

1969

H₂O

электрон.
строение

9 Д80. Расчет основного состояния молекулы H₂O с использованием минимального базисного набора. Andriessen J. A calculation of the ground state of H₂O using a minimal basis set. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 4, 257—258 (англ.)

Методом Рутана с использованием минимального базисного набора из орбиталей слейтеровского типа исследовано электронное строение молекулы H₂O в основном состоянии. Приведены волн. ф-ции, орбитальные энергии, полная энергия —75,6812 ат. ед. (—76,481), энергия связи 0,30 ат. ед. (0,37), равновесный угол Н—О—Н 110° (105), равновесная длина связи О—Н 1,89 ат. ед. (1,81), частота валентного колебания 1700 см⁻¹ (1595), дипольный момент 1,71 ед. Дебая (1,84), энергии ионизации 0,4204, 0,4590, 0,6386 ат. ед. (0,463, 0,533, 0,595) (в скобках приведены эксперим. данные). Полученные результаты предполагается использовать при исследовании суперсверхтонкого взаимодействия протонов с Mn²⁺ в La₂Mn₃(NO₃)₁₂·24H₂O.

В. Л. Лебедев

ф. 1969. 9А

1964

1969

H₂O

2.

парен

C.A. 1970.

72.12

60862d Determination of higher rotational terms of molecules of the asymmetric-top type by extrapolation. Barkov, V. D. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1969, 27(5), 759-61 (Russ). Diagrams of distribution of lower energy levels are proposed, which can be used for construction of smooth curves for detn. of higher energy levels by means of extrapolation. The method is applied to the water mol. in the vapor state. Exptl. and calcd. results are in good agreement. Unknown energy levels have been calcd. Wladyslaw S. Brud

H₂O

1969

12 Д323. Изучение молекулярной структуры и спектров аномальной воды. Bellamy L. J., Osborn A. R., Lippincott E. R., Bandy A. R. Studies of the molecular structure and spectra of anomalous water. «Chem. and Ind.», 1969, № 21, 686—688 (англ.)

Исследованы ИК-спектры в области 16 000—4000 см⁻¹ и спектры комб. рас. нормальной и аномальной (с пониженным давлением паров) воды. Обнаружено значительное уменьшение интенсивности в полосах 6 900 и 5 150 см⁻¹ аномальной по отношению к норм. воде. Замечено, что в спектре комб. рас. центр полосы валентного колебания аномальной воды имеет частоту 3 440 см⁻¹, а в случае нормальной 3 400 см⁻¹. Авторы считают, что различия спектров нормальной и аномальной воды обусловлено тем, что аномальная вода должна состоять из полимерных единиц, которые могут быть четырехзвенным полимером или более высокомолекулярным полимером.

В. Болдырев

Стр - ра

ер. 1969. 127

1969

H₂O

Benedict W. S.

UK-amer

U.S. Clearinghouse Fed.
Sci. Tech. Inform. AD 1969
AD-692945, 43pp.

(0030r)

(Cu. CO₂) III.

128
rev. copy (H₂S, B₂H₆, H₂O) 1969

Cook & B, Palmieri P. 12 15 11

molec. phys, 1969, 17, v3, 271-273 (avw)

Approximate ab initio calculations
on polyatomic molecules. II.

Bunker, 1970, 6528

10 papers

XI-146

1969

H₂O (Ap) n gp.

De Paz M., Leventhal J. J.,
Friedman L., J. Chem. Phys.,
1969, 57, n 9, 3748-3761

2072 opus.

10, 11

1969

Дерягина
Богд

59323x Apparatus for studying the special properties of structural modifications of water. Deryagin, B. V.; Zakhavaeva, N. N.; Konovalova, A. I.; Mironenko, N. N. (Inst. Fiz. Khim., Moscow, USSR). *Zavod. Lab.* 1969, 35(7), 879-81 (Russ). Two types of app. are described for obtaining dense (structurally modified) H_2O , which exhibits max. d. of 1.35 g/cm^3 at subzero temps. Both app. employ the principle of condensing H_2O in fine ($10-50 \mu$) capillaries under unsatd. vapor conditions. The 1st unsatn. is obtained by keeping the capillary vessel at a higher temp. than the vessel contg. the pure H_2O , while for the 2nd, a concd. soln. of KH_2PO_4 is used. Superdense water exhibited d. charge hysteresis when cyclically cooled and heated near the f.p. The water in the capillaries sepd. into two immiscible phases of different d. and mol. structure. M. Simmer

C. A. 1970. 72. 12

OH_2

Ehrenson S.

1969

7ACS,

91, N14, 3693

кв. - мех.
расчет

(см. BeH_2) III

1969

H₂O

Ehrlenson S.

J. Amer. Chem.

Loc., 1969, 91, n. 14,

3702

кв.-мех.
расчет



(См. ВМ₂) III

H_2O

5 Б167. Изучение молекулы воды в газовой фазе. Возбужденные состояния H_2O , H_2O^+ и H_2O^- . Figuret — Fayard F. Study of the water molecule in the gaseous phase excited states of H_2O , H_2O^+ and H_2O^- . «Israel J. Chem.», 1969, 7, № 2, 275—289 (англ.)

Рассмотрены св-ва симметрии атомных и молек. орбиталей молекулы H_2O . Обобщены лит. данные по расчету энергетич. уровней и волновых ф-ций H_2O , H_2O^+ и H_2O^- . Построены диаграммы Уолша для различных уровней H_2O . Интерпретированы эксперим. данные по фотоэлектронному и УФ-спектру H_2O и данные масс-спектрометрич. исследований фотонизации H_2O и захвата электронов молекулами H_2O . Показано, что большинство возбужденных электронных уровней H_2O подвержены диссоциации. Обсуждается механизм диссоциации H_2O из различных уровней.

М. Р. Алиев

X. 1970.5



42

1969

18

1969

H₂O

chem. proc.

(64327k) Study of the water molecule in the gaseous phase excited states of H_2O , H_2O^+ and H_2O^- . Fiquet-Fayard, Florence (Fac. Sci., Orsay, Fr.). *Isr. J. Chem.* 1969, 7(2), 275-89 (Eng). A short account of the electron configuration of H_2O , including symmetry properties, is given. These simple considerations permit the explanation of the results of photoelectron spectroscopy expts. and photoionization expts.; the 3B_2 state of H_2O^+ is predissocd. Excited states of H_2O are all repulsive or predissocd., the more important fragments being $\text{OH}^2\pi$, $\text{OH}^2\Sigma^+$, and O. Some repulsive states of H_2O^- are known, but the important low-lying $^2A'$ state is unknown. BVJN

C.A. 1969.

H. 14

1969

 H_2O

memo

101328p) High resolution infrared spectra of water vapor ν_1 and ν_3 bands of $H_2^{18}O$. Fraley, Phillip E.; Rao, K. Narahari; Jones, Llewellyn Hosford (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(3), 312-47 (Eng). The ν_1 and ν_3 bands of $H_2^{18}O$ occurring in the region 2.5-3.0 μ were recorded with a high resolu. vacuum ir spectrograph and an anal. is presented of the rotational structure observed. A discussion is presented of the effects of perturbations between the upper states of the transitions involved. Several lines belonging to the ν_1 and ν_3 bands of $H_2^{17}O$ have been identified. RCKP

C.A. 1969. 70. 22

1969

H₂O

20 Б229. Инфракрасные спектры высокого разрешения паров воды. Полосы V_1 и V_3 H_2O^{18} . Fraley Philip E., Rao K. Narahari, Jones L. H. High resolution infrared spectra of water vapor. V_1 and V_3 bands of $H_2^{18}O$ «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 312—347 (англ.)

На вакуумном спектрографе высокого разрешения записаны полосы V_1 и V_3 H_2O^{18} (I) в области $3300—4000\text{ см}^{-1}$ и проведен анализ наблюдавшейся вращательной структуры. Приведены величины вращательных энергетич. уровней I для состояний (000), (100) и (001) для $1 \leq J \leq 9$. Обсуждены эффекты возмущений между высшими состояниями вращательно-колебательных переходов I.

Резюме

X. 1969. 20

H_2O .

ИК-
спектр

1969

10 Д268. ИК-спектры высокого разрешения паров воды. Полосы колебаний ν_1 и ν_3 H_2O^{18} . Fraley Philip E., Rao K. Narahari, Jones L. H. High resolution infrared spectra of water vapor. ν_1 and ν_3 bands of $H_2^{18}O$. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 312—347 (англ.)

Получены спектры паров воды, обогащенной изотопом O^{18} в слое 1 м в области 2,5—3 м с разрешением 0,1 cm^{-1} . Приведены частоты наблюдаемых линий с точностью $\pm 0,005$ cm^{-1} . Для регистрации спектров использован призмочно-решеточный вакуумный спектрометр с фокусным расстоянием 6 м и охлаждаемым приемником PbS. Произведена интерпретация наблюдаемых линий с использованием квантовых чисел J , K_{+1} и K_{-1} . На основе полученных данных вычислены энергии вращательных и колебательно-вращательных уровней молекулы H_2O^{18} в

ф. 1969. 10А

состояниях (000), (100) и (001) вплоть до $J=9$. Ряд наблюдаемых линий приписан молекуле H_2O^{17} . Определены частоты чисто колебательных переходов $\nu_1=3649,68_0 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_3=3741,58_1 \text{ см}^{-1}$ для H_2O^{18} и $\nu_1=3653,15 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_3=3748,36 \text{ см}^{-1}$ для H_2O^{17} . Бпбл. 8. М. В. Тонков

№ 0
2.

И.К.-

спектр

10 Д269. ИК-спектры высокого разрешения паров воды. Полосы колебаний ν_1 и ν_3 H_2O^{16} , Fraley Philip E., Rao K. Narahari. High resolution infrared spectra of water vapor. ν_1 and ν_3 bands of H_2^{16}O . «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 348—364 (англ.)

Получены спектры паров воды в области 2,5—3 μ с разрешением $\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$. Приведены частоты наблюдаемых линий с точностью $\pm 0,005 \text{ см}^{-1}$. Произведена интерпретация наблюдаемых линий с использованием квантовых чисел J , K_{+1} и K_{-1} . На основе полученных данных вычислены энергии вращательных и колебательно-вращательных уровней молекулы H_2O^{16} в состояниях (000), (100) и (001) вплоть до $J=10$. Отмечено расхождение с данными, полученными из анализа чисто вращательного спектра. Наблюдено возмущение вращательных уровней в возбужденных колебательных состояниях ν_1 и ν_3 . Определены частоты чисто колебательных переходов $\nu_1 = 3657,05_0 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_3 = 3755,97_0 \text{ см}^{-1}$. Библ. 16. М. В. Тонков

ф. 1969.

10 Я

1969

1969

101327n High resolution infrared spectra of water vapor ν_1 and ν_3 bands of H_2^{16}O . Fraley; Phillip E.; Rao, K. Narahari (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(3), 348-64 (Eng). The ν_1 and ν_3 bands of H_2^{16}O occurring in the region $2.5\text{--}3.0\ \mu$ were recorded with a high resolu. vacuum ir spectrograph and an anal. has been presented of the rotational structure observed. The present study led to the detn. of accurate values for the ground state energy levels of the H_2^{16}O mol. The band origins obtained are: $\nu_1 = 3657.05_0$ and $\nu_3 = 3755.97_0\ \text{cm}^{-1}$. A discussion is presented of the effects of perturbations between the upper states of the transitions involved.

RCKP

chem p

C.A. 1969. 70. 22

H_2O

Gavin R. M.

1989

J. Chem. Educ., 46 (7),
413.

учебная
конфигурация

(see. XeF_2) III

HF, HCl, H₂O (v:) VI 1179 1969

Von Holle W.G.

Dissert. Abstr. Int B 1970, 31(1), 364

Far infrared spectra of matrix
isolated hydrogen fluoride, hydrogen
chloride, and water.

10



CA 1971, 74(22), 17798k ^{6m}

1969

H₂O

5 Д170. Неэмпирические расчеты участия *d*-орбитали в некоторых соединениях серы. Hillier I. H., Saunders V. R. Ab initio calculations of *d* orbital participation in some sulphur compounds. «Chem. Phys. Letters», 1969, 4, № 4, 163—164 (англ.)

Произведены расчеты основных электронных состояний молекул H₂S, CS и SO₂ с использованием гауссовой аппроксимации Слейтеровских атомных ф-ций. Для сравнения рассчитаны также соответствующие соединения кислорода. В H₂O и CO заселенность *d*-орбитали кислорода мала (не выше 2%), а для соединений S заселенность *d*-орбитали S заметно выше (16% в H₂S и в CS и 17% в SO₂). Т. К. Ребане

9.10.70

52

1969

H₂O

7 Б36. Неэмпирические расчеты участия d -орбиталей в некоторых соединениях серы. Hillier I. H., Saunders V. R. Ab initio calculations of d orbital participation in some sulphur compounds. «Chem. Phys. Letters», 1969, 4, № 4, 163—164 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ССП, в гауссовом базисе (по 3 гауссовых функции на каждую орбиталь слейтеровского типа), рассчитаны дипольные моменты (ДМ), потенциалы ионизации (ПИ) и полные энергии молекул H₂O и CO, H₂S и CS, а также SO₂. Орбитальные экспоненты для $3d$ -АО серы составляли от 1,2 до 1,7. Включение в расчет $3d$ -АО серы приводит к значитель-

расчет
дип. мом.,
γ,

полн. энергии
молекулы

(+4)

X. 1970. 7



ному улучшению совпадения расчетных и экспериментальных величин ДМ и ПИ в случае H_2S и CS , заселенность $3d$ -АО составляет около 0,16. Для SO_2 наблюдается ухудшение передачи ДМ, но улучшение ПИ, заселенность $3d$ -АО равна 1,17. Включение в расчет $3d$ -АО кислорода для H_2O и CO (орбитальные экспоненты 1,66 и 2,5 соотв.) приводит, наоборот, к ухудшению согласия с экспериментом.

Е. Л. Розенберг

H₂O

1969

Hunt W.J., Goddard W.A.

Chem. Phys. Lett., 3, 414

Excited states of H₂O using improved virtual orbitals.

H_2O
2

расчет возб.
уровней

ф. 1969. 78

7 Д120. Неэмпирический расчет некоторых низколежащих возбужденных состояний H_2O . Horsley J. A., Fink W. H. Ab initio calculation of some low-lying excited states of H_2O . «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 2, 750—758 (англ.)

Неэмпирическим методом самосогласованных МО ЛКАО для открытых оболочек рассчитаны потенц. поверхности B^1A_1 возбужденного состояния H_2O и соответствующего триплетного состояния. По-видимому именно B^1A_1 состояние H_2O при фотодиссоциации дает частицы OH ($A^2\Sigma^+$) с аномальным вращательным распределением. При расстояниях $O-H$, близких к 2,0 ат. ед., рассмотренные состояния H_2O являются в основном ридберговскими, в которых высшая занятая орбиталь является ридберговской $3s$ -орбиталью. При расстояниях $O-H$, больших 2,0 ат. ед. для симметричной диссоциации или 2,6 ат. ед. для антисимметричной диссоциации, преобладает разрыхляющая конфигурация, в которой

1969

высшая занятая орбиталь является разрыхляющей комбинацией $2s$ -орбитали О и $1s$ -орбитали Н. В обоих состояниях предпочтительной является линейная геометрия. Сечение потенц. поверхности для асимметричной диссоциации изогнутой (угол Н—О—Н 135°) молекулы в B^1A_1 -состоянии обладает и максимумом и минимумом. Максимум коррелирует с изменением обменного интеграла между однократно занятыми орбиталями, вызванным переходом ридберговской высшей занятой орбитали в разрыхляющую. Соответствующее сечение для линейной молекулы является диссоциативным, но обладает точкой перегиба. Кривые для триплетного состояния являются чисто диссоциативными. Кривая для симметричной диссоциации линейной молекулы как в триплетном, так и в синглетном состояниях обнаруживает минимум около 2,6 ат. ед.

В. Л. Лебедев

1969

 H_2O

ИК-спектр

7 Д326. Положение, интенсивности и ширина линий паров воды в области $475-692\text{ см}^{-1}$. Izatt Jerald R., Sakai Hajime, Benedict William S. Positions, intensities, and widths of water-vapor lines between 475 and 692 см^{-1} . «J. Opt. Soc. Amer.», 1969, 59, № 1, 19-27 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения паров воды в области $475-692\text{ см}^{-1}$ на спектрометре Эберта—Фасти с разрешением $0,12\text{ см}^{-1}$. Частоты обнаруженных 94 линий определены с точностью $\pm 0,01\text{ см}^{-1}$. Для 19 линий методами фурье-преобразования и интегр. поглощения (с учетом поправки на поглощение в крыльях линий) определены значения интенсивностей и полуширин линий. Эксперим. значения интенсивностей линий отличаются

ф. 1969. 78

CO, CH₃CN, N₂O (mass. spec.) 1969
Kochler U., XI 285

Beckman Rep., 1969, (1), 3-8

Far-infrared spectroscopy
with interferometers.

10

(93)

CA 65

1969

$(H_2O)_2$ (paper SHF, reom. ступень,
H₂O сур. ноег)

11

XI 287

Kollman P.A., Allen L.C.

J. Chem. Phys, 1969, 51, n8, 3286-3293/ave.

Theory of the hydrogen bond: electro-
 nic structure and properties of the
 water dimer.

Puxue, 1970, 10572

10, M (P)

H_2O .

1969

10 Б14. Деформация валентного угла и гибридизация в H_2O . Klessinger Martin. Bond angle deformation and hybridization in H_2O . «Chem. Phys. Letters», 1969, 4, № 3, 144—146 (англ.)

Кв. - мех.
расчет

Проведен полный расчет молекулы H_2O в рамках метода ССП в миним. базисе слейтеровских АО (разложенных по гауссовым функциям). Расчеты выполнены для фиксированного расстояния ОН (1,8103 ат. ед.) при варьировании валентного угла (θ) от 90 до 120°. Гибридные функции связей и неподеленных электронных пар ортогонализированы между собой и с внутренней (1s)-оболочкой атома кислорода. Оптим. значение параметра гибридизации λ (связанного с s-характером гибридных

не

X. 1970. 10

функций) и «гибридный» угол α определялись минимизацией полной электронной энергии для данного значения θ . Полученные результаты сравнены с результатами гораздо более трудоемкого ССП-расчета с учетом обширного конфигурац. взаимодействия. Обе потенциальные кривые почти параллельны и обнаруживают слабый минимум вблизи опытного значения $\theta = 105^\circ$, что подтверждает точность расчета. Оптим. гибридизации слабо зависят от θ (при $\theta = 90-120^\circ$ получено $\lambda = 0,66-0,83$ и $\alpha = 100,4-104,9^\circ$). Минимум полной энергии получается при $\theta = \alpha$, что автор считает общим условием, справедливым для всех молекул. Показано, что ортогонализация валентных гибридных функций кислорода ведет к более локализованным орбитам, однако не меняет направление гибридной функции. Поэтому при равновесном значении θ связи в H_2O являются «прямыми», в то время как при всех других значениях θ связи «изогнуты». Разумность такого определения подтверждена расчетами зарядовой плотности, максимум которой лежит на линии $\text{O}-\text{H}$ только при $\theta = 105^\circ$, в то время как при $\theta = 90$ и 120° этот максимум смещен в сторону от нее.

Е. М. Шусторович

1969

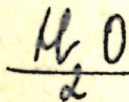
 H_2O (пар)

3 Д357. Интенсивности 31 линии водяного пара в области 1429—1617 cm^{-1} . Krakow Burton, Healy Anthony R. Strengths of 31 water-vapor lines between 1617 and 1429 cm^{-1} . «J. Opt. Soc. Amer.», 1969, 59, № 11, 1490—1491 (англ.)

Измерены интенсивности 31 линии в полосе ν_2 молекулы H_2O . При измерениях применен модифицированный метод кривой роста. В качестве приемника излучения применено охлажденное до т-ры жидкого гелия фотосопротивление Ge:Si (приемная площадка $0,1 \times 10$ мм). Приведены определенные из опыта и вычисленные на основе модели жесткого ротатора значения интенсивностей линий с их отношением к определенным колебательно-вращательным переходам. Дано сравнение полученных и известных из литературы теоретич. и эксперим. данных. Библ. 12. М. В. Тонков

интенс.
линий

ф. 1970. 38



распределен
орбитальной
связи

Krell J. et al.

1969

Chem. Phys. Letters,
4 (5), 261.

(see. CH₄) III

I969

H₂O

Kukolich S.G.

J.Chem.Phys., 50, 375I

Measurement of molecular g-factors in H₂O and D₂O and hyperfine structure in H₂O.

1969

 H_2O

H

e

структура

X. 1970. 7

7 Б211. Поливода. Колебательные спектры указывают на единственную устойчивую полимерную структуру. Lippincott Ellis R., Stromberg Robert R., Grant Warren H., Cessac Gerald L. Polywater. Vibrational spectra indicate unique stable polymeric structure. «Science», 1969, 164, № 3887, 1482—1487 (англ.)

Из обычной воды (I) при конденсации ее паров в течение ~18 час. в новых капиллярах (плавленый кварц, пирекс) с диаметром 5—20 м получена новая форма воды, наблюдавшаяся ранее Дерягиным и его сотрудниками, к-рые называли ее «аномальной водой» (II). Исследованы ИК-спектры поглощения II внутри кварцевых (область 5000—10 000 $см^{-1}$) и пирексовых (1000—4000 $см^{-1}$) капилляров, а также вне капилля-

ров в области $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$. В последнем случае использовалась специальная небольшая алмазная кювета с тонкими алмазными окошками. В области $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ исследован спектр КР II в капиллярах из плавленного кварца, возбуждавшийся линией 4880 Å аргонного лазера. В ИК-спектре поглощения II отсутствуют полосы поглощения в области $2500\text{--}4000\text{ см}^{-1}$, появляется сильная полоса при 1595 см^{-1} и интенсивный дублет в области 1400 см^{-1} . Спектр КР II также сильно отличается от спектров КР I или льда. Наиболее характерная особенность спектра состоит в появлении очень интенсивной полосы при 620 см^{-1} с плечом при $\sim 640\text{ см}^{-1}$. Кроме того, в спектре КР II наблюдались полосы при 3940 , 3420 , 2560 , 1865 и 1760 см^{-1} . Полоса 3420 см^{-1} относится, по-видимому, к следам I. Отсутствие существенных следов примесей в исследованных образцах II установлено методами спектроскопич. анализа. В согласии с лит. данными показатель преломления II равен $1,48$, а плотность II, определенная по уравнению Лорентца — Лоренца, составляет $1,39$. Предполагается, что образование II и ее спектральные свойства могут быть объяснены возникновением сильных симметрич. связей O—H—O , изоэлектронных с ионом FHF^- . Даны приближенные длины связей: $2,3\text{ Å}$ для O...O и $1,15\text{ Å}$ для H—O по сравнению с расстоянием O...O $2,8\text{ Å}$ для I. Предложено несколько согласующихся со спектроскопич. данными моделей структуры II, к-рая во всех случаях предполагается полимерной. Предложено называть II поливодой.

А. Александров

D_1 (H_2O , HD_2O , D_2O , CH_2O , CD_2O , $CHDO$) 1969
B (145 money). II 14

Lajko M.S., Beers V., $\overline{XI}$ 654

J. Res. Nat. Bur. Stand., 1969, A73, 42,
233-239 (austr.).

A table of rotational constants of
symmetric top molecules giving
rise to microwave spectra.

12.

Pre Pub., 1970, 10174.

cur. opus.

N

H₂O

1969

Defunct
loga

53785g Polywater. Lippincott, Ellis R.; Stromberg, Robert R.; Grant, Warren H.; Cessac, Gerald L. (Univ. of Maryland, College Park, Md.). *Science* 1969, 164(3887), 1482-7 (Eng). The results of an ir and Raman spectroscopic study of anomalous water both in and out of the capillaries in which it was formed are presented to show that the material is polywater, a true high polymer consisting of H₂O monomer units. The polywater was prep'd. by condensing water vapor in freshly drawn, fused quartz and Pyrex capillaries between 5-20 μ m. in diam. The capillaries were suspended over distd. water in an evacuated and sealed system and ~18 hrs. were allowed for the formation of polywater. The OH stretching bands prominent in normal water ir spectra were absent and new bands near 1600 and 1400 cm.⁻¹ appeared. This was interpreted by assuming that new and previously unreported strong symmetric OHO bonds were

C.A. 1969. H. 12

formed, isoelectronic with FHF^- . The approx. bond distances are 2.3 Å. for $\text{O}\cdots\text{O}$, and 1.15 Å. for HO as compared to a $\text{O}\cdots\text{O}$ distance near 2.8 Å. for normal H_2O . These bonds, which are so strong they can not be considered as normal $\text{O}\cdots\text{H H}$ bonds, are regarded as responsible for the remarkable properties of the material. The bond energy/OHO unit is 30-50 kcal./mole and an energy of 60-100 kcal./ H_2O structural unit. Several structures consistent with the spectral data and the properties and stabilities of the material are proposed.

CFJN

H_2O

СТТ. А-1400

1969

1 Д174. Таблица вращательных постоянных молекул типа симметричного волчка, имеющих микроволновые спектры. Lojko Matthew S., Beers Yardley. A table of rotational constants of symmetric top molecules giving rise to microwave spectra. «J. Res. Nat. Bur. Stand.», 1969, A73, № 2, 233—239 (англ.)

Составлена таблица вращательных постоянных B полярных линейных молекул и молекул типа симметричного волчка. В таблицу включены значения B 145 молекул от $Cs^{133}J^{127}$ ($B=708,3579$ Мгц) до $N^{14}H_3$ ($B=298\,000$ Мгц). Приведены также таблицы частот вращательных переходов молекул H_2O , HDO , D_2O , HDO^{18} , CH_2O , CH_2O^{18} , CD_2O , $CHDO$ и $CHDO^{18}$.
М. Р. Алиев

γ_i
вращ.
переходов

09.1970. 12

+150



$\text{CO}_2, \text{N}_2\text{O}, \text{HCN}, \text{OCS}, \text{H}_2\text{O}$ (см. ниже.) 1969

Machida K, Overend J. " 13 14
XI 328

J. Chem. Phys. 1969, 50(10), 4429-36

Anharmonic stretch-stretch interaction force constants of triatomic molecules.

10

10

CA 1969, 71 N 6 24803f

H_2O

кв.-мех.
расчет

3 Б25. Потенциальная поверхность и обобщенные силы осциллятора для ридберговского состояния $1A''$ молекулы H_2O . Miller K. J., Mielczarek S. R., Krauss M. Energy surface and generalized oscillator strength of the $1A''$ Rydberg state of H_2O . «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 1, 26—32 (англ.)

Методом Хартри-Фока с использованием аналитич. функций атомов рассчитана часть потенциальной поверхности молекулы воды в возбужденном состоянии $1A''$. Найдено, что в этом состоянии потенциальная энергия может быть записана с хорошим приближением в виде суперпозиции разделяющихся частей, одна из к-рых отвечает отталкиванию и зависит в основном от расстояния между атомом Н и центром тяжести фрагмента ОН. Другая часть отвечает притяжению между атомами О и Н во фрагменте ОН. Такой тип поверхности объясняет специфику фотодиссоциации H_2O , проявляющуюся в том, что почти вся энергия возбуждения выделяется в

1969

х. 1970. 3

виде относит. кинетич. энергии фрагментов. С найденными волновыми функциями рассчитаны обобщенные силы осцилляторов, к-рые использованы для определения сечений возбуждения состояния $1A''$ молекулы воды при столкновениях с быстрыми электронами. Характеристики возбуждения как функция переданного импульса воспроизводятся теорией, что указывает на хорошую аппроксимацию истинных функций функциями самосогласованного поля.

Е. Никитин

1969

H₂OH₂OH₂OH₂OH₂OH₂O

C.A.

1969. 71. 12

53679a Energy surface and generalized oscillator strength of the ¹A'' Rydberg state of water. Miller, Kenneth John; Mielczarek, S. R.; Krauss, Morris (Rensselaer Polytech. Inst., Troy, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(1), 26-32 (Eng). The energies and wavefunctions of the lowest singlet and triplet Rydberg states in H₂O were calcd. in the expansion basis self-consistent-field procedure for a single configuration. A portion of the energy surface of the ¹A'' Rydberg state for an HOH angle of 105° was detd. that shows the asymmetric surface of the ¹A'' Rydberg state for an HOH angle of 105° was detd. that shows the asymmetric dissocn. of this state into ground-state H(²S) and OH(²Π) fragments. The energy along the reaction coordinate is almost separable into a repulsion depending only on the center-of-mass sepn. and an attractive potential that depends only on the OH internuclear sepn. For the C_{2v} conforma-

tion a large basis set was used to approach the Hartree-Fock limit. By using these functions a min. was calcd. in the generalized oscillator strength for the $^1A_1 \rightarrow ^1B_1$ transition as a function of the momentum transfer function or the electron scattering angle. This behavior was then confirmed exptl. for an energy loss of 7.4 ev. with an incident electron energy of 500 ev. Such a min. is a general characteristic of Rydberg transitions and is not an essentially mol. phenomena. The good agreement between exptl. and theory indicates a reasonable fit to the Rydberg wavefunction by the approx. Hartree-Fock calcn.

RCIO



Опред.
силового
поля
молекулы

1969

1 Д165. К вопросу об определении силового поля молекулы по известным экспериментальным частотам. Расчет колебаний изотопозамещенных молекулы воды. Михайленко В. И. До питання про визначення силового поля молекули за відомими експериментальними частотами. Розрахунок коливань ізотопозаміщених молекули води. «Укр. фіз. ж.», 1969, 14, № 8, 1246—1250 (укр.; рез. англ.); «Укр. фіз. ж.», 1969, 14, № 8, 1247—1251 (русс.; рез. англ.)

Показано, что матрица силовых коэф. U может быть найдена из отношений частот колебаний двух изотопич. молекул. Получена система ур-ний, из которой матрица U определяется при помощи итерационного процесса. Результаты иллюстрированы на примере молекулы воды.
М. Р. Алнев

оп. 1970. 18

1969

H₂O

~~4166370~~ Determination of the molecular force field by known experimental frequencies. Calculation of vibrations of isotope-substituted water molecules. Mikhailenko, V. I. (Odess. Vyssh. Inzh. Morsk. Uchilishche, Odessa, USSR). *Ukr. Fiz. Zh. (Russ. Ed.)* 1969, 14(8), 1247-51 (Russ). The matrix of the force consts. can be detd. mathematically if the ratio of the frequencies of the normal vibrations is known for any 2 mols. of a given isotopic form (Panchenko and Kiptev, 1968). The effectiveness of the given method is illustrated by calcg. the normal vibrations for isotope-substituted H₂O. GLJR

Chem. note.

C.A. 1969. 71.24

1969

4 Д177. Приближенный расчет характеристических колебаний изотопозамещенных молекул. Михайленко В. И., Кучеренко Б. И. «Укр. физ. ж.», 1969, 14, № 11, 1923—1926

Показано, что для приближенного расчета характеристич. по форме колебаний можно воспользоваться простой ф-лой:

$$\nu_{2i} = \nu_{1i} \sqrt{\frac{t_{2i}^{-1}}{t_{1i}^{-1}}}$$

где t_{1i}^{-1} и t_{2i}^{-1} собств. значения матриц кинематич. коэф. T_1^{-1} и T_2^{-1} для двух каких-либо молекул данного изотопич. ряда, ν_{1i} — эксперим. значения частот норм. колебаний для одной из изотопозамещенных молекул.

+2.

09. 1970.

49



Предложенная ф-ла проверена на примере расчета частот норм. колебаний изотопозамещенных молекул H_2O , H_2S и H_2Se . Рассчитанные и эксперим. значения частот находятся в хорошем соответствии друг с другом.

$\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{C}_2\text{H}_2, (\text{cyanogen})$ 1969
 $\text{AsH}_3, \text{HF}, \text{BF}_3$ 11 13 14

Nielsen H.H.; Rao K.N. XI 382

U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech.

Inform. AD 1968, AD-683339, 104p.

High-resolution vibration-rotation spectra of polyatomic molecules.

10

⊙

12 CM, 1969, 71, N10, 4391/1

HOON

М.И.

6 Д477. Микроволновый спектр перекиси водорода. Oelfke William C., Gordy Walter. Millimeter-wave spectrum of hydrogen peroxide. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 12, 5336—5343 (англ.)

В области 60—300 кМгц исследованы вращательные спектры молекул HOON (I) и DOOD (II) в основном колебательном состоянии. Для предотвращения быстрого распада молекул на O_2 и H_2O металлич. поверхность полости резонатора Фабри—Перо покрывалась парафином. Отождествлено 50 вращательных переходов для I для PQ_1 , PR_1 , PR_0 , RP_0 и RP_1 -ветвей и 30 переходов для II для PQ_0 -ветвей. Дана интерпретация спектров в терминах модели полужесткого ротатора. Для вращательных постоянных установлены следующие значения (в Мгц): $\nu_{01,2}^{01,2} = 276208,0 \pm 2,0$; $\nu_{03,4}^{03,4} = 275912,7 \pm 2,0$; $\beta_{01,2}^{01,2} = 25662,1 \pm 2,0$; $\beta_{03,4}^{03,4} = 25673,7 \pm 2,0$. Найдены структурные параметры. Г. П.

09.1970. 68

(+1)

(X)

5961

H₂O

Oldman R. F.
Broida H. P.

1969

memor

J. Chem. Phys., 51(6),
2464.

(Corr. N) III



C_2H_4 , CH_4 , ZnH_2 , CH_3^+ , OH^- , NH_3 , C_2H_2 ,
 C_2HF , C_2HCl , C_2 , C_3 , C_4 , $BeHBe^+$, $BeHBe^-$,
 BeH^+ , BeF_3 , HF , FHF , H_2O , HeH^+ ,
 $F(H_2O)_n$ ($n=1,2,3$), $HeHHe^+$, F_2 , LiF , NaF , HCl , HCl .
(Diff, 9 1969
D, 11 10, 14
J, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173, 174, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205, 206, 207, 208, 209, 210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 259, 260, 261, 262, 263, 264, 265, 266, 267, 268, 269, 270, 271, 272, 273, 274, 275, 276, 277, 278, 279, 280, 281, 282, 283, 284, 285, 286, 287, 288, 289, 290, 291, 292, 293, 294, 295, 296, 297, 298, 299, 300, 301, 302, 303, 304, 305, 306, 307, 308, 309, 310, 311, 312, 313, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 320, 321, 322, 323, 324, 325, 326, 327, 328, 329, 330, 331, 332, 333, 334, 335, 336, 337, 338, 339, 340, 341, 342, 343, 344, 345, 346, 347, 348, 349, 350, 351, 352, 353, 354, 355, 356, 357, 358, 359, 360, 361, 362, 363, 364, 365, 366, 367, 368, 369, 370, 371, 372, 373, 374, 375, 376, 377, 378, 379, 380, 381, 382, 383, 384, 385, 386, 387, 388, 389, 390, 391, 392, 393, 394, 395, 396, 397, 398, 399, 400, 401, 402, 403, 404, 405, 406, 407, 408, 409, 410, 411, 412, 413, 414, 415, 416, 417, 418, 419, 420, 421, 422, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 430, 431, 432, 433, 434, 435, 436, 437, 438, 439, 440, 441, 442, 443, 444, 445, 446, 447, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 455, 456, 457, 458, 459, 460, 461, 462, 463, 464, 465, 466, 467, 468, 469, 470, 471, 472, 473, 474, 475, 476, 477, 478, 479, 480, 481, 482, 483, 484, 485, 486, 487, 488, 489, 490, 491, 492, 493, 494, 495, 496, 497, 498, 499, 500, 501, 502, 503, 504, 505, 506, 507, 508, 509, 510, 511, 512, 513, 514, 515, 516, 517, 518, 519, 520, 521, 522, 523, 524, 525, 526, 527, 528, 529, 530, 531, 532, 533, 534, 535, 536, 537, 538, 539, 540, 541, 542, 543, 544, 545, 546, 547, 548, 549, 550, 551, 552, 553, 554, 555, 556, 557, 558, 559, 560, 561, 562, 563, 564, 565, 566, 567, 568, 569, 570, 571, 572, 573, 574, 575, 576, 577, 578, 579, 580, 581, 582, 583, 584, 585, 586, 587, 588, 589, 590, 591, 592, 593, 594, 595, 596, 597, 598, 599, 600, 601, 602, 603, 604, 605, 606, 607, 608, 609, 610, 611, 612, 613, 614, 615, 616, 617, 618, 619, 620, 621, 622, 623, 624, 625, 626, 627, 628, 629, 630, 631, 632, 633, 634, 635, 636, 637, 638, 639, 640, 641, 642, 643, 644, 645, 646, 647, 648, 649, 650, 651, 652, 653, 654, 655, 656, 657, 658, 659, 660, 661, 662, 663, 664, 665, 666, 667, 668, 669, 670, 671, 672, 673, 674, 675, 676, 677, 678, 679, 680, 681, 682, 683, 684, 685, 686, 687, 688, 689, 690, 691, 692, 693, 694, 695, 696, 697, 698, 699, 700, 701, 702, 703, 704, 705, 706, 707, 708, 709, 710, 711, 712, 713, 714, 715, 716, 717, 718, 719, 720, 721, 722, 723, 724, 725, 726, 727, 728, 729, 730, 731, 732, 733, 734, 735, 736, 737, 738, 739, 740, 741, 742, 743, 744, 745, 746, 747, 748, 749, 750, 751, 752, 753, 754, 755, 756, 757, 758, 759, 760, 761, 762, 763, 764, 765, 766, 767, 768, 769, 770, 771, 772, 773, 774, 775, 776, 777, 778, 779, 780, 781, 782, 783, 784, 785, 786, 787, 788, 789, 790, 791, 792, 793, 794, 795, 796, 797, 798, 799, 800, 801, 802, 803, 804, 805, 806, 807, 808, 809, 810, 811, 812, 813, 814, 815, 816, 817, 818, 819, 820, 821, 822, 823, 824, 825, 826, 827, 828, 829, 830, 831, 832, 833, 834, 835, 836, 837, 838, 839, 840, 841, 842, 843, 844, 845, 846, 847, 848, 849, 850, 851, 852, 853, 854, 855, 856, 857, 858, 859, 860, 861, 862, 863, 864, 865, 866, 867, 868, 869, 870, 871, 872, 873, 874, 875, 876, 877, 878, 879, 880, 881, 882, 883, 884, 885, 886, 887, 888, 889, 890, 891, 892, 893, 894, 895, 896, 897, 898, 899, 900, 901, 902, 903, 904, 905, 906, 907, 908, 909, 910, 911, 912, 913, 914, 915, 916, 917, 918, 919, 920, 921, 922, 923, 924, 925, 926, 927, 928, 929, 930, 931, 932, 933, 934, 935, 936, 937, 938, 939, 940, 941, 942, 943, 944, 945, 946, 947, 948, 949, 950, 951, 952, 953, 954, 955, 956, 957, 958, 959, 960, 961, 962, 963, 964, 965, 966, 967, 968, 969, 970, 971, 972, 973, 974, 975, 976, 977, 978, 979, 980, 981, 982, 983, 984, 985, 986, 987, 988, 989, 990, 991, 992, 993, 994, 995, 996, 997, 998, 999, 1000)

Preuss H.; Janoschek R. IX 813

J. Mol. Struct. 1969, 3(4-5), 423-8

Wave-mechanical calculations on the
 molecules taking all electrons into
 account.

ЕСТЬ Ф. Н.

M. 10

20+20
 (Ф)

CA. 1969. 71. N12. 537668

H₂O

ВР - XI - 416

1969

4 Д169. Свойства решений задачи на собственные значения степени $n=2$, полученных с помощью некоторых новых методов вычисления силовых постоянных. Pfeiffer M. Solution properties of some new methods for the calculation of force constants for eigenvalue problems of degree $n=2$. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 31, № 2, 181—195 (англ.)

Предложен параметрич. метод определения матрицы силовых постоянных по ф-ле: $F = (L_0^{-1})' U \Lambda U' L_0^{-1}$; матрица L_0 однозначно определяется матрицей кинематич. коэф. G , Λ — диагональная матрица квадратов частот колебаний, а $U = \begin{pmatrix} \cos \kappa & -\sin \kappa \\ \sin \kappa & \cos \kappa \end{pmatrix}$. Получены ф-лы, выра-

см. нел.

ф. 1970.

42

+15



жающие f_1, f_2, f_{12} через λ_1, λ_2 , элементы G и искомый параметр κ . Для его определения могут применяться различные условия: потенц. энергия должна зависеть только от f_1 или f_1 и f_2 должны принимать, соответственно, максим. и миним. значения. Параметр может быть найден также на каждой ступени итерационного процесса Бечера и Меттса (РЖФиз, 1967, 12Д149) и при использовании метода, в котором матрицы форм колебаний определяются по матрице G . Составлена таблица значений f_{12} , вычисленных при помощи всех рассмотренных методов для 15 молекул. Эти значения сопоставлены со спектроскопич. значениями f_{12} , причем наилучшее согласие получено по методу Бечера и Меттса. Построены кривые зависимости f_1, f_2 от f_{12} , полученные на основании различных методов и определяющие границы возможных значений силовых постоянных для различных молекул.

М. А. Ковнер

5 10 11
LH, Vit, H₂O (сум. вес) 1969
6 11 V 6549

Россихин В. В., Лозовов В. В.

Матр. и метр. хим. анализ, 1969, 5, 11,
32-37

В. В. Лозововский, В. В. Лозовский
и др. Материалы к изучению
геологии Тибетского - Гималайского

Риски, 1968, 13660 10 5

1969

H_2O

сил. пост.

6 Б58. О вычислении силовых постоянных молекулы воды на основе простого метода МО. Россихин В. В., Морозов В. П., Беззуб Л. И. «Теор. и эксперим. химия», 1969, 5, № 5, 679—683

Описан способ вычисления гармонич. и ангармонич. силовых постоянных многоатомных молекул простым методом МО. Выполнен численный расчет квадратич., кубич. и квартич. валентных силовых постоянных воды. Вычисленные значения силовых постоянных согласуются с их значениями, полученными из частот колебательных переходов.

М. Р. Алиев

Х. 1970. 6

H₂O

Сул. уст.
кб. мек.
паарем

(35966h) Calculation of force constants of the water molecule based on a simple MO [molecular orbital] method. Rossikhin, V. V.; Morozov, V. P.; Bezzub, L. L. (USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1969, 5(5), 679-83 (Russ). The possibility of applying a simple MO method to the evaluation of harmonic and nonharmonic force consts. was studied on the example of H₂O mols., for which these values are known from exptl. data on the frequencies of vibrational transitions. In the calcn. of the force consts. the problem arises of finding the corresponding derivs. of the orbital coeff. One of the advantages of the simple MO method is that in the calcns. the equations for finding the matrixes of the derivs. of the orbital coeffs. can be easily solved. The force consts. of the H₂O mol. were calcd. by the equations derived here to the 4th order. The wave functions, the energy levels, and the force consts. are tabulated. The relative values of the force consts. coincide satisfactorily. The simple MO method makes it possible to reduce the no. of unknown force consts. in the detn. of a nonharmonic potential function based on the data for the vibrational-rotational spectra. L. Holl

1969

C. A. 1970. 72. 8

1969

H₂O

5 Б81. Применение теоремы вириала к расчету ангармонических силовых постоянных молекулы воды. Россихин В. В., Морозов В. П., Сторчай Н. Т. «Теор. и эксперим. химия», 1969, 5, № 5, 585—591

На основе теоремы вириала найдены соотношения между ангармонич. силовыми постоянными, к-рые позволяют уменьшить число неизвестных в ур-ниях, полученных при применении общей квантовомех. теории колебаний и вращений молекул. Полный набор ангармонич. силовых постоянных молекул H₂O использован для вычисления всех ангармонич. констант X_{ss}^* молекулы D₂O.

Резюме

Сил. пост.

X. 1970.5

1989

H₂O

59292m Use of the virial theorem for calculating anharmonic force constants of the water molecule. Rossikhin, V. V.; Morozov, V. P.; Storchai, N. T. (Dnepropetrovsk. Khim.-Tekhnol. Inst., Dnepropetrovsk, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1969, 5(5), 585-91 (Russ). A method for calcg. anharmonic force consts. by using the quantum mechanical virial theorem is given. The technique is used to calc. the force consts. of water; a complete set of anharmonic force consts. of H₂O are used to calc. all the anharmonic force consts. of D₂O.

Ved Prakash Gupta

ноет.
атрап.и.

C.A. 1970 42.12

1969

H_2O

23 Б261. Об отнесении инфракрасной полосы поглощения воды при 2130 см^{-1} . Сидорова А. И., Жуковский А. П. «Оптика и спектроскопия», 1969, 26, № 6, 1055—1067

спектр

Предложена новая интерпретация ИК-полосы поглощения жидк. воды при 2130 см^{-1} , к-рая приписана комбинации деф. кол. молекулы воды ν_2 при 1650 см^{-1} с НЧ-компонентами либрац. полосы, к-рые следует отнести к межмолек. колебаниям молекул воды с нарушенными Н-связями. Отсутствие комбинации колебания ν_2 с основной компонентой либрац. полосы объясняется наличием квантовомеханич. запрета по симметрии. Предлагаемая интерпретация согласуется с результатами исследований составной полосы молекул HDO. Автореферат

X. 1969. 23

H₂O

1969

11Д324. Об отнесении инфракрасной полосы поглощения воды при 2130 см^{-1} . Сидорова А. И., Жуковский А. П. «Оптика и спектроскопия», 1969, 26, № 6, 1055—1057

Предложена новая интерпретация инфракрасной полосы поглощения жидкой воды при 2130 см^{-1} , которая приписана комбинации деформационного колебания молекулы воды ν_2 при 1650 см^{-1} с НЧ-компонентами либрационной полосы, которые следует отнести к межмолекулярным колебаниям молекул воды с нарушенными водородными связями. Отсутствие комбинации колебания ν_2 с основной компонентой либрационной полосы объясняется наличием квантовомеханич. запрета по симметрии. Предлагаемая интерпретация согласуется с результатами исследований составной полосы молекул HDO.

Автомеханат

Ф. 1969. 11Д

H₂O

Snyder L.C.,
Basch H.

1969

формотне
р-сис
кв-сис
расетм

J. Amer. Chem. Soc.,
1969, 91, ~ 9, 2189.

● (C₆H₅)₃III

1969

H₂O

Thomas J. L.

Chem. Phys. Letters,
1969, 3, 19, 405

протонная
структура

(C₆H₆)III

H₂O

Valdemoro C.
at all

1969

"
pacem

Am. fis. Real. soc. esp.
fis y quim. 1969, 65,
N 1-2, 181-7.



1969

H₂O

/ 24 Б34. Расчет валентных углов H₂O и NH₃ при помощи принципа максимального перекрывания. Val-ko L., Pelikán P. The calculation of valence angles for H₂O and NH₃ using the maximum overlap principle. «Theoret. chim. acta», 1969, 14, № 1, 55—64 (англ.; рез. нем., франц.)

расчет
валентных
углов

Предложен модифицированный вариант метода максим. перекрывания Маррела, позволяющий вычислить величины валентных углов молекул типа MX_k путем максимизации полной прочности связей. Метод применен к вычислению валентных углов молекул H₂O и NH₃. Полученные значения $\theta = 107^{\circ}10'$ (H₂O) и $109^{\circ}35'$ (NH₃) несколько выше эксперим. значений $\theta = 104^{\circ}45'$ и $106^{\circ}47'$ соотв. Отмечена высокая чувствительность величины θ к выбору атомн. орбиталей.

М. Р. Алиев

+1

X. 1969. 24

X

received

1969

Мемор
нб. - нб.
расчета
аппарата
мост

33554c Calculation of valence angles for water and ammonia using the maximum-overlap principle. Valko, Ladislav; Pelikan, P. (Slovak Tech. Univ., Bratislava, Czech.). *Theor. Chim. Acta* 1969, 14(1), 55-64 (Eng). A new approx. method for the detn. of the valence bond angles for MX_k -type mols., based on the max. overlap principle, is proposed. The valence bond angles are detd. from the conditions of max. of the "total bonds strength." The method has been used to calc. the valence angles and the hybrid orbitals for the water, and the NH_3 mol., resp. The calcd. valence bond angles for both mols. are about 2° too high with respect to exptl. equil. values. Also the best hybrid orbitals using the Golebiewski simplified method were calcd.

RCTC

C.A. 1969. 71. 8

1969

 H_2O (ж)

УФ-спектр

20 Б128. Изучение жидких H_2O и D_2O методом ультрафиолетовой спектроскопии в вакуумной области. Ver-
gall R. E., Senior W. A. Vacuum-ultraviolet study of
liquid H_2O and D_2O . «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 6,
2746—2750 (англ.)

Измерены УФ-спектры в области 130—175 мк жид-
ких H_2O и D_2O при т-рах —5, 25 и 61°. Полученные
спектры сопоставлены с аналогичными спектрами газо-
образной воды. Обнаружен сдвиг максимума поглоще-
ния на 7000 см^{-1} при переходе из газовой в жидкую
фазу. Этот сдвиг объясняется авторами изменением
энергетич. уровней как основного, так и возбужденного
состояний при фазовом переходе и образовании Н-свя-
зей. Т-рная зависимость частоты максимума полосы
поглощения D_2O подтверждает вывод о причинах
сдвига.

И. В. Кумпаненко

X. 1969. 20

+1



1969
H₂S } (21) 12 XI 547
H₂O }

Waggener W.C., Weinberger A.J.,
Stoughton R.W.

J. Phys. Chem, 1969, 73, n 10, 3518-3520
(corr.)

The near-infrared spectrum of
liquid hydrogen sulfide.

Preface, 1970, 65231

10

52mg

420, } (J, n. n, 8) 11 1969

820 } H_2, HD XI 559

400

Kp ($H_2O(2)$, $D_2O(2)$, $HD0(2)$)

3

Wolfsberg M.

J. Chem. Phys., 1969, 50, n3, 1484-1486 (am)

Correction to the effect of center-
monicity on isotopic exchange
equilibria - application to polyatomic
molecules.

Phys. 1969, 98126

10, 34

1969

 H_2O

15 Б261. Непрерывная модель воды — ошибочная интерпретация. Walrafen G. E., Continuum model of water—an erroneous interpretation. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 1, 567—569 (англ.)

Рассмотрение накопленных к настоящему времени данных о спектрах КР H_2O , D_2O и HDO не согласуется, по мнению автора, с существующей непрерывной (континуумной) моделью жидк. воды. Б. В. Рассадни

N. 1969. 15