 мк. При 218,04—218,06 МГц в спектрах Ar-C₂H₂ обнаружено 5 линий, которые по эффекту Штарка и методом двойного резонанса отнесены к сверхтонкой структуре вращательного перехода l_{10} — l_{11} в основном колебательном состоянии Т-образной молекулы Ar-CH₂. Аналогичные линии Ar-C₂D₂ обнаружены при 263 МГц. Определены значения вращательных постоянных, дипольного момента и постоянной квадрупольной связи. Для Ar-C₂H₂ получено: $B=3170$, $C=2960$ МГц; $\mu=0,02697$ ед. Дебая; $eqQ(D)=204,4$ Кгц. М. Р. Алнев

CO-инертн. газы

1980

93: 54545v Potential of interaction of a carbon monoxide molecule with atoms of inert. gases. Gaidaenko, V. I.; Chlenova, G. V. (Inst. Fiz. Atmosfer., Moscow, USSR). Zh. Tekh. Fiz. 1980, 50(6), 1338-40 (Russ). The potential energy for CO interaction with He, Ne, Ar, Kr, and Xe was calcd. as a function of internuclear distance and angle of interaction and averaged over vibrational levels $v = 0, 1, 2$. The potential is expressed as a Legendre polynomial expansion. The results for CO-Ar agree well with available exptl. data.

номени
сп-гус

CA 1980 93 n 6

ArCO₂

Lommuca 9295 / 1980

Klemperer w.

номер.
написан

J. Mol. Spect.,
1980, 59, 161-176.

(Cur. Ne₂; III)

CO... Ar.

no metal.
sp - 400

V90 11710k The geometry and vibrational frequency shift of carbon monoxide molecules in an argon matrix studied by force field calculations. Manz, J.; Mirsky, K. (Tech. Univ. München, 8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1980, 48(3), 457-68 (Eng). The CO...Ar interaction potential including pairwise and 3-body contributions which reproduces the *exptl.* CO vibrational frequency shift, $\Delta\omega = -4.7 \text{ cm}^{-1}$ in a static force-field approxn., is presented. The geometry of the CO-Ar solid system is described in detail. The frequency shift is obtained when the CO mol. is oriented along the (0,0,1) crystal axis, with its center of mass shifted by 0.25 Å from the center of interaction, and with the surrounding 1st shell Ar atoms relaxed into an approx. ellipsoidal cage. The semi-axes of the ellipsoid deviate from the radius of the undistorted 1st shell, 3.756 Å, by only 0.06 Å. The 2nd shell of the Ar atoms is also distorted into an ellipsoidal cage but the deviations from the sphere in this case are an order of magnitude smaller than for the 1st shell. Distortions of more distant crystal sites are negligible. Substitution of an Ar atom by a CO mol. with subsequent lattice relaxations into the min. potential energy configuration results in a decrease in potential energy of 0.16 kJ mol⁻¹. The 3-body contributions to the CO...Ar potential have only a negligible influence on the geometry of the CO-Ar system (including the lattice relaxations) but a strong influence on the vibrational frequency shift.

1980

Summer 9181

CA 1980 22 v20

CO...Ar

mere ar.
not ems.

CA 1980 92 v20

V92: 171709s Carbon monoxide molecules in an argon matrix: empirical evaluation of the argon...argon, atomic carbon...argon and atomic oxygen...argon potential parameters. Mirsky, Kira (Tech. Univ. Muenchen, 8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). Chem. Phys. 1980, 46(3), 445-55 (Eng). A potential force field was evaluated for the calcn. of the properties of the solid CO-Ar system. The CO...Ar potential energy was expressed as a sum of the C...Ar and O...Ar interat. interactions. The (6-exp) Buckingham form of the atom-atom potential, $\varphi = -A/r^6 + B \exp(-\alpha r)$, was used (r is the interat. distance). The values of the A , B and α numerical parameters for the C...Ar and O...Ar potentials were obtained from those for the C...C, O...O, and Ar...Ar potentials using known combining rules. These values are the following $A_{C...Ar} = 3379 \text{ kJ/mol } \text{\AA}^6$, $C_{C...Ar} = 3.12 \times 10^5 \text{ kJ/mol}$, $\alpha_{C...Ar} = 3.493 \text{ \AA}^{-1}$, $A_{O...Ar} = 2737 \text{ kJ/mol } \text{\AA}^6$, $B_{O...Ar} = 3.28 \times 10^5 \text{ kJ/mol}$, $\alpha_{O...Ar} = 3.706 \text{ \AA}^{-1}$. The 3 parameters of the Ar...Ar potential function ($A_{Ar...Ar} = 6554 \text{ kJ/mol } \text{\AA}^6$, $B_{Ar...Ar} = 3.27 \times 10^5 \text{ kJ/mol}$, $\alpha_{Ar...Ar} = 3.305 \text{ \AA}^{-1}$) were fitted to a set of exptl. data for the Ar crystal (zero-temp. lattice spacing and energy, and the value of the isothermal compressibility). The CO...Ar potential surface was calcd. showing the most favorable position off an Ar atom near the CO mol. and the orientational dependence of the CO...Ar interactions. The CO...Ar sepn. distance at the potential min. and the depth of the potential well are equal to 3.63 $\text{\AA}$ and -1.321 kJ/mol, resp. Comparison was made of the derived Ar...Ar and CO...Ar potential functions with other such functions available in the literature.

1980

9182

00000000

CO₂-Ne

1980

memor.
noting.

93: 32006t On the anisotropy of the intermolecular potential of the carbon dioxide-neon system in the repulsive short-range region. Odier, Simone; Cantara, J. L.; Fliszar, Sander (Dep. Rech. Phys., Univ. Pierre et Marie Curie, 75230 Paris, 05 Fr.). Chem. Phys. Lett. 1980, 71(2), 307-11 (Eng). For CO₂-Ne interactions, numerical values of the intermol. potential energies (ΔE) were obtained in ab-initio variational calcns. with STO-3G basis functions. For repulsive short-range interactions, $\Delta E = a(\theta) \sum r_i^{-12}$, with the anisotropy effects expressed by the proportionality coeff. $a(\theta)$, where θ is the angle between the OCO mol. axis and the line between the C and Ne atoms, and the r_i represent the distances between the Ne atom and the atoms of the CO₂ mol.

CA 1980 93 ~4

$ArCH_2X$

$ArCHX$

$X = CN; SN; OH;$
 $SeH; Cl; Br; I;$
 $Cl_2; F_2; Br_2$

V.

Patsep
b. paucis
8 p-p.e.

Commica 11098

1980

Parr W. J. P.
et al.

Accounts Chem. Res.
1980, 13 (11), 400-406.

1980

 $\text{CH}_4 \dots \text{He}$ $\text{CH}_4 \dots \text{He}^+$

4 Д117. Взаимодействие неполярных молекул в рамках метода ПСГО. Unpolare Molekülwechselwirkungen im Rahmen des FSGO-Ansatzes. Schädler H. D., Gründler W. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1980, 261, № 6, 1124—1128 (нем.)

Эл. строение

В рамках метода плавающих сферических гауссовых функций (ПСГФ) исследовано электронное строение комплексов неполярных систем $\text{CH}_4 \dots \text{He}$ (I, 4 конфигурации), $\text{CH}_4 \dots \text{He}^+$ (II) и $\text{CH}_4 \dots \text{CH}_4$ (III, 6 конфигураций). Проведена оптимизация геометрии. Для I энергетически наиболее выгодной (хотя все структуры нестабильны) найдена структура симметрии $C_{3\sim}$ с расположением He на оси симметрии 3-го порядка со

④1 $\text{CH}_4 \dots \text{CH}_4$

ф. 1981 н 4

стороны грани. метана, расстояниями С—Не и Н—Не 5,982 и 5,637 ат. ед. и дипольным моментом 0,00596 ед. Дебая; для III наиболее выгодна структура типа голова к хвосту с расположением связей С—Н двух молекул на одной оси и шахматной конформацией групп CH_3 (энергия стабилизации 1,4 кдж/моль). Для II энергия стабилизации оценена в 7,8 кдж/моль. На основании полученных результатов кратко обсуждены вопросы взаимодействия неполярных и слабополярных систем и отмечено, что притягивающие взаимодействия сильно зависят от взаимной ориентации систем.

В. Л. Л.

1980

C-Ar

O-Ar

C-Ne

Al-F

J-Cl

метод расчета
орбит коррел.
диаграмм.

X. 1981 № 9

9 Б14. Приближение Томаса—Ферми для двухатомных квазимолекул. Корреляционные диаграммы для нейтральных гетероядерных систем. Toeprfer A., Gross E. K. U., Dreizler R. M. Thomas—Fermi approach to diatomic quasimolecules: correlation diagrams for neutral, heteronuclear systems. «Z. Phys.», 1980, A298, № 3, 167—171 (англ.)

Развит метод расчета орбитальных корреляц. диаграмм для двухатомных нейтр. гетероядерных квазимолекул. На первом этапе находится ф-ция распределения электронной плотности как решение ур-ния Томаса—Ферми—Дирака—Вайцсеккера с двухцентровыми граничными условиями. На втором этапе с полученной ф-цией плотности строится одночастичный эффективный потенциал Хартри—Фока—Слейтера. На третьем этапе с этим потенциалом решается двухцентровое ур-ние Шредингера вариацион. методом в базисе функций Хиллерааса, записанных в эллипсоидальных координатах. Метод применен к расчету корреляц. диаграмм для систем C—Ar, O—Ar, C—Ne, Al—F и J—Cl.

В. Б. Павлов-Вережкин

(44)



1980

6 Д107. Расчет двухатомных молекул методом Томаса — Ферми. Корреляционные диаграммы для нейтральных гетероядерных систем. Thomas — Fermi approach to diatomic quasimolecules: correlation diagrams for neutral, heteronuclear systems. Toeplitz A.,

см. на обороте.

C-Br

O-At

C-Ne

I-Cl

Al-F

кв. мех.
расчет

(+4) ☒

ЖЕНИ
Я

Р. 1981. № 6

Gross E. K. U., Dreizler R. M. «Z. Phys.», 1980, A298, № 3, 167—171 (англ.)

Рассчитываются молекулярные системы C—Ag, O—Ag, C—Ne, J—Cl, Al—F. Потенциал Хартри—Фока аппроксимирован аналитич. выражением $-Z_1\Phi_1(r_1)/r_1 - Z_2\Phi_2(r_2)/r_2$, Z_1, Z_2 — заряды ядер, r_1, r_2 — расстояния до двух ядер. Каждая из экранирующих ф-ций Φ_1, Φ_2 задана аналитической четырехпараметрич. ф-лой. Параметры ф-ций Φ_1, Φ_2 при заданном межъядерном расстоянии R ищутся вариационным путем по методу Томаса — Ферми — Дирака — Вайцзеккера. Для каждой системы приведены значения всех восьми параметров при различных межъядерных расстояниях. При известном аналитическом «хартри-фоковском» потенциале одноэлектронное уравнение Шрёдингера решается вариационно. Пробные ф-ции выбирались хиллераасовского типа. Для каждой системы при различных R рассчитаны энергии нескольких низших (до десяти) орбиталей. Построены корреляционные диаграммы. Кроме того, рассчитана полная энергия системы в 1-м порядке теории возмущений. Для системы Al—F в положении равновесия рассчитанная полная энергия оказалась выше хартри-фоковского результата на 0,07%.

Л. Н. Иванов

$\text{CO}_2\text{-He}$

[Ommuck 12991] 1981

эмиссион.
спектр
Фурье

Bailey D., Farrenq et al.,
J. Mol. Spectrosc., 1981,
90, N 1, 74-105.

$\text{CO}_2\text{-N}_2\text{-He}$

[Ommuck 12991] 1981

Эмиссион.
спектр
Фурье

Bailey D., Farreng et al.,
J. Mol. Spectrosc., 1981,
90, N1, 74-105.

$Ar_n(C_2Cl_4)_m^+$ оттт. 13540 1981

9 Д219. Образование промежуточных ионов из ван-дер-ваальсовых кластеров. Ионы $Ar_n(C_2Cl_4)_m^+$; предполагаемое участие их в детектировании солнечных нейтрино. Generation of «bastard» molecular ions from van der Waals clusters: $Ar_n(C_2Cl_4)_m^+$ ions, suspected interlopers in collection of solar neutrinos. Bue-low S. J., Worsnop D. R., Herschbach D. R. «Proc. Nat. Acad. Sci. USA. Phys. Sci.», 1981, 78, № 12, 7250—7253 (англ.)

образование

Сообщается об образовании молекулярных ионов $Ar_n(C_2Cl_4)_m^+$ при бомбардировке ван-дер-ваальсовых кластеров электронами с энергией 25 эВ. Кластеры получались из смеси Ar/C_2Cl_4 , пропускаемой в высоковакуумную камеру через сверхзвуковое сопло. Ионы $Ar_n(C_2Cl_4)_m^+$ с $n=0-29$ и $m=0-4$ идентифицировались с помощью квадрупольного масс-филтра в интервале ат. масс 516—546. Представлен типичный

ф. 1982, 18, № 9

масс-спектр, на котором выделяются пики, соответствующие ионам $^{40}\text{Ag}_{13}^+$, $\text{Ag}_9(\text{C}_2\text{Cl}_4)^+$, $\text{Ag}_5(\text{C}_2\text{Cl}_4)_2^+$ и $\text{Ag}(\text{C}_2\text{Cl}_4)_3^+$ с различным изотопным содержанием ^{37}Cl и ^{35}Cl . Обнаружены также пики, соответствующие изотопам ^{13}C и ^{36}Ag . Подозревается влияние ионов $^{37}\text{Ag}^+$, образуемых в реакции $^{37}\text{C}(\nu, e^-)^{37}\text{Ag}^+$, на детектируемые солнечные нейтрино. Библ. 20. И. Флакс

CHe^+ , CHe^{2+}

Оттиск 12963 1981

CHe^{n+} ($n=1-7$)

4 Д156. Молекулярные ионы инертных газов. Noble gas molecular ions. Cooper David L., Wilson Stephen. «Mol. Phys.», 1981, 44, № 1, 161—172 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базе сгруппированных гауссовых ф-ций исследовано электронное строение AHe^+ и AHe^{2+} , $\text{A}=\text{C}, \text{N}, \text{O}$; CHe^{n+} , $n=1-7$, а также XHe^+ , $\text{X}=\text{CH}_3, \text{NH}_2, \text{OH}$. Рассчитаны потенц. кривые, равновесные длины связей, распределения электронной плотности, энергии связи. Обнаружено, что AHe^+ обладают энергиями связи $< 3000 \text{ см}^{-1}$ (наиболее стабилен OHe^+), поэтому их обнаружение в межзвездной среде представляется маловероятным; не должны наблюдаться и многозарядные ионы. Насыщенные системы XHe^+ , аналоги метана, аммиака и воды, связаны слабо. В то же время расчеты показали, что сильно ненасыщенные системы (HeCN^+ , HeC_2H^+ , HeN_2^{2+} и HeCO^{2+}) являются прочно связанными (энергии связи 5000, 11 000, 22 000 и 30 000 см^{-1}).

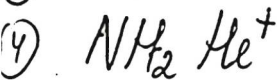
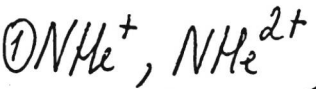
В. Л. Лебедев

потенциал
кривые

75

Ф. 1982, 18, № 4.

не отпеч



$\text{CH}_3 \text{He}^+$

[Ommuck 12963] 1981

Cooper D. L., et al.

Mol. Phys., 1981, 44,
N 1, 161-172.

потенц.
кривые.

●
(см. CH_3^+ , CH_3^{2+} , III)

CHe^{n+}

Оттиск 12 963

1981

8 Б31. Молекулярные ионы благородных газов. Cooper, David L., Wilson Stephen. Noble gas molecular ions. «Mol. Phys.», 1981, 44, № 1, 161—172 (англ.)

Методом ССП МО рассчитаны энергии молек. ионов, в состав к-рых входит гелий: CHe^{n+} ($n=1, \dots, 7$), NHe^+ , NHe^{2+} , OHe^+ , OHe^{2+} , CH_3He^+ , NH_2He^+ , OHHe^+ , HeCN^+ , HeC_2H^+ , HeCO^{2+} , HeN_2^{2+} . Найдено, что однозарядные ионы $\text{CHe}^+(^2\Pi)$, $\text{NHe}^+(^3\Sigma^-)$, $\text{OHe}^+(^2\Pi)$ являются слабо связанными с энергиями диссоциации менее 3000 см^{-1} . Увеличение заряда иона до $2+$ приводит к увеличению стабильности (энергия диссоциации $^3\Sigma^-$ -состояния OHe^{2+} равна 21000 см^{-1}), а при дальнейшей ионизации системы становятся несвязанными. Насыщенные многоатомные ионы, изоэлектронные CH_4 , NH_3 , H_2O , являются слабо связанными с энергией до 1500 см^{-1} , ненасыщенные же системы HeCN^+ , HeC_2H^+ , HeN_2^{2+} , HeCO^{2+} должны быть стабильными.

А. В. Немухин

расчет
энергии

х. 1982,
19, № 8.

48

NHe^+ , NHe^{2+} , OHe^+ , OHe^{2+} , CH_3He^+

CH_3He^+ (Оммуек 12963) 1981
Cooper D. L., et al.

расчёт
энергии · Mol. Phys., 1981, 44,
N 1, 161-172.

● (см. CH_e^{n+} , III)

CHe_n^+

Оммуек 12963

1981

$n = 1-7$

Cooper D.L.,

номеры.
кривые

Mol. Phys., 1981, 44, N1,
161-172

He CN⁺
He C₂H⁺

Ommuck 12963 1981
Cooper D. L., et al..

распределение
спектров

Mol. Phys., 1981, 44,
N 1, 161 - 172.

● (св. CHeⁿ⁺; III)

He CO²⁺

[Ommuck 12963] 1981
Cooper D. L., et al.

распределение
спектров

Mol. Phys., 1981, 44,
N1, 161 - 172.

● (сер. CHeⁿ⁺; III)

Ar-CO₂

Коммуна 11653

1981

Dreyfus C; et al.

мемол.
помехам
взаимодейств.,
сил. пост;
равнов. расстан.
(Re)

Chem. Phys. Lett;
1981, 79 (3), 476-480.

Ar · CH₃Cl

Оттиск 12302 1981

1 Д70. Структура ван-дер-ваальсовой молекулы Ar · CH₃Cl. The structure of the Ar · CH₃Cl van der Waals molecule. DeLeon R. L., Muentner J. S. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 3, 1113—1115 (англ.)

Методом микроволн. спектроскопии в молекулярных пучках исследована структура ван-дер-ваальсовой молекулы Ar · CH₃Cl. Наблюдались 11 новых переходов, что совместно с ранними микроволн. данными по этому комплексу позволило определить в рамках модели жесткого ротатора три вращательные постоянные (A, B и C), а следовательно, и геометрич. структуру комплекса. Найдено, что последний имеет Т-образную форму с расстоянием между атомом Ar и центром масс молекулы CH₃Cl, равным 3,68 Å, и углом между межмолекулярной осью и осью симметрии молекулы θ , рав-

геометрич.,
структура,
м.п.

Ф. 1982, 18, № 4.

ным 85° . Такая структура была использована при расчете вращательных постоянных и частоты переходов в $\text{Ag} \cdot \text{CH}_3^{37}\text{Cl}$ и было получено хорошее согласие с эксперим. данными. Полученные результаты обсуждаются в связи с качественными теоретич. моделями слабо связанных комплексов, предсказывающими, в частности, линейную структуру для $\text{Ag} \cdot \text{CH}_3\text{Cl}$. А. А. З.

Оттиск 12302

1981

 $\text{Ar} \cdot \text{CH}_3\text{Cl}$

5 Б342. Строение ван-дер-ваальсовой молекулы $\text{Ar} \cdot \text{CH}_3\text{Cl}$. DeLeon R. L., Muentner J. S. The structure of the $\text{Ar} \cdot \text{CH}_3\text{Cl}$ van der Waals molecule. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 3, 1113—1115 (англ.)

Измерены вращательные спектры в РЧ- и МВ-диапазонах ван-дер-ваальсовой молекулы $\text{Ar} \cdot \text{CH}_3\text{Cl}$ и идентифицированы 11 новых линий, ранее не наблюдававшихся в МВ-спектрах этой системы (Steed J. M. и др., «J. Chem. Phys.», 1979, 71, 4189); впервые предложено

д. н., геометр.
структура

отношение для большинства линий из всей совокупности данных. Эксперим. результаты удовлетворительно описываются моделью жесткого ротатора с вращательными постоянными $A=13393(20)$, $B=1650(20)$, $C=1507(20)$ МГц для ^{35}Cl - и $13160(40)$, $1620(40)$, $1450(40)$ для ^{37}Cl -изотопных аналогов. Молекула $\text{Ar} \cdot \text{CH}_3\text{Cl}$ имеет T-образную структуру (Ar подходит к связи C—Cl сбоку) при расстоянии между Ar и центром масс CH_3Cl 3,68(1) Å.

Б. В. Рассадин

х. 1982, 19, 15

Ar-CH₃Cl

Ommuck 12302

1981

95: 86732m The structure of the argon.chloromethane van der Waals molecule. DeLeon, R. L.; Muentner, J. S. (Dep. Chem., Univ. Rochester, Rochester, NY 14627 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(3), 1113-15 (Eng). Eleven new radio frequency and microwave transitions were obsd. in Ar.CH₃Cl. Combining this data with the previously unassigned microwave spectrum (J. M. Steed et al., 1979) produced a satisfactory fit of the data. The structure obtained places Ar 3.68(1) Å from the CH₃Cl center of mass in an orientation perpendicular to the symmetry axis. Ar.CH₃Cl represents the first contradiction of simple donor-acceptor models for predicting the structure of van der Waals mols.

у в енеке,
отрухмппа

C.A. 1981, 95, N10.

$C_6H_6^+ \cdot Ar$

1981

(y)

14 Б96. Потенциал ионизации комплекса бензола с аргоном в струе. Fung K. H., Henke W. E., Hays T. R., Seizie H. L., Schlag E. W. Ionization potential of the benzene—argon complex in a jet. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 24, 3560—3563 (англ.)

Методом резонансной двухфотонной ионизации (РДИ) в сверхзвуковом потоке измерена энергия ионизации (ЭИ) вандерваальсова комплекса бензола с Ar при $T=3\text{ K}$. Величина ЭИ для $C_6H_6^+Ar$ на 151 см^{-1} (18,7 мэВ) отличается от ЭИ для бензола. Вероятным путем образования комплекса является столкновение $C_6H_6^+$ с Ar. В полном спектре флуоресценции бензола в токе Ar отсутствует сигнал $C_6H_6^+Ar$. В ходе эксперимента с РДИ происходит незначит. распад $C_6H_6^+Ar$, тогда как при ионизирующих частотах лазера, превышающих пороговые энергии комплекса и несвязанного бензола, сигнал $C_6H_6^+Ar$ отсутствует. Д. В. Загоревский

х. 1982, 19, № 14.

$C_6H_6 - Ar$

1981

/96: 94355b Structure of the benzene-argon complex in the gas phase at 3 Kelvin. Fung, K. H.; Selzle, H. L.; Schlag, E. W. (Tech. Univ. Muenchen, Munich, Fed. Rep. Ger.). Z. Naturforsch., A 1981, 36A(12), 1338-9 (Eng). The structure of the benzene-Ar complex was detd. from a high-resoln. band contour of the ν_8 transition of the complex measured in a hypersonic jet. The Ar is located on the main symmetry axis of the benzene mol. and its distance from the center of the benzene ring is 3.4 Å.

ν_8 , симметрич.
комплекс

C. A. 1982, 96, N 12

Ar - C₆H₆

1981

У 7 Д396. Структура комплексов Ar—бензол в газовой фазе при 3 К. Structure of the benzene-argon complex in the gas phase at 3 Kelvin. Fung K. H., Selzle H. L., Schlag E. W. «Z. Naturforsch.», 1981, A36, № 12, 1338—1339 (англ.)

структура

С высоким разрешением исследован контур полосы ν_6 комплексов Ar—бензол в сверхзвуковой струе. В результате анализа контура определена структура комплекса. Показано, что атом Ar располагается на главной оси симметрии молекулы бензола. Расстояние от атома Ar до центра бензольного кольца равно 3,4 Å.

В. С. Иванов

ф. 1982, 18, № 7.

$(C_{18}H_{12})Ag_n$

1981

7 Д627. Ван-дер-Ваальсовы молекулы «тетрацен-аргон». Tetracene-argon Van der Waals molecules.

Griffiths Anne M., Freedman Philip A.
«Chem. Phys.», 1981, 63, № 3, 469—474 (англ.)

спектр

На основании данных флуоресцентных исследований показано, что в процессе сверхзвукового расширения паров тетрацена в присутствии избытка Ag происходит образование ван-дер-ваальсовых комплексов типа $(C_{18}H_{12})Ag_n$ (I). Возбуждение флуоресценции I осуществлялось с помощью лазера на красителе в области $21\,700\text{--}22\,700\text{ см}^{-1}$, соответствующей локализации 0—0-полосы электронного перехода $^1A_{1g} \rightarrow ^1B_{1u}$ в спектрах поглощения тетрацена. Выделены полосы возбуждения комплексов I с последовательно присоединенным числом атомов Ag от 1 до 10. Из эксперим. результатов по разрешенным во времени спектрам флуоресценции различных образований получены величины верхнего предела их энергий ван-дер-ваальсовой связи в основном (274 см^{-1}) и возбужденном (314 см^{-1}) электронных состояниях.

Т. А. Ш.

Ф. 1982, 18, № 7.

$(C_{18}H_{12})Ar_n$
с n до 10.

спектр, λ_0 ,
 λ_i

1981

11 Б988. Ван-дер-ваальсовы молекулы тетрацен—аргон. Griffiths Anne M., Freedman Philip A. Tetracene—argon van der Waals molecules. «Chem. Phys.», 1981, 63, № 3, 469—474 (англ.)

Образование ван-дер-ваальсовых комплексов тетрацена и аргона $(C_{18}H_{12})Ar_n$ с n до 10 в примесном газодинамич. пучке исследовалось по флуоресценции, лазерно возбужденной на переходе, соотв.-щем возбуждению молекулы тетрацена в состояние 1B_u . Идентифицирована также локализация ван-дер-ваальсовых связей. Разрешенные спектры флуоресценции использовались для определения энергии связи в основном и возбужденном состояниях, а также энергии нижнего перехода для колебания по связи тетрацен—аргон.

А. И. Маергойз

X, 1982, 19, N 11.

СМОСНО-Аг

1981

2 Д950. Электронная релаксация, индуцированная диссоциацией ван-дер-ваальсовых комплексов. Интеркомбинационная конверсия в комплексах Аг и He с глиоксалем. Electronic relaxation induced by the dissociation of van der waals complexes: Intersystem crossing in 1A_u Ar and He glyoxal complexes. Jouvét Christophe, Soep Benoit. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 4, 1661—1666 (англ.)

Исследованы спектры возбуждения флуоресценции ван-дер-ваальсовых комплексов глиоксаля с Аг и He, в сверхзвуковой струе. Установлено, что при электронном возбуждении комплексов последние диссоциируют с образованием флуоресцирующего 1A_u или нефлуоресцирующего 3A_u состояний глиоксаля. Последнее возникало при диссоциации комплексов с Аг из нижнего вибронного состояния $\bar{A}_{e0}$, причем отношение эффективности диссоциации по этому каналу к относит. выходу 3A_u за счет тушения при столкновениях оценено $(1,2 \pm$

Спектры
флуорес.(H) 

ф. 1982, 18, №2.

СМОСНО-He

$\pm 0,2$). Сделан вывод, что образование состояния 3A_u при диссоциации комплекса идет по тому же каналу, что и при низкоэнергетич. столкновениях свободных молекул глиоксаля с атомами He. Библ. 16. С. Литке



$\text{CHOCCHO}-\text{He}$

1981

Jouvet Ch., et al.

спектры
прегресс. J. Chem. Phys., 1981, 45,
N 4, 1661-1666.

●
(см. $\text{CHOCCHO}-\text{Ar}$; (III))

1981

[Dmmuck 12418]

ArClCN

95: 70426d Rotational spectrum, structure, and intramolecular force field of the ArClCN van der Waals complex. Keenan, M. R.; Wozniak, D. B.; Flygare, W. H. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(2), 631-40 (Eng). The rotational spectrum of the ArClCN van der Waals complex was assigned using pulsed Fourier transform microwave spectroscopy in a Fabry-Perot cavity with a pulsed supersonic nozzle as the mol. source. ArClCN is T-shaped and the data were fit to the Watson rotational parameters and an exact expression for the Cl and N nuclear quadrupole coupling. The spectroscopic consts. for Ar³⁵ClCN are given. The centrifugal distortion consts. were used to derive the intramol. force field and a normal coordinate anal. was performed. The Cl nuclear quadrupole coupling tensor indicates that the field gradients in ClCN are slightly perturbed upon complex formation but not enough to proscribe their use in structural detns. of weakly bound complexes.

Ррассам.
Спектр

CA 1981, 95, 418

ArClCN

Оттиск 12418

1981

5 Б328. Вращательный спектр, строение и внутримолекулярное силовое поле ван-дер-ваальсова комплекса ArClCN, Keenan M. R., Wozniak D. B., Flygare W. H. Rotational spectrum, structure, and intramolecular force field of the ArClCN van der Waals complex. «J. Chem. Phys.», 1981; 75, № 2, 631—640 (англ.)

С использованием импульсного МВ-спектрометра с фурье-преобразованием в резонаторе Фабри-Перо измерен вращательный спектр ван-дер-ваальсова комплек-

вращат.
спектр



Х. 1982, 19, №5,

са AgClCN , образующегося при импульсном сверхзвуковом истечении молек. пучка. Выполнено отнесение к вращательным переходам для более чем 100 наблюдаемых линий; показано, что комплекс имеет T -образную структуру при спектроскопич. постоянных для $\text{Ag}^{35}\text{ClCN}$ $A''=6152,5411(21)$ МГц, $B''=1577,0362(8)$, $C''=1246,7514(6)$, $\tau_1=-576,0(2)$ КГц, $\tau_2=-97,28(8)$ КГц, $\tau_{aaaa}=234,8(17)$, $\tau_{bbbb}=-55,97(10)$, $\tau_{cccc}=-21,60(7)$, $\chi_{aa}^{\text{CP}}=37,9468(23)$ МГц, $\chi_{bb}^{\text{Cl}}=79,5239(20)$, $\chi_{aa}^{\text{N}}=1,6403(22)$; $\chi_{bb}^{\text{N}}=-3,4571(20)$. С использованием констант центробежного искажения определены постоянные внутримолек. силового поля, выполнен расчет частот и форм нормальных колебаний, найдены геометрич. параметры средн. конфигурации комплекса. Измерения тензора ядерного квадрупольного взаимодействия для Cl показывают, что силовые градиенты в ClCN слегка возмущаются при образовании комплекса, но не в такой степени, чтобы их можно было использовать при определении структур слабо связанных комплексов.

Б. В. Рассадин

Ar-CCN

Отмиск 12418

1981

2 Д580. Вращательный спектр, структура и внутримолекулярное силовое поле ван-дер-ваальсового комплекса $\text{Ar}-\text{ClCN}$. Rotational spectrum, structure, and intramolecular force field of the ArClCN van der Waals complex. Keenan M. R., Wozniak D. B., Flygare W. H. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 2, 631—640 (англ.)

М.П;

На импульсном микроволн. фурье-спектрометре с импульсным сверхзвуковым молекулярным пучком получен микроволн. спектр комплекса $\text{Ar}-\text{ClCN}$. Идентифицированы линии 17 вращательных переходов с $J \leq 5$ комплекса $\text{Ar}-^{35}\text{ClCN}$ и трех переходов с $J \leq 3$ комплекса $\text{Ar}-^{37}\text{ClCN}$ в основном колебательном состоянии, а также квадрупольная сверхтонкая структура линий. Определены значения вращательных и кватичных центробежных постоянных и постоянных квадрупольной связи ядер Cl и N. Показано, что комплекс имеет Т-образную структуру с длиной межмолекулярной связи 3,64 Å. Из полученных значений центробежных постоянных и дефекта инерции вычислены гармонические силовые постоянные комплекса $\text{Ar}-\text{ClCN}$. М. Р. Алиев

ф. 1982, 18, №2.

ArCH_3OH^+

1981

Kupriyanov S. E.,

Perov A. A., et al.

образование

Symp. Proc. - Int.

и

наблюдение

Symp. Plasma Chem

5th 1981, 1, 77-79

(см. ArNO^+ ; I)

C_2H_4Ar

1981

8 B178. Спектры когерентного антистоксова комбинационного рассеяния ван-дер-ваальсовской молекулы C_2H_4Ar . Oesterlin P., König F., Byer R. L. Coherent anti-stokes Raman spectra of the van der Waals molecule C_2H_4Ar . «VIII Int. Symp. Mol. Beams, Cannes, June 1—5, 1981». S. 1., 1981, 266—268 (англ.)

спектр

Изучены спектры КАРС сверхзвукового молек. пучка для смеси этилен/аргон. Пучок получали при расширении струи газа в вакууме, исследования проводили при различных составах смесей, начальное давл. C_2H_4 (I) — 0,27 атм Ar — 1,4—4,9 атм, изучали область пучка, находящуюся на расстоянии 3,5 мм от среза сопла. В спектре КАРС в области колебания $\nu_2 = 1623 \text{ см}^{-1}$ I наблюдали дополнительную линию с меньшей частотой. Исследование зависимости ее интенсивности от давл. Ar , а также сравнение с результатами теор. расчетов соотв-щих зависимостей для $(C_2H_4)_2$ и C_2H_4Ar (II)

X. 1982, 19, 48

показало, что эта линия принадлежит ван-дер-ваальсовой молекуле II. Понижение частоты колебания ν_2 при переходе от I к II связано с увеличением длины связи $C=C$ из-за дисперсионных ван-дер-ваальсовских взаимодействий.

А. В. Бобров



CH_3OAg

1981

651408. получение с [помощью] лазера радикалов, охлажденных в [сверхзвуковой] струе. Метоксильный радикал и метоксисаргоновый радикал. Powers D. E., Hopkins J. B., Smalley R. E. Laser production of jet-cooled radicals. Methoxy and methoxy-argon. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 19, 2711—2713 (англ.)

С помощью импульсного сверхзвукового сопла получен интенсивный поток · охлажденных до $\sim 0^\circ\text{K}$ метоксильных радикалов (МР) и снят спектр возбуждаемой лазером флуоресценции (Фл) МР и ван-дер-ваальсовского комплекса CH_3OAg . МР образовывались при лазерном фотолизе (экспимерный AgF -лазер или четвертая гармоника неодимового лазера) метилбензоата (газ разбавитель — Ag или He) в зоне высокого давл. до сверхзвукового сопла. Фл возбуждали в точке на 10 см ниже по потоку после сопла. Дана оригинальная схема импульсного сопла. Возбуждение МР происходило в результате перехода $\tilde{A}^2A_1 \leftarrow \tilde{X}^2E$. Дан анализ вращательной структуры спектров. Показано, что радикалы в основном состоянии 2E имеют угловой момент равный 0,4 $\hbar$. Показано, что атом Ag в комплексе CH_3OAg расположен около атома O на оси симметрии МР. В. А. Н.

М. А;

X. 1982, 19, N 6.

C-Н. Ar

1981

Эл. спектр
Ван дер Ваальс.
Комплексы

21 Б176. Электронные спектры ван-дер-ваальсовых комплексов аргон—тетрацен. Raitt Ian, Griffiths Anne M., Freedman Philip A. The electronic spectra of argon—tetracene van der waals complexes. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, № 2, 225—228 (англ.)

Измерены спектры возбуждения флуоресценции ван-дер-ваальсовых комплексов аргон—тетрацен, образующихся в сверхзвуковой струе аргона, в области электронного перехода $S_1(^1B_{2u}) \leftarrow S_0(^1A_{1g})$. В спектрах наблюдаются две серии линий, описываемых уравнением $\omega = \omega_0 + An + Bn^2$; для серии интенсивных линий $\omega_0 = 22398 \pm 2$, $A = -47,1 \pm 1,8$, $B = 2,0 \pm 0,2$ (в см^{-1}) при $n = 1-6$, и для серии более слабых линий, соотв., 22418 ± 2 , $-47,9 \pm 1$, $1,25 \pm 0,1 \text{ см}^{-1}$ при $n = 3-6$. Наблюдение двух отдельных серий указывает на образование двух типов комплексов с числом молекул аргона 1 и 2 на активных акцепторных центрах молекулы тетрацена. Обсужден вопрос об энергетике этих комплексов.
Б. В. Рассадин

X. 21. 1981

Kr:Cl₂ [omitted 1172.6] 1981

Taylor P.V., et al.

permanent.
energies

J. Chem. Phys., 1981,

74 (7), 3718-22

Matrix interactions with
rare-gas • oxide excimers.

C-At

1981

Жерни
Свези

98: 95990h Determination of carbon-astatine chemical bond energy. Vasaros, L.; Norseev, Yu. V.; Khalkin, V. A. (Lab. Nucl. Probl., Jt. Inst. Nucl. Res., Dubna, USSR). Report 1981, JINR-R-12-81-509; Order No. DE82702641, 8 pp. (Russ). Avail. NTIS; U.S. Sales Only. From *Energy Res. Abstr.* 1982, 7(22), Abstr. No. 59889. The C-At bond energy D was detd. in arom. and aliph. compds. of At by pyrolytic method. The following values were obtained for D : 44.9 kcal/mol in astatobenzene (at 642-725 K); 38.6 kcal/mol in *n*-astatopropyl (at 608-627 K), 36.3 kcal/mol in iso-astatopropyl (at 524-577 K).

0. A. 1983, 98, N 12.

CO₂-Ar

1982

Boulet C., Robert D.

papers J. Chem. Phys., 1982,
77, N 9, 4288-4299.

(see. HCl-Ar; III)

[Ommuck 13648]

1982

DCS+Ar

расчет
корре-
кции
ф-ий

Dreyfus C., Berreby L., et al;

J. Chem. Phys., 1982, 76, N2,
755-766.

DCS + Kr

[Ommuck 13648]

1982

расчет
корреляц.
р-ий

Dreyfus C., Berreby L.,
et al.,

J. Chem. Phys., 1982,
76, N2, 755-766.

Ar-C

[Ummeck 13354]

1982

Gurde R., Felder P.,
et al.

потенциал
карного
взаимоод.,
расчет.

Chem. Phys., 1982,
64, N3, 313 - 332.

As-CD(K)

Ommuck 14829

1982

Комар.
Раман.
спектр

Kieft H., Clouter M. J.
et al.,

Can. J. Phys., 1982, 60,
N 9, 1204-1208.

C_2H_4Ar

спектр, ν_2

X. 1982, 19, 422

1982
! 22 Б206. Когерентное антистоксово комбинацион-
ное рассеяние (КАРС) больших кластеров C_2H_4Ar .
König F., Oesterlin P., Byer R. L. Coherent
anti-stokes Raman scattering (CARS) of large C_2H_4Ar
clusters. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 88, № 5, 477—480
(англ.)

Исследованы спектры КАРС свободно расширяю-
щихся сверхзвуковых пучков смесей C_2H_4 (I) (началь-
ное давл. $p=0,27$ атм) с Ar ($p=1,4-4,9$ атм), выхо-
дящих из сопла диам. 0,5 мм (продолжительность од-
нократного импульса истечения ~ 100 мкс). Спектры
возбуждали 2-й гармоникой импульсного Nd—АИГ-ла-
зера (λ 532 нм, длительность импульса $\tau \sim 10$ нс, энер-
гия $E \sim 12$ мДж) и перестраиваемым лазером на кра-
сителе ($\lambda=582$ нм, $\tau=4$ нс, $E=2$ мДж), разрешение
на спектрах ~ 1 см $^{-1}$. В области Q-ветви колебания
 ν_2 для I (~ 1623 см $^{-1}$) наблюдали сдвинутую в низ-
кочастотную сторону на 4,8 см $^{-1}$ дополнительную по-
лосу, к-рая была приписана комплексам $(C_2H_4)_mAr_n$.
Достаточно большая (>1 см $^{-1}$) полуширина полосы
указывает на то, что взаимодействие частиц в кла-
стерах аналогично межмолек. взаимодействию в жид-
костях.

А. В. Бобров

$(Ar\ CO_2)^+$

[Dunnick 15584] 1982

Stephan K., Firtrell J. H.,
et al.,

A.P.

J. Chem. Phys., 1982,
77, N5, 2408-2415.

CH₄-He
CH₄-Ne
CH₄-Xe

Vi, ж.п.;

1983

11 Б265. Колебательно - поступательные/вращательные и колебательно-колебательные процессы в смесях метан/инертный газ: оптикоакустические фазовые измерения. Vibrational-translational/rotational and vibrational-vibrational processes in methane/inert-gas mixtures: optoacoustic phase measurements. Avramides E., Hunter T. F. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 1, 25—33 (англ.)

Оптикоакустическим методом с использованием He—Ne лазера ($\nu = 2947,9 \text{ см}^{-1}$) изучены процессы V—R, T и V—V релаксации метана в газовых смесях CH₄—He (I), CH₄—Ne (II) и CH₄—Xe (III) при $t = 296^\circ \text{K}$. После возбуждения уровня ν_3 (3020 см^{-1}) метана лазерным излучением и установления равновесия с близко расположенным уровнем ν_1 (2917 см^{-1}) наблюдалась V—V релаксация от вал. кол. ν_3 , ν_1 к деф. кол. ν_2 (1533 см^{-1}) и ν_4 (1306 см^{-1}) по каналу ν_3 , $\nu_1 \rightarrow 2\nu_4 \rightarrow \nu_4 + \nu_4$. Вслед за установлением равновесия между модами ν_2 и ν_4 следовала V—R, T релаксация. По

Х. 1983, 19, № 11

фазовым зависимостям оптикоакустич. сигнала от частоты модуляции и давления газа для I, II и III, соотв. определены постоянные скорости ν_3 $\nu_1 \rightarrow 2\nu_4$ релаксации 0,038; 0,07 и 0,15 нс⁻¹ атм⁻¹; одноквантового процесса ν_3 , $\nu_1 \rightarrow \nu_2$, ν_4 релаксации 8,5; 6,3, <6 мкс⁻¹ атм⁻¹ и процессов $V-R$, T релаксации 0,42, 0,085 и 0,030 мкс⁻¹ атм⁻¹. Для константы скорости процесса $2\nu_4 \rightarrow \nu_4 + \nu_4$ релаксации получена оценка 1,0 нс⁻¹ атм⁻¹.
 С. Н. Мурзин



1983

$\text{CH}_3 \text{F} \cdot \text{Ar}_2\text{N}$
Комплексы

Gough T. E., Knight
D. G., et al.

УК-спектр.

Chem. Phys. Lett.,
1983, 97, N2, 155-160.

● Комплексы
(соед. $\text{SF}_6 \cdot \text{Ar}_2\text{N}$; III)

Ar. DCS

[Om. 17118]

1983

Hoffbauer M. A., Liu K.,
Giese C., et al.,

(V₂)

J. Phys. Chem., 1983,
87, N12, 2096-2102.

He- CO_2

[Om. 17200]

1983

Pack R.T.,

2^{ой} вып.
альбом
координат,
теорет.
расчет

J. Chem. Phys., 1983,
78, N12, 7217-7222.

He + CO₂

Ommux 16453 !

1983

анизотроп-
медленности
потенциал-
ны.

Parker G.A., Keil M.,
Kieppermann A.,

J. Chem. Phys., 1983,
78, N3, 1145-1162.



Om. 16937 1983

10 Д298. Об энергии диссоциации ArCO_2^+ . On the dissociation energy of ArCO_2^+ . Pratt S. T., Dehmer P. M. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 10, 6336—6338 (англ.)

Измерено относит. сечение фотоионизации ArCO_2 в припороговой области, $900 < \lambda < 935$ Å с разрешением 0,28 Å. Получено значение потенциала ионизации, ПИ (ArCO_2) = $13,53 \pm 0,03$ эВ. Из известных значений $D_0(\text{ArCO}_2)$ и ПИ (CO_2) найдено $D_0(\text{ArCO}_2^+) = 0,26 \pm 0,04$ эВ. Обсуждается возможное изменение формы молекулы в процессе ионизации, которое является, по всей вероятности, значительным из-за небольшого франк-кондоновского перекрытия молекулярного и ионного состояний. Сопоставление со случаями ArKr^+ , Kr_2^+ и $(\text{CO}_2)_2^+$ позволяет сделать вывод о том, что делокализация незаполненной МО существенно понижает энергию связи иона.

Г. А.

D_0 ;

ср. 1983, 18, N 10

ArCO_2^+

1.0m, 16937

1983

(A.P., Do)

' 98: 222190z On the dissociation energy of ArCO_2^+ . Pratt, S. T.; Dehmer, P. M. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(10), 6336-8 (Eng). By using the previously described app. (D. 1982), the relative photoionization cross section for ArCO_2 near threshold, and the appearance potential (13.53 ± 0.03 eV) of ArCO_2^+ were deted. The results were used to obtain the dissocn. energy (0.26 ± 0.04 eV) of ArCO_2^+ in the ground state. Comparisons are made with the previous work (D. and P., 1982) on rare gas dimer ions and the $(\text{CO}_2)_2^+$ ion.

C.A. 1983, 98, N26

$C_2H_2 - Me$

Om. 18183

1983

$C_2H_2 - Ar$

Reddy C.P.K., Sarkar K.h.,
et al.,

мезиомек.
потенциалы

J. Magn. Reson., 1983,
55, N2, 177-187.

Ar OCS

1983

2 Д286. Вращательный зеемановский эффект в ван-дер-ваальсовом комплексе Ar OCS. The rotational Zeeman effect in the ArOCS van der Waals complex. Shea J. A., Read W. G., Campbell E. J. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 6, 2559—2568 (англ.)

На импульсном микроволн. спектрометре с фурье-преобразованием с использованием резонатора Фабри—Перо исследован вращательный эффект Зеемана в слабо связанном комплексе Ar OCS. Получены следующие значения спектроскопич. постоянных: $g_{aa} = -0,02483$ (21); $g_{bb} = -0,00086$ (23); $g_{cc} = -0,00558$ (11); $2\chi_{aa} - \chi_{bb} - \chi_{cc} = 1,313$ (32) $\cdot 10^{-9}$ МГц/Гс² и $2\chi_{bb} - \chi_{cc} - \chi_{aa} = -3,762$ (26) $\cdot 10^{-9}$ МГц/Гс². Магн. свойства комплекса Ar OCS сопоставлены со свойствами свободной молекулы OCS. Анализ силового поля, полученного из центробежного искажения, использован для определения усредненной структуры комплекса и среднеквадратичных амплитуд ван-дер-ваальсовых мод. Из зеемановских параметров рассчитан молекулярный квадрупольный момент Ar OCS. С использованием установленного значения объемной магн. восприимчивости рассчитаны значения диамагн. восприимчивостей и вторых моментов распределений электронного заряда. Библ. 30.

Резюме

М.П.

ср. 1984, 18,
N 2

ArOCS

1983

4 Б1374. Вращательный эффект Зеемана в ван-дер-ваальсовском комплексе ArOCS. The rotational Zeeman effect in the ArOCS van der Waals complex. Shea J. A., Read W. G., Campbell E. J. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 6, 2559—2568 (англ.)

На импульсном микроволновом фурье-спектрометре с резонатором на основе интерферометра Фабри-Перо в полях $\sim 28\,113$ и $29\,036$ Гс исследован вращательный эффект Зеемана для переходов $0_{00} \rightarrow 1_{11}$ и $1_{01} \rightarrow 2_{12}$ ван-дер-ваальсовского комплекса ArOCS (I). В результате теор. анализа полученных данных, выполненного в рамках гамильтониана, учитывающего гамильтониан искаженного ротатора и зеемановское взаимодействие первого и второго порядка, определены главные значения g -факторов $g_{aa} = -0,02483(21)$, $g_{bb} = -0,00086(23)$, $g_{cc} = -0,00558(11)$, а также комбинаций главных значений тензора магнитной восприимчивости $2\chi_{aa} - \chi_{bb} - \chi_{cc} = 1,313(32) \cdot 10^{-9}$ и $2\chi_{bb} - \chi_{cc} - \chi_{aa} = -3,762(26) \cdot 10^9$ (МГц/Гс²). Кроме того, найдены значения силовых

геометрии,
структура

Х. 1984, 19, № 4

констант, нормальных частот и среднеквадратичных амплитуд. Определена средняя структура I. На основе полученных данных рассчитаны диамагнитные вклады в магнитную восприимчивость I и вторые моменты распределения электрич. заряда.

Ю. В. Ракитин



Ar-F₂CO

Om. 18335 1983

5 Л181. Вращательный спектр и молекулярная структура комплекса аргон—карбонилфторид. The rotational spectrum and molecular structure of the argon-carbonyl fluoride complex. Shea J. A., Campbell

E. J. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 10, 4724—4729 (англ.)

С помощью микроволнового фурье-спектрометра с импульсной сверхзвуковой струей исследованы вращательные спектры комплексов Ar-F₂CO с ¹⁶O и ¹⁸O. В диапазоне 4—17 ГГц идентифицированы линии ряда вращательных переходов с $J \leq 7$ основного колебательного состояния этих комплексов. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных. Показано, что комплекс Ar-F₂CO относится к категории вытянутых квазисимметричных волчков,

гометр,
структура,
англ. пост.,

Рi, E;

ср. 1984, 18, 45

атом аргона расположен выше плоскости F_2CO ближе к атомам фтора на расстоянии 3,4016 Å от центра масс F_2CO . По полученным значениям центробежных постоянных оценены значения силовых постоянных, частот колебаний и энергии связи (178 см^{-1}) комплекса.

М. Р. Алиев.

Ar₂ · COF₂

[Om. 18335]

1983

' 99: 221438v The rotational spectrum and molecular structure of the argon-carbonyl fluoride complex. Shea, J. A.; Campbell, E. J. (Noyes Chem. Lab., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(10), 4724-9 (Eng). The microwave spectrum of the Ar-COF₂ complex in the ground vibrational state was assigned by using a Fourier-transform microwave spectrometer, and a pulsed supersonic nozzle as a mol. source. Ar-COF₂ is a nonpolar near-sym. prolate top, with the Ar atom situated above the plane of the COF₂ mol., nearly over the F atoms. The spectroscopic consts. are given. Information from centrifugal distortion was used to obtain the harmonic force consts., normal frequencies, and mean-square amplitudes of vibration for the van der Waals modes of Ar-COF₂.

(y8 cnekmp)

C.A. 1983, 99, N 26

Ar-F₂CO см. 18335 1983

12 Б1217. Вращательный спектр и молекулярная структура комплекса аргон—карбонилфторид. The rotational spectrum and molecular structure of the argon—carbonyl fluoride complex. Shea J. A., Campbell E. J. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 10, 4724—4729 (англ.)

На МВ-фурье-спектрометре с резонатором Фабри—Перо и импульсным сверхзвуковым соплом измерены в области частот 4—17 ГГц с разрешением 5—7 кГц вращательные спектры двух изотопич. образцов слабосвязанного комплекса аргон—карбонилфторид, Ar—F₂C¹⁶O (I) и Ar—F₂C¹⁸O (II), в основном колебательном состоянии. В приближении полужесткой модели для I и II соотв. определены вращательные постоянные (МГц): A=6000,3169(30) и 5771,5366(187), B=1523,5196(5) и 1507,3088(54), C=1523,5113(5) и 1491,8678(52) и квартичные постоянные центробежного искажения (кГц):

и.п., измер.
структура

х. 1984, 19, N12

$D_J = 9,138(6)$ и $8,9(1)$, $D_{JK} = 126,39(5)$ и $120,1(1)$, $D_K = -121,3(6)$ и $-120,2(48)$. В предположении фиксированной структуры карбонилфторида определены структурные параметры комплекса. Комплекс представляет собой неплоский почти симм. вытянутый волчок с расстоянием между центром масс молекулы F_2CO и атомом аргона $R = 3,4016$ А, и углом между направлением R -связи и c -осью инерции карбонилфторида $\theta = -10,30^\circ$. При этом отриц. значение угла θ соответствует тому факту, что атом аргона расположен над плоскостью молекулы F_2CO вблизи атомов фтора. На основе квартичных постоянных центробежного искажения вычислены постоянные гармонич. силового поля, нормальные частоты и среднеквадратичные амплитуды колебаний ван-дер-ваальсовых мод комплекса. Полученные значения параметров согласуются с аналогичными данными для родственных комплексов. С. Н. Мурзин

KrF₂-He-CO

1984

Бибиков Н. К.,
Виноградов И. П.

Оптика и электро-
скопия, 1984, 57, N4,
729-731.

(сер. KrF⁺; III)

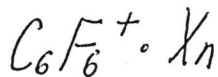
$KzCOF^+$

1984

Бибиев М. К.,
Вилеозрадов И. П.

Оптика и спектро-
скопия, 1984, 57, №,
729-731.

(сер. $Kz_2 F^+$; III)



1984



100: 147901m Laser-induced fluorescence spectroscopy of ionic clusters between organic cations and inert gases. Dimauro, L. F.; Heaven, M.; Miller, Terry A. (Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 104(6), 526-32 (Eng). The laser-induced fluorescence spectra of ionic cluster $C_6F_6^+ \cdot X_n$, where $X = He, Ne, or Ar$, were obtained by multiphoton ionization of C_6F_6 seeded in an inert gas expansion. Spectral information concerning the red-shifts and linewidths of the ionic cluster are reported and observations relevant to their formation mechanisms are offered.

лазерное
флуорес.

с. А. 1984, 100, N 18

CO + He

1984

12 Л179. Форма и ширина ИК-линий поглощения в свободной сверхзвуковой струе. Shape and width of IR absorption lines across supersonic free jets. Gaveau M. A., Boscher D., Martin J. P. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 107, № 1, 31—34 (англ.)

Проведен расчет формы ИК-линий поглощения молекулярного газа с одноатомным носителем, расширяющимся в вакуум с образованием сверхзвуковой струи. Форма линий зависит от т-ры газа, его плотности и от вращательных чисел перехода. Расчет проведен для смеси CO и He. Показано, что ширина линий много больше, чем доплеровская ширина линий стационарного газа, причем линии могут иметь в середине провал. Указано, что форма линий поглощения позволяет установить локальную вращательную т-ру газа и его плотность. Библ. 25.

расчет
формы

ИК-линий
поглощен.

Ф. 1984, 18, N 12.

Ne: C₂H₄

1984

102: 35528e Vibrational predissociation of the neon-ethylene and argon-ethylene van der Waals complexes. Hutson, Jeremy M.; Clary, David C.; Beswick, J. A. (Chem. Lab., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(10), 4474-80 (Eng). Calcns. of vibrational predissocn. lifetimes and product state distributions were carried out for the van der Waals complexes Ne-C₂H₄ and Ar-C₂H₄. The technique uses a scattering wave function expanded in mol. vibrational states coupled with azimuthal basis functions describing the rotation of the C₂H₄ mol. about the C-C axis. A model potential based on pairwise-additive atom-atom potentials was used. For states of the complex correlating with ethylene in its ν_m vibrationally excited state, fast vibrational predissocn. to form vibrationally excited (ν_{10}) fragments is dominant. By contrast, predissocn. to form ground state fragments is very slow. The shortest lifetimes calcd. are 260 ps for Ne-C₂H₄ and 48 ps for Ar-C₂H₄, corresponding to linewidths of 0.02 and 0.11 cm⁻¹, resp.

предиссоц
аргнел, 1

(+1) $\boxtimes$ ArC₂H₄ ●
C.A. 1985, 102, N 4.

Ar C₂ H

1984

Hutson Jeremy M.,
Clary David C., et al.

прегус-
сочауи,
Z.

J. Chem. Phys. 1984,
81(10), 4474-80.

(сеп. Ne' C₂ H₄ ; III)

Ar-CH₄

1984

102: 84650x Scattering experiments on rotational excitation of methane in collision with noble gases. Kohlhasse, A. (Max-Planck-Inst. Stroemungsforsch., Goettingen, Fed. Rep. Ger.). Report 1984, MPIS-3/1984, 107 pp. (Ger). Avail. NTIS. From Sci. Tech. Aerosp. Rep. 1984, 22(20), Abstr. No. N84-30936. The interaction between CH₄ and Ne, He, and Ar was investigated in an expt. with crossed mol. beams. The energy loss and angular distributions were measured at energies between 75 and 95 meV. The collision systems Ne-CH₄ and Ar-CH₄ show, in contrast with He-CH₄, for small angles, high inelastic transition probability due to rotational excitation. The position of max. transfer in the energy-loss spectra for medium deviation angles lies at higher rotational end states than for small and large angles. The structure of spectra, the contribution of single radial potential, and the different effects of A- and T-symmetry configurations of CH₄ are explained by an anal. of the system Ne-CH₄ using coupled-states calcns. in which a Hartree-Fock dispersion potential is applied. Isotropic and anisotropic interaction potentials are detd. for the systems Ne-CH₄ and He-CH₄. A more accurate value of a known interaction potential for Ar-CH₄ is obtained.

ROMERUS.
GALLING,
(21, 2)

c.A. 1985, 102, N10

$\text{CH}_3 \text{ClAr}$

1984

1) 5 Б1087. Потенциалы взаимодействия для пар молекул типа симметричного волчка с двухатомной молекулой или атомом. Interaction potential for symmetric top-diatom or atom pairs. Lakhliifi A., Girardet C. «J. Mol. Struct.», 1984, 110, № 1—2, Suppl. «Theochem», 19, № 1—2, 73—96 (англ.)

Рассчитаны парные Пт взаимодействия молекул типа симм. волчка CH_3X ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) или YH_3 ($\text{Y}=\text{N}, \text{P}, \text{As}$) с молекулой N_2 или с атомами благородных газов. Потенциал взаимодействия представлен в виде суммы молек. составляющих (диполь-дипольное, диполь-квадрупольное, квадруполь-квадрупольное взаимодействия и выборочные высшие компоненты мультипольного разл.) и атомных составляющих, подсчитываемых по методу атом-атомных Пт. Подробно обсуждены проблемы

геометр.,
структура

Х. 1985, 19, 45

подбора параметров отдельных составляющих Пт, в нек-рых случаях введены эффективные равновесные межъядерные состояния в атом-атомных Пт для лучшего согласия с эксперим. данными. Несмотря на нек-рые неопределенности в рассчитываемых геометрич. параметрах, возникающие вследствие неопределенностей в параметрах атом-атомных Пт, для большинства пар получены разумные равновесные геометрич. конфигурации. В частности, получено хорошее согласие вычисл. геометрии комплекса CH_3ClAr с результатами эксперим. исследований. А. В. Немухин

$C_2H_4 + Ar$

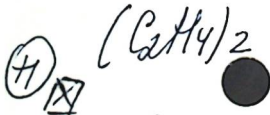
[Om. 20671]

1984

102: 102684t Vibrational predissociation spectroscopy of ethylene dimer and ethylene-argon. Liu, Wen Long; Kolenbrandt, Kirk;

Lisy, James M. (Dep. Chem., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 112(6), 585-7 (Eng). The vibrational predissocn. spectra of $(C_2H_4)_2$ and $Ar-C_2H_4$ were measured using a mol. beam app. and a tunable IR laser (an optical parametric oscillator), near the ν_9 ($\approx 3100\text{ cm}^{-1}$) and ν_{11} ($\approx 2990\text{ cm}^{-1}$) modes of ethylene. The spectra are not homogeneously broadened and show considerable rotational structure at 0.9 cm^{-1} resolu. Anal. of the $Ar-C_2H_4$ spectra places the Ar in the ethylene plane along the perpendicular bisector of the double bond at a distance of $3.6\text{ \AA}$.

(конс. спектры)
(предиссоц.)



C.A. 1985, 102, N12

Ne · C₂H₄

Om. 193861

1984

101: 46130z Infrared photodissociation of the hindered internal rotors neon.ethylene and argon.ethylene. Western, Colin M.; Casassa, Michael P.; Janda, Kenneth C. (Arthur Amos Noyes Lab. Chem. Phys., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91125 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(10), 4781-7 (Eng). IR photodissocn. spectra of the van der Waals mols. Ne·C₂H₄ and Ar·C₂H₄ are reported. Spectra obtained near the ν_7 frequency of free C₂H₄ exhibit the sharpest and most complex structure yet obsd. for an C₂H₄-contg. van der Waals mol. Calcd. spectra based on a hindered-internal rotor model are in satisfactory agreement with those obsd. The barrier heights for hindered rotation of C₂H₄ about the C3:C axis are 12.5 and 30 cm⁻¹ for Ne·C₂H₄ and Ar·C₂H₄, resp. The natural linewidths, 0.5 cm⁻¹ for Ne·C₂H₄ and 3.0 cm⁻¹ for Ar·C₂H₄, are compared to those of other constrained by conservation of angular momentum.

UK chemist

V₀;

(4) Ar · C₂H₄

C.A. 1984, 101, N6

~~NeC₂H₄~~
ArC₂H₄

NeC₂H₄

Дм. 19386 1984

1 Л261. ИК-фотодиссоциация комплексов NeC₂H₄ и ArC₂H₄ с заторможенным внутренним вращением. Infra-red photodissociation of the hindered internal rotors Ne·C₂H₄ and Ar·C₂H₄. Western Colin M., Casassa Michael P., Janda Kenneth C. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 10, 4781—4787 (англ.)

Получены ИК-фотодиссоциационные спектры ван-дер-ваальсовских комплексов NeC₂H₄ (I) и ArC₂H₄ (II) в области частоты колебания ν_7 молекулы этилена. Измеренные спектры хорошо согласуются с рассчитанными по модели заторможенного внутреннего вращения. Определены величины барьеров внутреннего вращения группы C₂H₄ относительно оси C-C: 12,5 см⁻¹ для I и 30 см⁻¹ для II. На основании измерения ширины преддиссоциационных линий определены времена распада комплексов: $\tau > 10$ пс для I и $\tau > 1,7$ пс для II. В. А. Е.

Vi, Uo;

ф. 1985, 18, №1

He-CO
He-CO-O₂

1985

10 Л161. Анализ радиочастотных разрядов в: He-CO и He-CO-O₂ и ИК- и видимой областях спектра. Infrared and visible analysis of He-CO and He-CO-O₂ radiofrequency discharges. Benedictis S. De, Cramarossa F., d'Agostino R. «J. Phys. D: Appl. Phys.», 1985, 18, № 3, 413—423 (англ.)

Дан анализ кинетики ряда процессов, возникающих при РЧ-разряде (27 МГц) в смесях 4:1 He-CO в зависимости от добавляемых кол-в O₂. Исследован спектр испускания CO в области первого обертона и серии горячих переходов (2,3—3,7 мк) и изучено влияние содержания O₂ на распределение заселенностей по колебательным уровням в CO. С помощью метода эмиссионной актинометрии по УФ- и видимым спектрам исследована кинетика образования CO₂ в разряде в зависимости от содержания O₂. Отмечено, что добавка O₂ к смеси He-CO заметным образом влияет на ф-цию распределения электронной энергии. Измерения выполнены для смесей под давл. 1,8 мм рт. ст. и длительностях разряда 10 и 100 мс. Библ. 22. В. К.

анализ
радиочастотных
разрядов

ср. 1985, 18,
№10

Ar CO₂

1985

10 Б4374. Ридберговские состояния вандерваальсовых молекул ArCO_2 и KrCO_2 . Rydberg states of the ArCO_2 and KrCO_2 van der Waals molecules. Dehmer P. M. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 1, 24—33 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С помощью фотоионизац. квадрупольного масс-спектрометра измерены относит. сечения фотоионизации ArCO_2 и KrCO_2 в диапазоне длин волн гелиевого источника света 690—920 Å с разрешением 0,24 Å и 0,4 Å соотв. Кластеры ArCO_2 и KrCO_2 получали при газодинамич. расширении смесей $\text{Ar}-\text{CO}_2$ или $\text{Kr}-\text{CO}_2$ в отношении 9:1 при давл. 5,78 и 2,25 атм. соотв. в напускной системе с диаметром сопла 12,5 мкм. Измеренные Пт ионизации составляют 13,59 эВ для ArCO_2 и 13,33 эВ для KrCO_2 . Для энергии диссоциации основного состояния кластеров получены величины $0,20 \pm 0,04$ эВ (ArCO_2^+) и $0,47 \pm 0,05$ эВ (KrCO_2^+). Ридберговская структура (РС) сечений фотоионизации ArCO_2 соответствует диссоциац. пределу типа $\text{Ar}^* (nd, ns) +$

спектр, I,
Ридберг. сост.

(4)
A

X. 1987, 19, N 10

$+CO_2$; причем дискретная РС наблюдается только
 вблизи предела $Ag^* (3d, 5s) + CO_2$; более высокие
 пределы диффузны. Для $AgCO_2$ и $KrCO_2$ наблю-
 дается молек. РС, соотв. диссоциац. пределу
 типа $Ag + CO_2^*$. Отчетливая вандерваальсова струк-
 тура соответствует диссоциац. пределам ридбергов-
 ских серий CO_2 , сходящихся к $CO_2 + B^2\Sigma_u^+$. Показано,
 что ни колебат. преддиссоциация возбужденных вандер-
 ваальсовых димеров, ни колебат. преддиссоциация ион-
 ных димеров не может объяснить отсутствие вандер-
 ваальсовой структуры, соотв. серии Танаки—Огавы
 CO_2 , сходящейся к $CO_2 + A^2\Pi_u$.

Н. И. Бутковская



K_2CO_3

1985

Dekker P.M.

спектр,
У, Ридберг,
соев.

J. Chem. Phys.,
1985, 83, N1, 24-33.

(см. $ArCO_2$; III)

Ar CO₂⁺

1985

103: 45338c Rydberg states of the argon-carbon dioxide and krypton-carbon dioxide van der Waals molecules. Dehmer, P. M. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA), *J. Chem. Phys.* 1985, 83(1), 24-33 (Eng). Relative photoionization cross sections were detd. for ArCO₂ at a wavelength resolu. of 0.24 Å in the regions of both the Ar⁺ + CO₂ and the Ar + CO₂⁺ dissocn. limits (690-920 Å) and for KrCO₂ at a wavelength resolu. of 0.4 Å in the region of the Kr + CO₂⁺ dissocn. limits (690-780 Å). The dimer ionization potentials are 13.59 ± 0.04 eV (912.5 ± 2.5 Å) for ArCO₂ and 13.33 ± 0.04 eV (930.0 ± 3.0 Å) for KrCO₂. Combining these values with the known value of the CO₂ ionization potential and the known (or estd.) values of the ArCO₂ and KrCO₂ dissocn. energies yields values for the dimer ion ground state dissocn. energies of 0.20 ± 0.04 eV for ArCO₂⁺ and 0.47 ± 0.05 eV for KrCO₂⁺. Rydberg structure was obsd. in the photoionization cross section of ArCO₂ corresponding to dissocn. limits of the type Ar⁺(nd,ns) + CO₂; however, discrete structure is obsd. only near the Ar⁺(3d,5s) + CO₂ dissocn. limits, Van der Waals structure corresponding to the higher Ar⁺ + CO₂ limits is diffuse and red degraded. Mol. Rydberg structure was also obsd. in the photoionization cross sections of both ArCO₂ and KrCO₂ corresponding

(20)

(7) ☒

C.A. 1985, 103, N6.

Kr CO₂⁺

to dissoen. limits of the type $\text{Ar} + \text{CO}_2^+$. Prominent van der Waals structure was obsd. corresponding to dissoen. limits based on members of the CO_2 Henning sharp and diffuse Rydberg series, which converge to $\text{CO}_2^+ B^2\Sigma_u^+$; however, no van der Waals structure was obsd. corresponding to dissoen. limits based on members of the CO_2 Tanaka-Ogawa Rydberg series, which converge to $\text{CO}_2^+ A^2\Pi_u$. Various exptl. evidence indicates that neither vibrational predissocn. of the excited van der Waals dimer nor vibrational predissocn. of the dimer ion can account completely for the absence of van der Waals structure corresponding to the Tanaka-Ogawa series in CO_2 .

ArCl₂

[Dm. 23810]

1985

Dehmer P.M.,

Pugsten-
cocolet,
J

J. Chem. Phys., 1985,
83, N1, 24-33.

KrCl₂

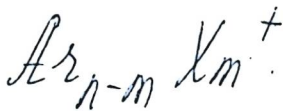
com. 23810

1985

Dekker P. et al.,

J. Chem. Phys., 1985,
83, N1, 24-33.

Руден.
состоят.
γ



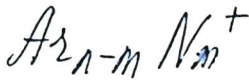
1985

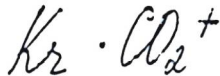


cybernetika
Klaemepe

103: 95585b Mass spectrometric and photoionization investigations of the structure of heterogeneous clusters. Ding, A.; Futrell, J. H.; Cassidy, R. A.; Cordis, L.; Hesslich, J. (Bereich Strahlenchem., Hahn-Meitner-Inst., D-1000 Berlin, 39 Fed. Rep. Ger.). *Surf. Sci.* 1985, 156(1), 282-91 (Eng). Heterogeneous clusters were produced by a supersonic expansion of 2 compds. (CO-Ar, N₂-Ar) and subsequently ionized by either electron impact or photoionization. The mass spectra show clusters of the form $\text{Ar}_{n-m} \text{X}_m^+$ (X = CO, N₂) and, esp. in the case of CO, are governed by fragmentation of precursor neutral clusters. The photoionization spectra for small, mass-selected ionic clusters also show strong evidence of fragmentation of large neutral clusters. The behavior of mixed CO-Ar clusters is significantly different from that of N₂-Ar clusters and a model is suggested for the photoionization of heterogeneous clusters which involves the existence of more than 1 energy threshold corresponding to the ionization of each of the constituent species.

⑦ 
e. A. 1985, 103, ~12





1985

5 Б4447. Фотодиссоциация слабо связанных ион-молекулярных кластеров: кластер $\text{Kr} \cdot \text{CO}_2^+$. Photodissociation of weakly bound ion-molecule clusters: the $\text{Kr} \cdot \text{CO}_2^+$ cluster. Jarrold Martin F., Illies Andreas J., Wagner-Redeker Winfried, Bowers Michael T. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 15, 3269—3273 (англ.)

спектр, по-
верхность
потенц.
Жермш

Фотодиссоциация кластеров $\text{Kr} \cdot \text{CO}_2^+$ (I), полученных из источника ионов высокого давл. при T -ре -80°C под воздействием света видимого диапазона (400—700 нм), протекает по трем каналам $\text{Kr}^+ (^2P_{3/2}) + \text{CO}_2$ (1), $\text{Kr}^+ (^2P_{1/2}) + \text{CO}_2$ (2) и $\text{CO}_2^+ + \text{Kr}$ (3) из одного промежут. состояния, время жизни к-рого меньше периода вращения. Диссоциация I осуществляется как прямой отталкиват. процесс. Из анализа распределений кинетич. энергии продуктов следует нестатистич. характер распределения энергии для продуктов всех каналов р-ции. Рассматриваются причины отличия динамики диссоциации I и кластера ArCO_2^+ . Обсуждается характер Пв потенциальной энергии диссоциации по трем каналам и их возможное взаимодействие.

Л. Ю. Русин

X. 1986, 19, 45

$Kr \cdot CO_2^+$

1985

2 Д375. Фотодиссоциация слабо связанных ион-молекулярных кластеров: кластер $Kr \cdot CO_2^+$. Photodissociation of weakly bound ion-molecule clusters. The $Kr \cdot CO_2^+$ cluster. Jarrold Martin F., Illies Andreas J., Wagner-Redeker Winfried, Bowers Michael T. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 15, 3269—3273 (англ.)

В скрещивающихся ионном пучке и лазерном луче исследована фотодиссоциация кластеров $KrCO_2^+$. В эксперименте использовался лазер на красителе с перестраиваемой длиной волны излучения в диапазоне $\lambda = 4500 \div 6500$ Å. Измерены зависимость сечения фотодиссоциации от длины волны излучения, относит. выход ионов — продуктов CO_2^+ и Kr^+ , их угловые распределения и распределения по кинетич. энергии. Найдено, что с увеличением λ от 4500 до 6500 Å сечение фотодиссоциации уменьшается от $2,4 \cdot 10^{-17}$ до $\sim 9 \cdot 10^{-18}$ см². Относит. выход ионов — продуктов Kr^+ максимален при $\lambda = 6000$ Å и составляет $\sim 65\%$ от общего выхода ионов.

Б. Ф. Горднеев

фотодиссо-
циация.

ср. 1986, 18, №2

C_2H_4-Ar

1985

6 Л164. Колебательная преддиссоциация и спектроскопия димеров. Vibrational predissociation and dimer spectroscopy. Reuss J., Stolte S. «Europhys. News», 1985, 16, № 1, 9—12 (англ.)

Обсуждены результаты работ по колебательной спектроскопии димеров молекул и атомов в сверхзвуковых газовых потоках. Отмечено, что при вращательной $T \sim 1$ К молекулы и атомы в таких потоках образуют прочные димеры, стабилизированные ван-дер-ваальсовыми силами. Описан метод исследования димеров в потоках посредством ИК-преддиссоциации комплексов в пучке излучения CO_2 -лазера. Обсуждены времена жизни колебательно-возбужденных димеров в газовых потоках, а также уменьшение частоты колебаний и уширение ИК-полос изолированных молекул при образовании димеров. Предположено, что тонкая структура ИК-полос в спектрах димеров C_2H_4-Ar обусловлена фундаментальными колебаниями этих димеров. И. В. А.

спектр

Ф. 1985, 18, № 6.

C₆H₆-Ar

1985

(Om. 22.508)

| 103: 59655r Application of the electron gas model to the calculation of the geometries of van der Waals complexes. Wu, Guoshi; Wutz, D.; Lin, S. H. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287 USA), *Mol. Phys.* 1985, 54(6), 1437-52 (Eng). The electron gas model due to Y. S. Kim and R. G. Gordon (1974) was extended to calc. the interaction energies in multiatom and multi-atom-mol. systems. The preliminary results are given of the effect of the basis sets used to describe the components on the predicted equil. geometries. The results using this model are compared with those using a 6-12 type potential for the predicted equil. geometries of C₆H₆-Ar and anthracene-Ar complexes for one and two bound adatoms.

meop. pacrem
pabrev. 20-
hempire

C. A. 1985, 103, N8.

Ar_n-CH₄ Комплексы
n=1,2

DM. 22508 1985

4 Б1115. Применение модели электронного газа к расчету геометрии вандерваальсовых комплексов. Application of the electron gas model to the calculation of the geometries of van der Waals complexes. Wu Guoshi, Wutz D., Lin S. H. «Mol. Phys.», 1985, 54, № 6, с 1437—1452 (англ.)

Расчет равновесной геометрии и энергий связи вандерваальсовых комплексов аргона с углеводородами типа Ar_n-R, R=метан (I), бензол (II), антрацен (III), n=1, 2 проведен в приближении локальной плотности. В расчете использованы функционалы плотности кинетич. и обменно-корреляционной энергии, полученные в модели однородного электронного газа. Плотность системы аппроксимирована суммой плотностей Ar и R, рассчитанных методом ССП МО ЛКАО в базисе ОСТ-3ГФ. В случае I исследован эффект расширения базиса при расчете плотностей фрагментов и показано, что расчет в миним. базисе удовлетворительно воспроизводит потенциальную кривую взаимодейст-

геометрии,
структура,
E

⊗ (+1)

х. 1986, 19, №4

Ar_n-C₆H₆
n=1,2

вия $\text{Ag} \cdots \text{CH}_4$, полученную с расширенными базисными наборами. В случае II и III при $n=1$ наиболее энергетически выгодна координация Ag по центру кольца (в случае III — по центру центрального кольца). При $n=2$ наиболее устойчивы структуры с координацией обоих атомов Ag по одну сторону кольца и непосредственным взаимодействием Ag—Ag. Рассчитанная геометрия удовлетворительно согласуется с результатами расчета с использованием эмпирич. леннард-дженсоновского Пт типа 6—12, хотя энергия связи в модели электронного газа и существенно занижены из-за неучета дисперсионного взаимодействия. О. В. Гриценко



CH₄ - Ar

C₆H₆ - Ar и др.

DM. 22508

1985

2 Д69. Применение модели электронного газа к расчетам геометрии ван-дер-ваальсовых комплексов. Application of the electron gas model to the calculation of the geometries of van der Waals complexes. Wu Guoshi, Wutz D., Lin S. H. «Mol. Phys.», 1985, 54, № 6, 1437—1452. (англ.)

Предложена методика расчета равновесной геометрии и энергий ван-дер-ваальсовых молекулярных систем с использованием модели электронного газа (МЭГ). (Gordon R. G., Kim Y. S. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, 3122; 1974, 60, 1842; 1974, 61, 1). Время счета программ, реализующих разработанный алгоритм на ЭВМ IBM 3081: 9 с (CH₄), 64 с (C₆H₆), 460 с (C₁₄H₁₀) при использовании базиса STO—3G. При расчетах потенциалов взаимодействия систем CH₄—Ar; C₆H₆—Ar (I), C₆H₆—Ar₂ (II); C₁₄H₁₀—Ar (III) и C₁₄H₁₀—Ar₂ (IV) время счета одной геометрич. конфигурации соответственно 20, 25, 41, 35 и 60 с. Для рассмотренных систем удовлетворительные результаты получены с использованием минимального

расчет геометрии,
структур
ср. 1986, 18, №2

базисного набора для молекулы и расширенного — для адатомов. Проведено сравнение расчетов систем I—IV предложенным методом и с использованием потенциала типа Леннард-Джонса (ЛД). Оба метода согласуются в предсказании равновесной геометрии, но МЭГ несколько занижает расстояния от адатомов до молекулы и между адатомами. Наблюдается плохое согласие предсказываемых энергий: МЭГ энергии в 3—4 раза меньше ЛД энергий. Причина этого в неучете дисперсионного взаимодействия по МЭГ, что однако неважно при расчетах равновесной геометрии.

В. А. Куликов

обен.
цни

$Ar \dots (CH_2)_2O$

DM 23393 1986

15 Б1240. Вращательный спектр, инверсионный спектр и свойства вандерваальсовой молекулы аргон-оксиран. Rotational spectrum, inversion spectrum and properties of the van der Waals molecule argon-oxirane. Collins R. A., Legon A. C., Millen D. J. «J. Mol. Struct. Theochem», 1986, 135, 435—445 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре в обл. частот 4,0—18,0 ГГц измерены вращат. и вращательно-инверсионный спектры вандерваальсова комплекса аргон-оксиран, $Ar \dots (CH_2)_2O$, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона с учетом кватерного центробежного искажения. Определены вращат. постоянные (МГц): $A=14623,34234(83)$, $B=1727,43654(14)$, $C=1704,85181(20)$. На основе внутр. координат рассчитана структура комплекса с расстоянием между центрами масс-составляющих комплекса $R_{ст}=3,6074$ Å, постоянные силового поля и потенциальный барьер инверсионного движения $V=194(3)$ см⁻¹. С. Н. Мурзин

вращат.
спектр, ин-
версионный
спектр, и.п.

X. 1986, 19, N 15.

CH₃O. Ar

(DM-23624)

1986

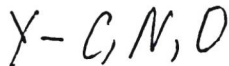
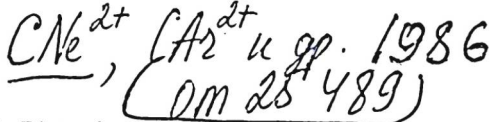
Fuke K., Ozawa K.,
Kaya K.,

Chem. Phys. Lett.,

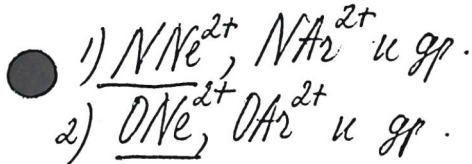
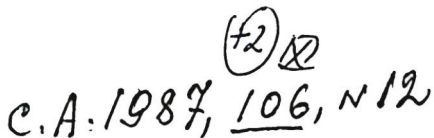
1986, 126, N2, 119-123.

информ -
сведения
перес-
созвучия





106: 92987k Diatomic dications containing one inert gas atom
Jonathan, P.; Boyd, R. K.; Brenton, A. G.; Beynon, J. H. (R. Soc
Res. Unit, Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *Chem.
Phys.* 1986, 110(2-3), 239-46 (Eng). Diat. dications AY^{2+} , where A
= Ne, Ar, Kr or Xe and $Y = C, N$ or O , were detected and
characterized via appearance energies, ionization energies of the
corresponding monocations detd. by charge-stripping, and values of
translational energy release accompanying unimol. dissociation of AY^{2+}
on the microsecond timescale. The mechanism of formation of AY^{2+}
is unclear, but possibly involves 3-body association of A^{2+} and Y .
Approx. potential curves for some of these dications were generated
by using a semiempirical procedure and applied in a general
interpretation of some of the trends obsd.



Ar C⁺²

[om. 25489]

1986

Jonathan P., Boyd R. K.,
Brenton A. G., et al.,

romanus-
kruebel

Chem. Phys., 1986, 110,
N2-3, 239-246.

(OM. 25489)

1986

Jonathan P., Boyd R.K.,
Brenton A.G., et al.,

$D_0(\text{Xe}^+-\text{C})$

Chem. Phys., 1986, 110,
N2-3, 239-246.

$C_6F_6^+ He$ [Om. 25960]

1986

Kennedy R.A., Miller T.A.,

J. Chem. Phys., 1986,
85, N 4, 2326-2327.

и.п.,
потенц.
поверхн.

$\text{He}_2\text{C}_2^{2+}$

1986

10 Б1037. Теоретические предсказания существования метастабильных ионов с короткими связями углерод — гелий. Theoretical predictions of metastable ions with short carbon—helium bonds. Koch Wolfram, Frenking Gernot. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.», 1986, 74, № 1, 133—136 (англ.)

(М.П.)

В рамках теории возмущений Меллера — Плессета 2-го порядка (МП2) выполнены расчеты электронного и геометрич. строения катионов HeCCHe^{2+} , HeCC^{2+} , HeCC^+ и HeC^+ в основных и нек-рых возбужденных состояниях. Оптимизация геометрии проведена как в

X. 1987, 19, N 10

рамках МП2 в базисе 6-31 ГФ с поляризац. d - и p -функциями, так и в рамках МП4 (вплоть до 4-кратных возбуждений) в базисе 6-311 ГФ также с поляризац. ф-циями d - и p -типа. Найдены короткие связи $\text{He}-\text{C}$, среди к-рых наиболее короткая, 1,165 А, найдена в катионе $\text{HeCC}^+(^2\Sigma^+)$, изоэлектронном HCC . Определены энергии диссоциации HeCCHe^{2+} с образованием всех остальных катионов, а также He и He^+ . Показано, что HeCCHe^{2+} стабилен к разрыву связи $\text{He}-\text{C}$. Отмечено, что в случае единственной экзоэнергетич. р-ции $\text{He}_2\text{C}_2^{2+} \rightarrow 2\text{HeC}^+$ ($-121,2$ ккал/моль) прочная связь $\text{C}-\text{C}$ (примерно такая же, как и в ацетилене) должна приводить к значит. барьеру реакции.

С. П. Долин

He C C He²⁺
и др.

1986

6 Д102. Теоретическое предсказание метастабильных ионов с короткими связями углерод — гелий. Theoretical predictions of metastable ions with short carbon — helium bonds. Koch Wolfram, Frenking Gernot. «Int. J. Mass Spectrom. and ion Process.», 1986, 74, № 1, 133—136 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты структур молекул HeCCHe²⁺ (I), HeCC²⁺ (II), HeCC⁺ (III), HeC⁺ и их изоэлектронных аналогов с атомом Н вместо He. Оптимизация геометрии проводилась на уровне МП2/6-31ГФ(d, p) энергетика рассчитывалась на уровне МП4/(STDQ)/6-311Г(d, p). Найдено, что для I—III длина He—C связи составляет соответственно 1,085; 1,082 и 1,080 Å, Н—С связи — 1,057; 1,090 и 1,065 Å. Подтверждено влияние числа π-электронов у атома, образующего связь с He, на ее длину (большее число приводит к укорочению). Делается вывод о доминирующем влиянии электронного состояния Xⁿ⁺, образующего связь с He, на ее прочность по сравнению с кулоновским взаимодействием. Соединение I стабильно к разрыву C=He связи с образованием II и может быть обнаружено в газовой фазе.

В. А. Куликов

М.П.

ср. 1987, 18, 46

He2 C²⁺ (DM-24564)

1986

Koch W., Frenking G.,

структ.,
устойчив.,
теорет.
исследов.

J. Chem. Soc. Chem.
Commun., 1986, N14,
1095-1096.

$\text{Ar} \cdot \text{C}_2 \text{H}_4$

1986

Lisy James M.

AIP Conf. Proc. 1986, 146,
447-57.

колебаний.
спектр.

(C_{60} (HF)₃; III)

Комплексы

$C_{18}H_{12}-Ar$

$C_{18}H_{12}-Kr$

рассеянный
спектр

[Dm. 24652]

1986

Van Herpen W.M., Neerts W.,
Dymarius A.,

Laser Chem. 1986, 6, N1,
37-46.

$C_2He_2^{2+}$
 CHe^+

1986

106: 92992h Mass spectrometric observation of carbon-helium ions. Young, S. E.; Coggiola, M. J. (Mass Spectrom. Group, SRI Inst., Menlo Park, CA 94025 USA). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* 1986, 74(1), 137-40 (Eng). A mass spectrometric observation of stable ion species contg. a C-He bond confirms theor. predictions of such species. A discharge ion source combined with high-resoln. mass anal. and isotopic substitution provide strong evidence for the existence of $C_2He_2^{2+}$ or CHe^+ . The results indicate that these are either stable species or have metastable lifetimes exceeding the 10 μs flight time through the instrument.

существование
ионов,
массовый.

C.A. 1987, 106, N12

Ar · CH₃Cl

OM 26425

1987

106: 164902d Nearly free internal rotation in argon-chloromethane. Fraser, G. T.; Suenram, R. D.; Lovas, F. J. (Mol Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(6), 3107-14 (Eng). Rotational spectra of Ar-MeCl, for both Cl isotopes, were obsd., at 4 kHz resolu., using a pulsed nozzle Fourier transform microwave spectrometer. The obsd. spectra are consistent with a T-shaped complex in which the Me group is undergoing nearly free internal rotation. Anal. of the ground (A) internal rotor state spectrum for Ar-Me³⁵Cl using an asym. top Hamiltonian produces the following spectroscopic const. (in MHz); $A = 13633.020(14)$, $B = 1593.5683(79)$, $C = 1420.4572(52)$, $\Delta J = 0.01216(14)$, $\Delta J_K = 0.1381(48)$, $\delta J = 0.00096(17)$, $H_{JK} = -0.00058(25)$, $eQ_{qaa} = 34.895(30)$, $eQ_{qbb} = -72.185(25)$, and $eQ_{qcc} = 37.290(35)$. A combined anal. of the ground and excited (E) internal rotor states places an upper bound of 20 cm⁻¹ on the 3-fold barrier to internal Ar-Me³⁵Cl as 13.0(3) MHz. The symmetry axis of the MeCl subunit is nearly perpendicular ($\sim 82^\circ$) to the line joining the centers of mass of the 2 binding partners. The isotopic data indicate that the Cl end of the MeCl is tilted toward the Ar. The distance between the centers of mass of the 2-subunits is 3.7826 Å for:

франкам.
по столу;
свободн.

франкн.,
ув спектр

С. А. 1987, 106, N 20.

Ar-Me³⁵Cl and 3.7839 Å for Ar-Me³⁷Cl implying an Ar-Cl distance of 3.750 Å. Centrifugal distortion anal. yields a weak bond stretching force const. of 0.0157 mdyne/Å and stretching frequency of 34.6 cm⁻¹ for Ar-Me³⁵Cl. The results were related to previous lower resolu. microwave studies on Ar-Me₃Cl.

He_2^{2+}

(om. 27256)

1987

Frenking G., Koch W.,

считает-
триplet.
расщепл.
возмущ.
электрон.
состоян.

Chem. Phys. Lett., 1987,
138, N 6, 503-508.

He - CO

1987

107: 141750j Rotational predissociation of (rare gas atom)-(slow rotating diatomic molecule) complexes. Gianturco, F. A.; Palma, A.; Villarreal, P.; Delgado-Barrio, G.; Roncero, O. (Dep. Chem., Univ. Rome, 00185 Rome, Italy). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(2),

1054-61 (Eng). An adiabatic angular approxn. is given to the rotational predissocn. of triat. van der Waals complexes formed by a rare gas atom and a diat. mol. that is treated as a rigid rotor. The metastable states of the complex are obtained as discrete solutions of the Schoedinger equation while the corresponding continuum states allow one to est. the rates for rotational predissocn., within the framework of the golden rule approxn., after the relevant discrete-continuum dynamical coupling are calcd. Applications to the He-CO, He-N₂, and He-O₂ systems are presented.

meop. pacem
nreficcol.

(12) X

C.A. 1987, 107, N16

ArCD_2

от 26386 1987

21 B1111. Спектроскопические свойства и поверхности потенциальной энергии T-образных вандерваальсовых комплексов. Часть 1. Теория. Spectroscopic properties and potential-energy surfaces for T-shaped van der waals complexes. Part 1. Theory. Hough Adrian M., Howard Brian J. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1987, Pt 2, 83, № 1, 173—190 (англ.)

Предложен метод расчета спектроскопич. постоянных вандерваальсовых молекул, образованных из атома и линейной молекулы. Метод основан на адиабатич. разделении переменных, определяющих конфигурацию комплекса: радиальной R — расстояния от атома до центра масс жесткой линейной молекулы, и угловой ν — угла между осью молекулы и направлением от центра масс молекулы к атому. «Медленной подсистемой» переменных является угол ν ; зависимость молек. потенциала от ν предполагается слабой и имеющей минимум при $\nu = 90^\circ$. Ур-ние адиабатич. приближения, определяющее волновую ф-цию $\phi(\nu)$, решается вариа-

М.П.

X. 1987, 19, № 21

ционно в базисе полиномов Эрмита (после перехода к новой переменной $\alpha \operatorname{ctg} \nu$, где α — параметр), а уравнение, определяющее радиальную функцию $\chi(R, \nu)$ — численно при нек-рых значениях угла ν . На примере AgCO_2 проведен расчет вращат. постоянных, постоянных центробежного искажения, средних значений полиномов Лежандра $P_n(\cos \nu)$ $n=1, 2$, и кол. неадиабатич. поправок. Особое внимание уделено сходимости разложений (по полиномам Эрмита, по произведениям вал. и деф. кол. волновых функций при вычислении неадиабатич. поправок и т. п.).

Н. Ф. Степанов



Ar · CO₂

(Om. 26386)

1987

(meop. param
M.N.)

106: 73216s Spectroscopic properties and potential-energy surfaces for T-shaped van der Waals complexes. Part I: Theory. Hough, Adrian M.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab. Univ. Oxford, Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1987, 83(1), 173-90 (Eng). A new method for the computation of the spectroscopic consts. of atom-linear-mol. van der Waals mols. is presented. The method is based on the adiabatic sepn. of angular and radial motions within the complex and is analogous to the infinite order sudden approxn. in scattering theory. The results based on a model potential for Ar-CO₂ are presented.

C.A. 1987, 106, N10

ArCO_2

(Ом. 26 338) 1987

21 Б1112. Спектроскопические свойства и поверхности потенциальной энергии T-образных вандерваальсовых комплексов. Часть 2. — Эмпирическая потенциальная поверхность ArCO_2 . Spectroscopic properties and potential-energy surfaces for T-shaped van der waals complexes. Part 2. The empirical potential surface for ArCO_2 . Hough Adrian M., Howard Brian J. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1987, Pt 2, 83, № 1, 191—209 (англ.)

М.Н.

На основе развитого метода (см. пред. реф.) и лит. эксперим. данных (радиочастотный и микроволновой спектры, уширение линий, второй виртуальный коэф. как ф-ция т-ры и др.) для молекулы ArCO_2 определены параметры ф-ции, аппроксимирующей потенциальную Пв в основном состоянии. Рассмотрены различные варианты параметризации такой функции. Н. Ф. Степанов

Х. 1987, 19, № 21

Ar CO₂

(Dm. 26338)

1987

106: 73217t Spectroscopic properties and potential-energy surfaces for T-shaped van der Waals complexes. Part 2. The empirical potential surface for argon-carbon dioxide. Howard, Adrian M.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1987, 83(1), 191-209 (Eng). Anisotropic potential-energy surfaces for Ar-CO₂ are obtained by a simultaneous least-squares fit to 12 mol.-beam elec. resonance spectra, mixed second virial coeffs., and mean-square torque measurements. Several methods of parametrization of the potential are considered, including five-angle parametrization of the radial potential and an explicit angular parametrization of the well depth and radial min. These are considered to be superior to the conventional multipole parametrization, which is not suitable for highly anisotropic systems.

момента.
повертливост,
структура

C.A. 1987, 106, N 10

ArCO_2

От 26338

1987

У 10 Д63. Спектроскопические свойства поверхности потенциальной энергии для T-образных ван-дер-ваальсовых комплексов. 2. Эмпирическая потенциальная поверхность для ArCO_2 . Spectroscopic properties and potential-energy surfaces for T-shaped van der Waals complexes. Pt 2. The empirical potential surface for ArCO_2 . Hough Adrian M., Howard Brian J. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1987, Pt2, 83, № 1, 191—209 (англ.)

М.П.

Найдена анизотропная поверхность потенц. энергии комплекса ArCO_2 . Для ее нахождения по развитому авторами методу (см. ч. I см. реф. 10Д62) использованы независимые литературные данные по радиочастотному и микроволн. спектру ArCO_2 , значения второго вириального коэф. и вращательного момента комплекса. Рассмотрено несколько методов параметризаций потенц. поверхности, включая пятиугловую параметризацию. Обсуждаются преимущества и недостатки разных параметризаций, связанных с особенностью описания потенциалов высокоанизотропных систем, примером которых является потенциал ArCO_2 . Б. Ф. Гордиец

ф. 1987, 18, N 10

HeC²⁺

от 27407 1987
12 Д125. Теоретическое исследование низколежащих электронных состояний дикатиона HeC²⁺. Theoretical investigations of the low-lying electronic states of the HeC²⁺ dication. Koch Wolfram, Frenking Ger- not, Luke Brian T. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 130, № 2, 149—154 (англ.)

М.П.

Неэмпирическим методом МК ССП по схеме полного активного пространства в базисе гауссовых функций 13s8p2d/8s2p, сгруппированном в 9s6p2d/5s2p, исследовано электронное строение HeC²⁺ (I) в состояниях ^{1,3}Π и ^{1,3}Σ⁺. Приведены потенц. кривые для межъядерных расстояний R=2,25—7 ат. ед. Обнаружено, что в основном X¹Σ⁺-состоянии энергия связи равна 0,72 эВ при R=2,96 ат. ед., а a³Π и A¹Π метастабильны с барьерами распада 2,19 и 0,20 эВ. Состояние b³Σ⁺ характеризуется очень пологой потенц. ямой с глубиной 0,06 эВ. Проведено сопоставление с изоэлектронной молекулой CN⁺. Показано, что стабильность основного состояния I обусловлена переносом заряда на вакантную 2p_r-АО атома С. В возбужденных состояниях этот перенос заряда сильнее и связь короче. В. Л. Лебедев

ф. 1987, 18, №12

HeC²⁺

от 27407 1987

24 Б1026. Теоретические исследования низших электронных состояний двухзарядного катиона HeC²⁺. Theoretical investigations of the low-lying electronic states of the HeC²⁺ dication. Koch Wolfram, Frenking Gernot, Luke Brian T. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 139, № 2, 149—154 (англ.)

Многоконfigurационным методом ССП в варианте полного активного пространства с использованием базисов (8s2p)/[5s2p] для He и (13s8p2d)/[9s6p2d] для C рассчитаны потенциальные кривые состояний ^{1,3}Σ⁺ и ^{1,3}Π катиона HeC²⁺. Найдено, что основное состояние симметрии ¹Σ⁺ является связанным по отношению к диссоциации на He(¹S) + C²⁺(¹S). Энергия диссоциации оценена равной 0,72 эВ. Состояния a³Π и A¹Π — метастабильные: они характеризуются барьерами высотой 2,19 и 0,20 эВ по отношению к He⁺(²S) + C⁺(²P). Результаты сопоставлены с данными расчетов для катиона CH⁺. А. В. Немухин

М.А.

X. 1987, 19, № 24

HeC²⁺

(Om. 27407) 1987

19; 162057d Theoretical investigations of the low-lying electronic states of the helium carbide ion(2+)(HeC²⁺). Koch, Wolfram; Frenking, Gernot; Luke, Brian T. (Inst. Org. Chem., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 139(2), 149-54 (Eng). Extended MC SCF computations of the CAS SCF type are performed on four energetically low-lying electronic states of HeC²⁺ dications. The X ¹Σ⁺ ground state is predicted to be thermodynamically stable by 0.72 eV, while the a ³Π and A ¹Π excited states represent metastable species with barrier heights of 2.19 and 0.20 eV, resp. The b ³Σ⁺ state exhibits merely a very shallow potential dip with a well depth of only 0.06 eV. The HeC²⁺ dication is therefore predicted to be exptl. observable in the gas phase. Bonding in these unusual dications is discussed and compared to the isoelectronic CH⁺ cation.

Нижние levels.
состоят.
молекул.
раств.

C.A. 1987, 107, N18

CNeⁿ⁺

1 ≤ n ≤ 4

М.П.

ср. 1988, 18, №1

~~100-28146~~

1987

1 Д68. Теоретическое исследование малых многозарядных катионов. II. CNeⁿ⁺ (1 ≤ n ≤ 4). Theoretical investigations of small multiply charged cations. II. CNeⁿ⁺ (1 ≤ n ≤ 4). Koch. Wolfram, Frenking Gernot. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 10, 5617—5624 (англ.)

Многоконфигурационным методом ССП (МК ССП) в рамках приближения полного активного пространства (ПАП ССП) проведен расчет низколежащих электронных состояний ионов CNe⁺, CNe²⁺, CNe³⁺ и CNe⁴⁺. В то время как катионы CNe⁺ и CNe⁴⁺ обнаруживают отталкивательные потенц. кривые, дикатион CNe²⁺ является кинетически стабильным ионом. Для этого катиона рассчитан барьер диссоциации состояния X¹Σ⁺, равный 1,62 эВ. Для состояния a³Π глубина потенц. ямы равна 0,80 эВ. Предполагается, что дикатион CNe²⁺ может наблюдаться экспериментально в газовой фазе. Для катиона CNe³⁺ получен небольшой минимум

DM 27441

CNe²⁺

~~am 28 146~~

1987

4 Б1029. Теоретические исследования малых многократно заряженных катионов. II. CNeⁿ⁺ (1 ≤ n ≤ 4). Theoretical investigations of small multiply charged cations. II. CNeⁿ⁺ (1 ≤ n ≤ 4). Koch W., Frenking G. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 10, 5617—5624 (англ.)

Многоконфигурационным методом ССП в варианте полного активного пространства с использованием базисов (10s6p2d)/[5s4p2d] рассчитаны потенциальные кривые низших электронных состояний катионов CNe⁺, CNe²⁺, CNe³⁺ и CNe⁴⁺. Найдено, что основным состояниям моно- и тетракатионов отвечают отталкивательные потенциальные кривые. Потенциальная кривая дикатиона CNe²⁺ в состоянии X¹Σ⁺ имеет минимум, лежащий выше диссоциац. предела C⁺(²P) + Ne⁺(²P), тогда как диссоциац. барьер составляет 1,62 эВ, так что дикатион должен быть кинетически стабильным. Обсуждены возможные причины стабильности. На

am 27 441

М.П.

X. 1988, 19, 24

потенциальной кривой основного состояния CNe^{3+} отмечен неглубокий минимум, отделенный от отталкивательной ветви кривой барьером в 0,11 эВ. Приведены аргументы, показывающие, что наблюдавшийся экспериментально монокатион должен находиться в сильно возбужденном электронном состоянии. Сообщ. 1 см. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, 2703: А. В. Немухин



CNe⁺ ugp.

(DM 27441)

1987

107: 183821p Theoretical investigations of small multiply charged cations. II. Carbon-neon cations (CNeⁿ⁺ (1 ≤ n ≤ 4)). Koch, Wolfram; Frenking, Gernot (Inst. Org. Chem., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(10), 5617-24 (Eng). Extended MC SCF calcns. of the CAS SCF type were performed for the energetically lowest-lying electronic states of CNe⁺, CNe²⁺, CNe³⁺, and CNe⁴⁺. Whereas the mono- and tetracations exhibit essentially repulsive potential curves, the CNe²⁺ dication is predicted to be a kinetically stable ion. The computed barrier to disocn. for the X¹Σ⁺ state of CNe²⁺ amts. to 1.62 eV, and for the a ³II state a potential well of 0.80 eV depth is calcd. The CNe²⁺ dication is therefore predicted to be exptl. observable in the gas phase. Also the CNe³⁺ trication is calcd. to exhibit a small min. in its X²Σ⁺ state. Bonding in these unusual cations is discussed and compared to known isoelectronic species.

теорет.
расчет
неявного

Электрон-
состояний
С.А. 1987, 107, N 20

HeC²⁺
HeCa⁺

Om. 28146

1987

107: 141489f Helium chemistry: theoretical predictions and experimental challenge. Koch, Wolfram; Frenking, Gernot; Gauss, Juergen; Cremer, Dieter; Collins, Jack R. (Inst. Org. Chem., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *J. Am. Chem. Soc.* 1987, 109(20), 5917-34 (Eng). Quantum mech. investigations at the MP4(SDTQ)/6-311G(2df,2pd)//MP/6-31G(d,p) + ZPE level of theory show that He is capable of forming strong bonds with C in cations and that even a neutral mol. contg. He (HeBeO) can be thermodynamically stable in its ground state. The electronic state of a binding partner is crucially important for the bond strength and bond length of the He bond. He₂C²⁺ has a rather long (1.605 Å) He-C at. distance in its ¹A₁ ground state but a much shorter bond (1.170 Å) He-C at. distance in its ¹A₁ ground state but a much shorter bond (1.170 Å) is found in the ³B₁ excited state. The shortest He-C bonds (1.080-1.085 Å) are found in the Σ⁺(4π) states of HeCC²⁺, HeCCH²⁺, and HeCC⁺. The bond dissocn. energies of the

2e, 2e,
mop.
param.

c. A. 1987, 107, N16

dications in these electronic states yielding neutral He and a cationic fragment are predicted to be as high as 89.9 kcal/mol for HeCC^{2+} . He compds. are best understood as donor-acceptor mols. consisting of He as electron donor and the resp. acceptor fragment. Strong He bonds are formed when a binding partner (acceptor) provides low-lying empty σ orbitals (σ -holes). Electroneg. elements such as F or O are not suitable for binding He due to their highly filled valence shells. More promising candidates should provide empty orbitals which are still capable of attracting the low-lying electrons of the poor electron donor He. The stability of HeBeO is confirmed by CASSCF calcs. with a 6-31G(d,p) basis set and an active space of all 14 electrons in 11 orbitals. The structures and energies of the He compds. are rationalized by MO arguments and by anal. of the electron d. and its assoc. Laplace field. The strongly bound He ions are characterized by covalent semipolar He-C bonds, whereas the weaker bonds in some structures are caused by electrostatic interactions between closed-shell systems. The impact of this study on exptl., esp. interstellar, chem. is discussed.

C-X coes.

1987

X- uuepm. 2ayh

108: 46179s Spectroscopy in the visible and near ultraviolet region of some organic molecules and their van der Waals complexes. Van Herpen, W. M.; Majewski, W. A.; Pratt, D. W.; Meerts, W. L. (Phys. Lab., Univ. Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). NATO ASI Ser., Ser. C 1987, 212 (Struct. Dyn. Weakly Bonded Mol. Complexes), 279-90 (Eng). By using a mol. beam app. with a single frequency dye laser, it was possible to resolve several rovibronic transitions of some large mols. and their van der Waals complexes with noble gas atoms. The rotational consts. of tetracene, fluorene, and the fluorene-Ar complex were detd. The structure of the complex was derived. In the rotational spectra of the tetracene-noble gas complexes, perturbations are present, increasing with the size and no. of the attached atoms. Fluorescence excitation spectra of trans-stilbene and the stilbene-Ar complex are reported.

Гранулам. роом.

C. A. 1988, 108, N 6

HeCO²⁺

1987

7 8 Б1028. Многозарядные гелийсодержащие катионы HeCO²⁺, HeCF³⁺ и HeCNe⁴⁺. Multiply-charged helium-containing cations: HeCO²⁺, HeCF³⁺ and HeCN⁴⁺. Wong Ming Wah, Nobes Ross H., Radom Leo. «Rapid Commun. Mass Spectrom.», 1987, 1, № 1, 3—5 (англ.)

Методом теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка (МП4) в базе 6-311ГФ** с оптимизацией геометрии на уровне МП3/6-311ГФ** проведены расчеты HeCO²⁺ (I), HeCF³⁺ (II) и HeCNe⁴⁺. I и II по геометрии очень близки к родственным изоэлектронным H-содержащим ионам HCO⁺ и HCF²⁺ и характеризуются короткими и прочными связями He—C. Диссоциация II на He⁺ и CF²⁺ эндотермична (973 кДж/моль), барьер р-ции 132 кДж/моль.

Э. Д. Герман

М. Л., Де

(+2) 12

Х. 1988, 19, № 8

HeCF³⁺

1987

Wong Ming Wah, Nobes
Ross H., et al.

u.n.,
De;

Rapid Commun. Mass
Spectrom., 1987, 1, N1,
3-5.

(see. HeCO²⁺; (iii))

HeCNe⁴⁺

1987

Wong Ming Wah, Nobes
Ross H., et al.

u.n., Rapid Commun. Mass
Spectrom., 1987, 1, N1,
De; 3-8.

(see. He CO²⁺; III)

He- CO_2

(Um. 31368)

1988

поверх.
поверх.
Нерв

Beneventi L., Casavecchia P., et al.,

Chem. Phys. 1988, 89,
N 8, 4671-4679.

CO-Ar

1988

109: 197488p A rovibrational study of regular/irregular behavior of the carbon monoxide-argon system. Farantos, Stavros C. (Dep. Chem., Univ. Crete, Iraklion, Greece 711 10). NATO ASI Ser., Ser. C 1988, 235 (Fractals, Quasicryst., Chaos, Knots Algebraic Quantum Mech.), 195-206 (Eng). Classical and quantum mech. rotational-vibrational calcns. have been performed for the bound states of the van der Waals system CO-Ar. From the nodal patterns of the eigenfunctions and the predominant coeffs. in the basis set expansion, it is shown that the regular/irregular classical and quantum behavior are in qual. agreement. Regular/localized states are assocd. with those states which have one, two and three quanta in the bending mode but no excitation in the stretching mode. For the present system the projection of the total angular momentum on the body fixed z-axis is an almost good quantum no. Thus mixing among the zero order basis functions occur through the potential part of the Hamiltonian.

momen-
tation

C.A. 1988, 109, N22

Ne · CO₂

OM 29876

1988

Сус-горнеп.
ук чекмы

109: 82346y Optothermal-infrared and pulsed-nozzle Fourier-transform microwave spectroscopy of rare gas-carbon dioxide complexes. Fraser, G. T.; Pine, A. S.; Suenram, R. D. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(10), 6157-67 (Eng). Sub-Doppler IR spectra of Ne-CO₂, Ar-CO₂, and Kr-CO₂ were recorded near 3613 and 3715 cm⁻¹, in the region of the $2\nu_2^0 + \nu_3/\nu_1 + \nu_3$ Fermi diad of CO₂, using an optothermal mol.-beam color-center laser spectrometer. In addn., pulsed-nozzle Fourier-transform microwave spectra are reported for the ground vibrational states of the complexes. The IR and microwave spectra are consistent with T-shaped complexes as shown originally for Ar-CO₂. The IR band origins for the Ar and Kr complexes are red shifted, from that of free CO₂, by 1.09 and 0.95 cm⁻¹ for Ar-CO₂ and by 1.97 and 1.76 cm⁻¹ for ⁸⁴Kr-CO₂. For Ne-CO₂, blue shifts of 0.15 and 0.19 cm⁻¹ were obsd. The lower Fermi components are free of perturbations, whereas the upper components of Ar-CO₂ and Kr-CO₂ are perturbed. For Ar-CO₂, the perturbation is strong, shifting the positions of the obsd. Q-branch lines of the $K_a = 1 \leftarrow 0$ subband by as much as 500 MHz.

(+2) ☒



Kr·CO₂, Ar·CO₂

C.A. 1988, 109, N10

Ne C^{n+}

$n=1,2$

[Dm. 29197]

1988

Frenking G., Koch W.,

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Processes,
1989, 87, N3, 335-338.

Ze, We, Do,
mopem-
paerem

$C_2H_4F_2 \cdot Ar$

1988

109: 239449j Consistent force field modeling of matrix-isolated molecules. III. Gauche 1,2-difluoroethane:argon cluster Ar_{364} . Gunde, R.; Guenthard, H. H. (Phys. Chem. Lab., ETH-Zent., 8092 Zurich, Swed.). *Chem. Phys.* 1988, 126(2-3), 229-41 (Eng). In continuation of recent work on consistent force field (CFF) modeling of systems built from a 364 Ar atom cube-shaped crystal fragment substituted in the center by one *trans*-difluoroethane mol., CFF computations for gauche difluoroethane: Ar_{364} are reported. Starting from two different CFF potential energy functions built additively from the harmonic potential of gauche difluoroethane, from pair potentials for mol.-matrix interactions and Ar-Ar pair interactions for the matrix, extended searches for locally stable configurations characterized by two external structural parameters Φ_{CC} , $T_{[mno]}$ are carried out. Potential energy minimization with respect to all 1116 Cartesian coordinates revealed the existence of three locally stable defects G1, G21, G22 which are close analogs of stable defects found earlier with the system *trans*-difluoroethane: Ar_{364} , and which differ significantly in total energy and external structural

Chem. NCM.

C. A. 1988, 109, N26

parameters. Procedures for search and localization of stationary configurations as well as for extrapolation of CFF energy and structural parameters by low-order Pade approximants are described, required to est. values of energy and parameters from finite energy minimization sequences. Partition of energy into intramol., mol.-matrix and matrix contributions shows the intramol. part to amt. to $\lesssim 50$ cal/mol, but to depend sensitively on distortion of the dihedral angle by mol.-matrix interactions. Distortion of bond lengths and bond angles of DFE by interactions amt. to < 4 mA and $< 0.5^\circ$ resp., but distortion of the dihedral angle may reach values up to 4° . CFF energies of interconversion of the three defects are given and various relations to defects reported earlier for the trans conformer of DFE will be discussed.



Ne. CaH_4

As. CaH_4

Kr. CaH_4

ге, уровни
металла

(Dm. 31200)

1988

Hair S.R., Beswick J.A.,
et al.,

J. Chem. Phys., 1988,
89, N 7, 3970 - 3982.

$\text{CH}^{+2} - \text{He}$

1988

№ 9 Л207. Спектроскопия кинетической энергии CH^{2+} : первое прямое подтверждение проявления электронно-возбужденного состояния. Translational energy spectroscopy of CH^{2+} : First direct evidence of an excited electronic state. Hamdan M., Brenton A. G., Mathur D. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 144, № 4, 387—390 (англ.)

Методом спектроскопии кинетич. энергии с высоким разрешением исследовано неупругое рассеяние $\text{CH}^{+} - \text{He}$ и $\text{CH}^{+2} - \text{He}$. Впервые непосредственно зарегистрировано электронно-возбужденное состояние иона $\text{CH}^{2+} ({}^2\Sigma^{+})$ с энергией возбуждения 12,3 эВ. Состояние является метастабильным, несмотря на существование большого числа открытых каналов быстрого дипольно-разрешенного радиационного и преддиссоциационного распада.

В. С. Иванов

М.П.

ср. 1988, 18, № 9

Ar CO₂⁺

Ar CO₂

meopen.
pacem
nomeths-
nrepXH.

1988

110: 45218h Electronic structure calculations for ArCO₂⁺ and ArCO₂. Hwang, Woong Lin; Lee, Yoon Sup; Kim, Ja Hong. (Dep. Chem., Korea Adv. Inst. Sci. Technol., Seoul, 130-650 S. Korea). *Bull. Korean Chem. Soc.* 1988, 9(3), 153-6 (Eng). Ab initio calcns. are performed for ArCO₂⁺ and ArCO₂. Between the two configurations of ArCO₂⁺ the orbital interactions and the higher order correlation calcns. favor the T-shape, and their interaction energies are calcd. to be approx. half the exptl. values using 6-31G* basis set. In ArCO₂, the calcns. qual. favor the T-structure, which is compatible with the expt. However, the true interaction energy is obscured since it is within the BSSE limit at this basis set size and correlation level. Addn. of sp-type diffuse functions increases the interaction energies by a considerable amt., but the BSSE estd. by the CP method are responsible for a significant portion of the difference. The possible linear equil. structure of the Ar⁺-CO₂ complex, where the charge is localized on Ar, is suggested. The potential energy surface and the amt. of charge transfer are shown to be sensitive to the type and balancing of basis set.

C.A. 1989, 110, N 6

Ne-CH₄ Kerstel E. R. T.,
Janssens M. F. M.
et al.

nomerus. Chem. Phys. 1988,
p-ud 119 (2-3), 325-41.

(cur. ● Ne-O₂; III).

Ne-CO₂

1988

Kerstel E.R.T.,
Janssens M.F.M.

nommes. Chem. Phys. 1988,
p-ur 119 (2-3), 325-41.

(Cur. ● Ne-O₂; III)

$C_6F_6^+X_n$

om. 29063

1988

 $(X=He, Ne, Ar)$

8 Л263. Спектроскопия возбуждения флуоресценции ионных кластеров, содержащих хромофорную группу $C_6F_6^+$. Fluorescence excitation spectroscopy of ionic clusters containing the $C_6F_6^+$ chromophore. Kung C. - Y., Miller T. A., Kennedy R. A. «Phil. Trans. Roy. Soc. London», 1988, A324, № 1578, 223—231 (англ.)

Исследованы спектры возбуждения молекулярных ионных комплексов $C_6F_6^+X_n$ ($X=He, Ne, Ar, N_2$). Показано, что результаты позволяют проверить модельные потенциалы для этих кластеров. Для $n=1$ и $X=He$ и Ar почти адекватное описание эксперимента дает простая модель дальнего действия потенциала, однако для $X=Ar$ проявляется заметный вклад компоненты, обусловленной переносом заряда. В. С. И.

спектры
возбуждения

④ ⊠

 $C_6F_6^+N_{2n}$

ф. 1988, 18, № 8

KrCO₂ (om. 31494) 1988
Randall R.W., Walsh M.A., et al.,
Faraday Discuss. Chem. Soc.,
cnekmp, 1988, 85, 13-21.
M.N.

Infrared Absorption Spectro-
scopy of Rare-gas-CO₂
Clusters produced in Super-
sonic Expansions.

Ne CO₂

(OM-31494)

1988

Randall R.W., Walsh M.A.,
et al.,

Chem. Phys. Lett., Faraday Discuss. Chem. Soc.,
1988, 85, 13-21.

Infrared Absorption Spectro-
scopy of  Rare-gas-CO₂
Clusters produced in supersonic

Expansions.

ArCl₂

(DM. 31 494)

1988

Randall R.W., Walsh M.A.,
et al.,

crummy,
u.n.

Faraday Discuss. Chem.
Soc., 1988, ~~A~~ 85, 13-21.

Infrared
spectroscopy



Absorption
Rare - gas-Cl₂

Clusters produced in Superso-
nic Expansions.

XeCl₂

(OM 31494)

1988

Randall R.W., Walsh M.A., et al.,

Faraday Discuss. Chem. Soc.,

crkmp, 1988, 85, 13-21.
M.R.

Infrared Absorption Spectro-
scopy of Rare-gas-CO₂ Clusters
produced  in Supersonic
Expansions.

CO₂-Ar

Ом. 30788 1988

6 Б1282. Инфракрасная спектроскопия поглощения комплексов CO₂-Ar. Infrared absorption spectroscopy of CO₂-Ar complexes / Sharpe S. W., Sheeks R., Wittig C., Beaudet R. A. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 3.— С. 267—272.— Англ.

Методом сверхзвуковой струи с использованием перестраиваемого диодного ИК-лазера измерен колебательно-вращат. спектр в обл. 2345—2354 см⁻¹ комплекса CO₂-Ar (I) при 8 К. Определены вращат. постоянные I в основном и возбужденном колебат. состояниях ($\nu_4=0$ и $\nu_4=1$), к-рые сопоставлены с лит. данными. Рассчитаны геометрич. параметры I в обоих состояниях и показано, что комплекс имеет T-образную структуру. Отмечено, что в условиях масс-спектрометрич. измерений (18—70 эВ) получить пик для CO₂Ar⁺ не удалось. Обсуждены перспективы использования метода для изучения др. слабых комплексов (CO₂HBr, CO₂H₂S и др.).

С. Г. Казарян

М.П.

X-1989, № 6

CO₂ · Ar

(Am. 30788)

1988

109: 239598g Infrared absorption spectroscopy of carbon dioxide-argon complexes. Sharpe, S. W.; Sheeks, R.; Wittig, C.; Beaudet, R. A. (Dep. Chem., Univ. Southern California, Los Angeles, CA 90089 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 151(3), 267-72 (Eng). The ν_1 rovibrational band of CO₂-Ar at ~ 2350 cm⁻¹ (i.e. CO₂ asym. stretch) was recorded in absorption at 8 K using a tunable diode laser. Rotational consts. for both $\nu_1 = 0$ and 1 are similar, and indicate a T-shaped geometry. It was not possible to detect this species mass spectrometrically (18-70 eV electrons), indicating extensive fragmentation.

(D4)

LLK

C.A. 1988, 109, N26

He - CH₄

1988

21 Б1333. О вращательно-трансляционных спектрах поглощения пар He—CH₄. Concerning the roto-translational absorption spectra of He—CH₄ pairs. Taylor R. H., Borysow A., Frommhold L. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 1, 45—58 (англ.)

Выполнен квантовомеханич. расчет спектрального профиля индуцированного столкновениями вращательно-трансляц. спектра поглощения для смеси газов He—CH₄ в диапазоне т-р 40—350 К. Расчет индуцированного столкновениями спектра выполнен с учетом свободно-свободных, связанно-свободных, связанно-связанных и свободно-связанных переходов с возможным образованием ван-дер-ваальсовых димеров. Проведено сопоставление различных модельных Пт взаимодействия, из к-рых наилучшие результаты получены с дисперсионной моделью Хартри—Фока. Расчетные спектры в основном согласуются с эксперим. данными для He—CH₄ в диапазоне т-р 150—353 К.

С. Н. Мурзин

М.А.

Х. 1988, 19, № 21

Ar CD

(DM. 30918)

1988

Tennyson J., Miller S., et al.,

Коллат.
вращат.
энергии

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. Pt II, 1988, 84, N 9,
● 1295-1303.

NeC²⁺
ArC²⁺

(DM-30499)

1988

109: 216344g Ab initio calculations of the potential-energy curves of the low-lying states of neon carbide (NeC²⁺), argon carbide (ArC²⁺), neon oxide (NeO²⁺) and argon oxide (ArO²⁺). Vincent, Mark A.; Hillier, Ian H. (Chem. Dep., Univ. Manchester, Manchester, UK M13 9PL). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1988, 84(8), 1229-36 (Eng). Ab initio calcs., including CI, have been carried out to predict the potential-energy curves of the low-lying states of NeC²⁺, ArC²⁺, NeO²⁺ and ArO²⁺. The results are used to discuss mass-spectrometric charge-stripping expts. carried out to prep. and characterize these dications, and are compared with potential-energy curves calcd. by a semiempirical method.

номех. крив.
эксп. ком;
неопем. прам

(42) 47



NeO²⁺, ArO²⁺

c.A. 1988, 109, N 24

NeC⁺
ArC²⁺

UM 30499

1988

† 5 Б1039. Неэмпирические расчеты кривых потенциальной энергии низколежащих состояний NeC²⁺, ArC²⁺, NeO²⁺ и ArO²⁺. Ab initio calculations of the potential-energy curves of the low-lying states of NeC²⁺, ArC²⁺, NeO²⁺ and ArO²⁺ / Vincent M. A., Hillier I. H. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. Pt 2.— 1988.— 84, № 8.— С. 1229—1236.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные кривые низколежащих электронных состояний ионов NeC²⁺, ArC²⁺, NeO²⁺ и ArO²⁺. Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций (12s9p1d)/[7s5p1d] на Ar и (10s6p1d)/[6s3p1d] на Ne, O и C. Для связанных состояний рассчитаны колебат. частоты. Полученные потенциальные кривые сопоставлены с данными предшествовавших полуэмпирич. оценок. Потенциальные кривые состояний X¹Σ⁺ и a³Π NeC²⁺ и ArC²⁺ имеют минимумы, отделенные от диссоциац. пределов значит. потенциальными барьерами. Потенциальные кривые всех состояний NeO²⁺ и основного состояния X³Σ⁻ ArO²⁺ чисто отталкивательные. На потенциальной кривой со-

М.П.

72

X. 1989, NS

стояния $a^1\Delta$ AgO^{2+} имеется минимум и достаточно высокий потенциальный барьер, на основании чего сделан вывод, что в масс-спектрометрич. эксперименте наблюдалось именно состояние $a^1\Delta$ AgO^{2+} . А. А. Сафонов,



$\frac{NeC^{2+}}{ArC^{2+}}$

On 30 499

1988

3 Д52. Неэмпирические расчеты кривых потенциальных энергий низколежащих состояний NeC^{2+} , ArC^{2+} , NeO^{2+} и ArO^{2+} . Ab initio calculations of the potential-energy curves of the low-lying states of NeC^{2+} , ArC^{2+} , NeO^{2+} and ArO^{2+} / Vincent Mark A., Hillier Ian H. // J. Chem. Soc. Faraday Trans. Pt2.— 1988.— 84, № 8.— С. 1229—1236.— Англ.

Проведены неэмпирич. расчеты кривых потенциальных энергий с учетом взаимодействия конфигураций. Результаты сравниваются с данными полуэмпирич. расчетов. Для NeC^{2+} и ArC^{2+} кривые $X^1\Sigma_a^+$ и $a^3\Pi$ -состояний, рассчитанные с помощью этих методов, близки. Однако, для $^1\Sigma^+$ -состояний полуэмпирич. метод предсказывает более короткие длины связей и более высокие барьеры по сравнению с неэмпирич. расчетами. Для первых возбужденных состояний величины барьеров, получаемые двумя методами, близки. Однако, полуэм-

М.П.

(43) 

ср. 1989, № 3

NeO^{2+} , ArO^{2+}

пирич. длины связей опять короче, чем при неэмпирич. расчетах. Оба метода не приводят к существованию значительной потенц. ямы для низколежащих состояний NeO^{2+} . В противоположность полуэмпирич. методу, неэмпирич. метод предсказывает для $X^3\Sigma^-$ -состояния AgO^{2+} отсутствие потенц. ямы. Предсказано, однако, что состояние $^1\Delta$ имеет значительный барьер для диссоциации. Полученные данные применяются для интерпретации экспериментов по образованию 2-зарядных молекулярных ионов.

Г. К.



HeC^{n+}

1989

$n=1,2$ Frenking Bernot, Koch
Wolfram et al.

Ze, De,
meop.

J. Phys. Chem. 1989,
93(9), 3397-410.

pacrēm

(cu. ● HeLi^{n+} ; III)

ArC⁺

1989

Frenking Gernot,
Koch Wolfram et al.

J. Phys. Chem. 1989,
93(9), 3410-18.

(cor. ● NeLi⁺; III)

NeC⁺

1989

Frenking Gernot,
Roch Wolfram et al.

J. Phys. Chem. 1989,
93(9), 3410-18.

(ex. ● NeLi⁺; III)

HeC⁺

1989

15 Б1020. Неэмпирический расчет подвижности C⁺ (²P) и C⁺ (⁴P) в гелии. Ab initio calculation of the mobility of C⁺ (²P) and C⁺ (⁴P) in helium / Grice S. T., Harland P. W., MacLagan R. G. A. R., Simpson R. W. // Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.— 1989.— 87, № 2.— С. 181—186.— Англ.

Рассчитаны потенциальные кривые взаимодействия иона C⁺ в состояниях ²P и ⁴P с атомом He в основном состоянии, отвечающие иону HeC⁺ в состояниях ²Π, ²Σ⁺ и ⁴Σ⁻, ⁴Π соотв. Расчеты проведены с помощью многочастичной теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка с учетом 1-, 2- и 4-кратных возбуждений в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций 6—311+ГФ(3df, 3pd). Определены основные спектроскопич. постоянные. Полученные потенциальные кривые использованы для определения подвижности иона C⁺

ll-n.

X. 1989, N 15

в состояниях 2P и 4P в гелии с помощью двухтемпературной теории ионного транспорта. Сделан вывод о возможности достаточно точного расчета подвижности в гелии иона, состояние к-рого коррелирует более чем с одним состоянием двухатомной молекулы, а также подвижности иона в возбужденных состояниях, эксперим. определение к-рой затруднено. А. А. Сафонов



Ne : CO₂

1989

(Vi)

111: 104786n The vibrational spectra of molecular ions isolated in solid neon. I. Carbon dioxide ion(1+) and ion(1-). Jacox, Marilyn E.; Thompson, Warren E. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(3), 1410-16 (Eng). When a Ne:CO₂ sample was codeposited at ~5 K with a beam of Ne atoms that was excited in a microwave discharge, an absorption appeared at 1421.7 cm⁻¹, near the gas-phase band center for the antisym. stretching fundamental (ν_3) of CO₂⁺. Isotopic substitution studies support the assignment of this absorption to that fundamental of CO₂⁺, and an absorption at 1658.3 cm⁻¹ to ν_3 of CO₂⁻. In earlier studies of the charge transfer interaction of an alkali metal with CO₂, this vibration of CO₂⁻ was strongly perturbed by coordination with the alkali metal cation. The threshold for electron photodetachment from CO₂⁻ was obsd. in the visible spectral region. Evidence was obtained for the stabilization of the O₂C...OCO⁻ cluster anion.

C.A. 1989, 111, ~12

CAr^{n+}

1989

$n = 1-3$

Ming Wah Wong,
Radom L.

структура,
стабильность.

J. Phys. Chem. 1989. 93,
C. 6303-6308.

(see $\odot BAr^{n+}$; III)

(Am. 31779)

1989

Xe-C

Naumann D., Tyrra W.,

J. Chem. Soc. Chem.

Comm.

1989, N1, 47-50.

$C_2H_2 \cdot Ar$

М.П.

X. 1990, N 9

1989

9 Б1318. Инфракрасная спектроскопия в свободной струе вандерваальсового комплекса $C_2H_2 \cdot Ar$ / Ohshima Y., Matsumoto Y., Takami M., Kuchitsu K. // Рэдза кагаку кэнкю=Laser Sci. Prog. Rept IPCR.— 1989.— № 11.— С. 7—9.— Яп.; рез. англ.

На ИК-спектрометре с использованием сверхзвуковой струи в обл. частот $728,4—734,9 \text{ см}^{-1}$ с точностью $0,003 \text{ см}^{-1}$ измерен колебательно-вращат. спектр вандерваальсового комплекса $C_2H_2 \cdot Ar$. ИК-спектр вблизи полосы ν_6 мономера C_2H_2 отнесен к двум модам неплоских и плоских изгибных колебаний молек. комплекса с частотами, соотв., $730,6814(30)$ и $730,6608(30) \text{ см}^{-1}$. Анализ вращат. структуры полос выполнен с учетом квартичного центробежного искажения и кориолисова взаимодействия между двумя модами. Структура комплекса имеет Т-образную форму с расстоянием между центрами масс фрагментов около $4,04 \text{ \AA}$. Полученные результаты согласуются с ИК-данными для родственных комплексов. С. Н. Мурзин

C_2H_2Ar

DM 32878

1989

/ 111: 183334q Pulsed-nozzle Fourier-transform microwave spectroscopy of acetylene-argon (C_2H_2Ar) complex. Ohshima, Yasuhiro; Iida, Minoru; Endo, Yasuki (Coll. Arts Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 161(3), 202-6 (Eng). The rotational spectrum of C_2H_2Ar was studied by pulsed-nozzle Fourier-transform microwave spectroscopy. The complex has C_{2v} symmetry. The Ar atom is located 4.04 Å from the center of mass of C_2H_2 ; the distance between the adjacent Ar and C atoms is 0.7 Å larger than that expressed from the van der Waals contact. The extremely low van der Waals bending frequency ($\approx 9\text{ cm}^{-1}$) estd. from anal. of the centrifugal distortion consts. indicates small anisotropy in the intermol. potential of this complex.

CH₂mp,
M.N.

C.A. 1989, 111, N20

SC^+Ne^n

1989

$n=0-4$

Pyykkö P.

Chem. Phys. Lett.

u.n.

1989. 162, N4-5. C.
349-354.

(see. $SB O^-$; III)

NeCD

Randall R.W., et al., 1989
High Resolution Infra-
red Spectroscopy of the
NeCD van der Waals
Molecule. A Non-Rigid
System.

N24

Eleventh Colloquium On High
Resolution Molecular Spectro-
scopy, Giessen, September
18-22, 1989, A1, N24.

Ar-CH₃OH

1989

6 Б1509. Микроволновый спектр, структура и электрический дипольный момент Ar-CH₃OH. Microwave spectrum, structure, and electric dipole moment of Ar-CH₃OH / Suenram R. D., Lovas F. J., Fraser G. T., Gillies J. Z., Gillies C. W., Onda M. // J. Mol. Spectrosc. — 1989. — 137, № 1. — С. 127—137. — Англ.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в области частот 7—23 ГГц с точностью около 4 кГц измерены вращат. спектры трех изотопич. образцов вандерваальсового комплекса Ar-CH₃OH (I), Ar-CD₃OH и Ar-¹³CH₃OH в основном и трех возбужденных колебат. состояниях. Анализ МВ-спектров в основном состоянии выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции. Вращат. постоянные I в основном состоянии равны в МГц A=25468,821(4), B=2084,42(2), C=1928,46(2). Опре-

И.А.

Х. 1990, № 6

делены компоненты дипольного момента $\mu_a = 1,076(2) D$, $\mu_b = 1,065(5) D$, $\mu_c = 0,23(29) D$ и полный дипольный момент $\mu = 1,531(15) D$. Полученные МВ-данные отнесены к комплексу Т-образной формы с расстоянием между центрами масс Ag и CH_3OH $3,684(14) \text{ \AA}$. Возбужденные колебат. состояния отнесены к туннельным состояниям, связанным с состояниями внутреннего вращения в свободном фрагменте CH_3OH . С. Н. Мурзин

1989

Ar-CH₃OHAr-CD₃OH

M.A.

111: 143122n Microwave spectrum, structure, and electric dipole moment of argon-methanol. Suenram, R. D.; Lovas, F. J.; Fraser, G. T.; Gillies, J. Z.; Gillies, C. W.; Onda, M. (Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 137(1), 127-37 (Eng). Microwave spectra of Ar-MeOH, Ar-CD₃OH, and Ar-¹³CH₃OH were measured between 7 and 25 GHz using a pulsed-nozzle Fourier transform microwave spectrometer. Two tunneling states were obsd. which correlate to the A and E internal-rotor states of free MeOH. For the lowest energy A state, *a*- and *b*-type spectra were assigned and fit to an asym.-top Hamiltonian, giving $A = 25,468.821(4)$ MHz, $B = 2084.42(2)$ MHz, $C = 1928.46(2)$ MHz, $\Delta_J = 21.90(2)$ kHz, $\Delta_{JK} = 371.7(1)$ kHz, $\delta_K = 474(10)$ kHz, $\delta_J = 1.61(8)$ kHz, and $h_K = 10.1(8)$ kHz for Ar-MeOH. The elec.-dipole-moment components, μ_a and μ_b , were detd. by Stark effect as 1.079(1) and 1.069(5) D, resp. The Stark-effect results and the absence of *c*-type transition indicate that $\mu_c \sim 0$. The structure of the complex is T-shaped with an Ar to MeOH center-of-mass sepn. of 3.684(14) Å. The inertial defect, $\Delta = -0.2347$ u Å², is surprisingly small and suggests that the MeOH unit is internally rotating against the Ar. This is in addn. to the internal rotation of the Me group against the OH top. Finally, a no. of transitions were obsd. which do not appear to fit an asym.-top Hamiltonian. These are assigned to an *E* tunneling state of the complex.

C.A. 1989, 111, N16

Ne · C₂H₄

1989

(UK)

/ 111: 86480b Prediction of the infrared spectrum for the neon-ethylene van der Waals complex. Tiller, A. R.; Peet, A. C.; Clary, D. C. (Univ. Chem. Lab., Cambridge, UK CB2 1EW). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(2), 1079-91 (Eng). The van der Waals states of Ne-C₂H₄ for $J \leq 10$ were calcd. with C₂H₄ in both its ground and ν_7 excited vibrational states. The method involves sepn. of the van der Waals bending motions from the stretching motions and C₂H₄ vibrations. The IR spectrum of the complex is predicted in the region of the C₂H₄ ν_7 vibrational mode, and the results were compared with the calcd. spectrum of free C₂H₄. The effect of ignoring off-diagonal Coriolis terms (which mix together different K states) in the Ne-C₂H₄ Hamiltonian was investigated.

C.A. 1989, III, N 10

CNe²⁺

1989

Wong Ming Wah,
Nobes Ross H. et al.

радион
электро-
массы
и Do

J. Chem. Phys. 1989.
91 (5), 2971-9.

(сел. ● N₂; III)

CAr^{n+1}

1989

$n = 1 \div 3$

Wong Ming Wah,
Radom Leo.

спектр.
и свободн.
теор.
расчет

J. Phys. Chem. 1989,
93 (17), 6303-8.

($\bullet$, BAr^{n+1} ; III)

XeC

1989

Xu Jie.

Спектр

Guangdong Xuebao
1989, 9(7), 591-7.

(see XeO; III)