

G-F-M

HJ—HF

1985

5 Л178. Микроволновый спектр комплекса HJ—HF.
Microwave spectrum of the HJ—HF complex. Bumgar-
ner R. E., Cogley C. D., Kukolich S. G. «Chem. Phys.
Lett.», 1985, 122, № 6, 535—537 (англ.)

С помощью МВ-фурье-спектрометра в диапазоне 8—18 ГГц исследован МВ-спектр комплекса HJ—HF, образуемого в охлаждаемой сверхзвуковой молекулярной струе. Идентифицирована квадрупольная СТС линий вращательных переходов с $J=1-2$, $2-3$ и $3-4$ основного колебательного состояния. Определены значения вращательной и центробежной постоянных ($\frac{1}{2}(B+C) = 2220,7475$ МГц, $D_J = 8,842$ кГц), постоянной квадрупольной связи ядра йода ($eq_{aa}Q = 687,012$ МГц) и параметра вращательной зависимости $eq_{aa}Q$ ($\Delta = -40,6$ кГц). Показано, что эффективная структура комплекса HJ—HF нелинейная, причем ось молекулы HJ образует угол 73° с a -осью комплекса.

М. Р. Алиев

(М. Р.)

с/з. 1986, 18, N5

HJ—HF

Om. 22791

1985

11 Б1230. Микроволновый спектр комплекса HJ—HF.
Microwave spectrum of the HJ—HF complex. Bum-
garner R. E., Cogley C. D., Kukolich S. G. «Chem.
Phys. Lett.», 1985, 122, № 6, 535—537 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с им-
пульсным молек. пучком измерен в обл. частот 8—
18 ГГц с разрешением около 5 кГц вращат. спектр
молек. комплекса HJ—HF в основном колебат. состоя-
нии. Анализ МВ-спектра выполнен с учетом квартич-
ного центробежного искажения и 1-ядерного квадрупольного взаимодействия. Определены полусумма вращат. постоянных $(B+C)/2=2220,74746(82)$ МГц, постоянная центробежного искажения $D_J=8,842(32)$ кГц, постоянная квадрупольного взаимодействия $eq_{aa}Q=687,012(26)$ МГц и центробежная поправка к квадрупольному взаимодействию $\Delta(eq_{aa}Q)=-40,6(2,6)$ кГц.
С. Н. Мурзин

МВ спектр

X. 1986, 19, n 11

HJ: HF

Om. 22791 (1985)

104: 78033y Microwave spectrum of the hydrogen iodide-hydrogen fluoride complex. Bumgarner, R. E.; Cogley, C. D.; Kukolich, S. G. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 122(6), 535-7 (Eng). Twenty-seven $\Delta J = +1$ rotational transitions for the HI-HF complex were obsd. at 8-18 GHz. The lines were measured to an accuracy of 5 kHz using a pulsed-beam Fourier transform microwave spectrometer. The spectroscopic consts. obtained by fitting the obsd. transitions are $1_2(B + C) = 2220.74746(82)$ MHz, $eqQ = 687.012(26)$ MHz and $\Delta(eqQ) = -40.6(2.6)$ kHz.

(HF complex)

C.A. 1986, 104, N10

HY-MF

[Om. 24895 "a"]

1986

46 cncmp

Kukolich S. B., Bum-
garner R. E.,
University of Arizona,
Tucson, Arizona, U.S.A.

Microwave Spectra & HY-MF
Using a Pulsed-Beam Fourier Trans-
form Spectrometer ●
Eleventh Austin Symposium on

Molecular Structure,
Austin, 1986

HJ-HF

1986

Kukolich S. G., Bum-
garner R. E.,

y6 check

University of Arizona,
Tucson, Arizona, U.S.A.

Microwave Spectra of HJ-
HF. Using a Pulsed-Beam

Fourier Transform Spectrometer

Eleventh Austin Symposium

on Molecular Structure,
1981, N3-5.

HJ-HF

1987

§ 8 Л181. Микроволновый спектр и структура комплексов HJ-HF Microwave spectra and structure of HJ-HF complexes. Bumgarner R. E., Kukolich S. G. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 3, 1083—1089 (англ.)

С использованием микроволнового импульсного фурье-спектрометра измерены частоты вращательных переходов комплексов HJ-HF, HJ-DF, DJ-HF и DJ-DF в области 4—18 ГГц. Разрешена и измерена сверхтонкая структура линий переходов $J=0 \rightarrow J'=1$, обусловленная спин-спиновым (для комплекса HJ-HF) и квадрупольным (для комплекса HJ-DF) взаимодействиями. Подробно описаны особенности установки и детали эксперимента. Измеренные значения частот и найденные по ним значения вращательных постоянных приведены в таблицах. Определена геометрия изучаемых

М.П.

ф. 1987, 18, 48

комплексов. Показано, напр., что комплекс HJ—HF образует треугольник с углом между связями H—J и H—F , равным $70,1(2,8)^\circ$, и расстоянием между атомами J и F , равным $3,660(8)$ Å. Найденные структурные параметры сравниваются с известными из литературы структурными параметрами аналогичных комплексов HF—HCl . В. А. Морозов

HJ—HF

1987

17 Б1250. Микроволновые спектры и структура комплексов HJ—HF. Microwave spectra and structure of HJ—HF complexes. Bumgarner R. E., Kukolich S. G. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 3, 1083—1089 (англ.)

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в обл. частот 4—18 ГГц с точностью 5 кГц измерены вращат. спектры четырех изотопич. образцов комплексов, HJ—HF, HJ—DF, DJ—HF и DJ—DF, в основном колебат. состоянии. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом квартичного центробежного искажения, D- и J-ядерных квадрупольных взаимодействий. Молек. комплекс характеризуется структурой в форме треугольника с углом между фрагментами $\angle(\text{HJ—HF}) = 70,1(2,8)^\circ$ и с атомом J, расположенным на оси HF в последовательности J...HF, $r(\text{J—F}) = 3,660(8)$ А. В ряду комплексов HJ—HF, HCl—HCl, HF—HCl угол между фрагментами меняется, соотв., 70, 90 и 130°.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1987, 19, N 17

HJ. HF
HJ. DF

1987

106: 110270c Microwave spectra and structure of hydrogen
isotope-hydrogen fluoride complexes. Bumgarner, R. H.; Kucholich,
K. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). J
Chem Phys, 1987, 86(3), 1987-1992. Microwave spectra for the
HI-HF, HI-D₂, DI-HF, and DI-D₂ complexes were measured using
a pulsed-beam, Fourier-transform microwave spectrometer. Rotational
transitions were measured at 4-18 GHz to an accuracy of
0.001 MHz. The spectroscopic constants obtained by fitting the observed
transitions for the series HI-HF, HI-D₂, DI-HF, and DI-D₂ are:
 $B = (A + C)/2 = 2220.7482(8)$, $2173.236(2)$, $2201.627(4)$, and
 $2178.1(6)$ MHz; $eQq(I) = 687.61(2)$, $693.63(5)$, $725.96(4)$, and
 $727.6(1)$ MHz; $\Delta eQq(I) = -42(2)$, $-56(6)$, $-210(14)$, and $-141(25)$ kHz;
 $\nu = 3.86(3)$, $3.25(6)$, $8.1(6)$, and $8.3(5)$ kHz. This complex has an
interesting triangular structure with the H-I and H-F bonds making
an acute angle of $70.1(2.8)^\circ$. The I atom is coaxial with HF with a
heavy atom sepn. $R_0(I-F) = 3.660(4)$ Å. Hyperfine structure due to
D quadrupole coupling and H-F spin-spin interaction was resolved
and measured.

HF complex,
M.N.

C.A. 1987, 106, N14