

1975

OH₂

[Omin 3789]

1975

Accioley C.S.R., et al

J. Phys. B: Atom and
Mol. Phys., 1975, 8,
N18, 2987-94.

(кб. лек.
постел,
м. снйолл)

(all BH) III

H₂O

1975

опека
и управление
С.П. Мухомов

12345b Width and shape of the spectral line $\lambda_0 = 0.92$ mm of pure water vapor. Aganbekyan, K. A.; Zrazhevskii, A. Yu.; Sokolov, A. V.; Stroganov, L. I. (USSR). *Radiotekh. Elektron.* 1975, 20(6), 1155-63 (Russ). The width, and shape of the spectral line $\lambda_0 = 0.92$ mm ($\lambda = 0.92$ mm) in pure H₂O vapor were studied as function of pressure. The estd. line half-width = 0.6 ± 0.05 cm⁻¹, and the oscillator strength 0.107 ± 0.015 were ~ 20% higher than the calcd. values. The line contour corresponds to the line shape obtained from the kinetic equation, but the high wavelength branches absorb more than might be expected from the theor. considerations. A block diagram, and a detailed description of the instrumental equipment developed for the cont. is given.

H. Parizkova

0. A. 1975 83 N14

50407.7206
Ch, Ph, TC

40892

1975

3146

H₂O

K p. N 50407.7205

Ahlrichs R., Driessler F., Lischka H.,
Stäemmler V., Kutzelnigg W.

PNO-CI (pair natural orbital configuration
interaction) and CEPA-PNO (coupled electron pair approximation
with pair natural orbitals) calculations
of molecular systems. II. The molecules
BeH₂, BH, BH₃, CH₄, CH₃⁻, NH₃ (planar
(planar and pyramidal), H₂O, OH₃⁺, HF
and the Ne atom.

see BeH₂ (III)

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 4, 1235-1247.

51212.8823
Ch, Ph, TC, NGU

H₂O

96201

1975

* 4-10584

AltiG. de, Decleva P.

Binding energies as computed^d by a one
center expansion method.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 36, N 3, 361-364

(АНГЛ.)

(см. HF; III)

0509 гиз

487 489

501

ВИНИТИ

H₂O

X4-10324

1975

5 Б40. Расчеты методами ССП и ограниченного конфигурационного взаимодействия в целях отнесения спектра Оже и сателлитов в спектре мягкого рентгеновского излучения H₂O. Agren H., Svensson S., Wahlgren U. I. SCF and limited CI calculations for assignment of the Auger spectrum and of the satellites in the soft X-ray spectrum of H₂O. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 35, № 3, 336—344 (англ.)

кв. мет.
расчет

В целях идентификации переходов, приводящих к спектрам Оже и к сателлитам в спектрах мягкого рентгеновского излучения молекул воды, проведены неэмпирич. расчеты в рамках методов ССП и ограниченного конфигац. взаимодействия. Исходный базис состоял из 24 сгруппированных гауссовых функций s- и p-типа;

Х 1976 N5

добавление к базисному набору поляризац. функций p - и d -типа меняет результаты расчетов незначительно. В рамках метода конфигурац. взаимодействия учтены все конфигурации, получающиеся из МО, заполненных в основном состоянии нейтр. молекулы. Проведен расчет положений линий и их интенсивностей, на основании чего получено детальное отнесение линий в эксперим. спектре. Оже за исключением двух наиболее интенсивных линий, для к-рых отнесение неоднозначно. Обнаружено, что учет конфигурац. взаимодействия особенно важен для состояний, имеющих две открытые оболочки — одной и той же симметрии.

В. И. Жилинский

H₂O

1975

16 Б23. Неэмпирические расчеты воды, метана, ацетилена, этилена, этана и диборана с использованием сферических гауссовых орбиталей. Archibald R. M., Armstrong D. R., Perkins P. G. Ab initio calculations using spherical gaussian orbitals on water, methane, acetylene, ethylene, ethane and diborane. «Rev. roum. chim.», 1975, 20, № 11—12, 1371—1411 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП в базисе сферич. «фиксированных» и «плавающих» гауссовых орбиталей проведены расчеты молекул H₂O, CH₄, C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆, B₂H₆. Вычислены полные и орбитальные энергии, дипольные и мультипольные моменты, атомные заселенности, потенциалы и электрич. поля на ядрах, константы квадратурных расщеплений, градиенты электрич. полей.

Ю. А. Борисов

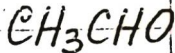
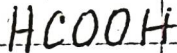
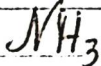
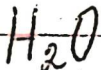
(+5) ☒

х. 1976. № 16.



*4-8295

1975

(H, H₂O, H₂CO)

X. 1975 N 15

15 Б38. Полуэмпирические натуральные орбитали. Анализ распределений зарядов, дипольных моментов и барьеров вращения малых молекул с использованием натуральных орбиталей ППДП/2 и ЧПДП. Alston Peter V., Shillady Donald D., Trindle Carl. Semiempirical natural orbitals. CNDO/2—NO and INDO—NO analysis of charge densities, dipole moments and rotational barriers in small molecules. «J. Amer. Chem. Soc.», 1975, 97, № 3, 469—476 (англ.)

Методом ССП. МО ЛКАО в валентных приближениях ППДП/2 и ЧПДП (в ряде случаев также и ППДП/С) с учетом configuraц. взаимодействия в формализме метода валентных схем, примененного к ортонормированному базису, по алгоритму Ривса (см. Ass. Comput. Mach, 1966, 9, 276) рассчитан ряд небольших молекул: воды, аммиака, этилена, формальдегида, муравьиной к-ты, ацетальдегида, боразана, пропена, фторпропена. Расчеты КВ выполнены по схеме итераций по натуральным орбиталиям. Результаты расчетов распределений

+5



зарядов, дипольных моментов и барьеров вращения сопоставлены с результатами расчетов ССП в той же параметризации и с экспериментом. Барьеры вращения лучше всего воспроизводятся в схеме ППДП/2-КВ, хуже всего в схеме ППДП/С, которая для расчета барьеров вращения признана неудовлетворительной.

А. Багатурьянц



50722.6634

Ch, Ph, TC

96200

H_2O

(7)(M)

X4-9495

Baerends E. J., Ros P. Self-consistent
molecular Hartree-Fock-Slater calcula-
tions. III. The influence of non-spheric-
al contributions to the electron density
and potentials. "Chem. Phys.", 1975, 8,
N 3, 412-418 (англ.)

0415 пик

383 386 0 0 7

БИННТИ

OH_2

Bader R. F. W.

1975

"J. Amer Chem Soc"

1975, 97, N26, 7391-99

(auss)

(on LiH; 14)



Кв. мех.
рацем

H_2O

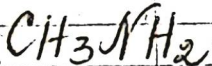
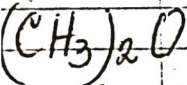
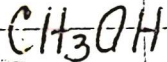
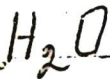
1975

Banna M.S.

фотом.
спектр

" J. Chem Phys " 1975, 63,
N 11, 4759-4766 (англ.)

(см СН₄; III)



(reb. acc. present)

BP-XI-4426

1975

65820a Geometric optimization of small molecules in the all valence electron-MO formalism using the SIMPLEX and gradient methods. Becker, S.; Kohler, H. J.; Weiss, C. (Arbeitsgruppe Quantenchem., Karl-Marx-Univ., Leipzig, E. Ger.). Collect. Czech. Chem. Commun. 1975, 40(3), 794-8 (Ger). The accuracies of various MINDO/2 parametrizations are compared with that of INDO approxn. in its original parametrization. The equil. geometries of the H_2O , $MeOH$, Me_2O , NH_3 , and $MeNH_2$ mols. were optimized with respect to their total energies. The INDO method generally yields good min. geometries. The heats of formation calcd. by the MINDO/2 method are too large. The MINDO/2-X parameter set (N. Bodor, et al., 1970) is not suitable for a complete optimization of the geometries of mols. with heteroatoms. E. Erdos

(+4)



C.A. 1975, 83, N8

В-4-Х1-4426

1975

 H_2O NH_3 наиск.
равнов.
геометр.

X (+1)

X 1975 № 16

16 Б31. Оптимизация геометрии малых молекул с помощью симплексного и градиентного методов в условиях метода МО в валентных приближениях. Вескер S., Kohler H.-J., Weiss C. Geometrieoptimierung kleiner Moleküle im Allvalenzelektronen-MO-Formalismus mit Hilfe der Simplex- und Gradientenmethode. «Collect. Czech. Chem. Commun», 1975, 40, № 3, 794—798 (нем.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентных приближениях ЧПДП и МЧПДП/2 с различными наборами параметров рассчитана равновесная геометрия H_2O , NH_3 , метилового спирта, диметилового эфира, метиламина. Для 3 последних рассмотрены различные конформации. Для оптимизации геометрии использованы симплекс- и градиентный методы, приведшие к совпадающим результатам. Полученные результаты подробно обсуждены и сопоставлены с эксперим. данными. Выбран оптим. набор параметров (из опубликованных в лит-ре) для схемы МЧПДП/2. Отмечено, что схема ЧПДП приводит к завышенным в несколько раз теплотам образования.

В. Л. Лебедев

ВР-ХТ-4426

1975

H₂O

9 Д151. Оптимизация геометрии малых молекул в методе молекулярных орбиталей с учетом всех валентных электронов с помощью симплексного и градиентного методов. Becker S., Kohler H.-J., Weiss C. Geometrieoptimierung kleiner Moleküle im Allvalenzelektronen-MO-Formalismus mit Hilfe der Simplex- und Gradientenmethode. «Collect. Czech. Chem. Commun», 1975, 0, № 3, 794—798 (нем.)

Оптимизация геометрии

Проведено сравнение оптимальной геометрии H₂O, CH₃OH, (CH₃)₂O, NH₃ и CH₃NH₂, в методах МЧПДП/2 с различной параметризацией и методе ЧПДП и показано, что только последний метод дает разумные значения углов при гетероатоме и теплот образования молекул. Библ. 21.

ф. 1975 № 9

⊠
+4

50401.3825
Ex-AR/PTP-z,
A, TC, E, Ph, Gph

38097GR

H₂O

1975

3095

Beckman J.E., Harries J.E.

Submillimeter-wave atmospheric and astro-
physical spectroscopy.

"Appl. Opt.", 1975, 14, N 2, 470-485

(англ.)

0328 пик

303 311 3 2 0

ВИНИТИ

1975

 H_2O

87506c Use of the Monte-Carlo method for determining the anharmonic potential function of a water molecule. Bezverkhnyaya, G. I.; Storchai, N. T.; Morozov, V. P. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1975, 38(5), 1044-5 (Russ). The Monte-Carlo method proved efficient for detg. anharmonic force consts. from a system of nonlinear equations in the anharmonic oscillator approxn. Numerical values were given of cubic and quartic force consts. of H_2O mol. as well as the anharmonicity consts. of H_2O , D_2O , and HDO mols. Theor. values of the anharmonicity consts. showed a reasonable agreement with the available exptl. data.

I. Krivy

C. A. 1975.83 v10

C. A. 1975.83 v10

H_2O

1975

9 Д180. Применение метода Монте-Карло к определению ангармонической потенциальной функции молекулы воды. Безверхняя Г. И., Сторчай Н. Т.,

Морозов В. П. «Оптика и спектроскопия», 1975, 38, № 5, 1044—1045

Продолжение работы (РЖФиз, 1973, 8Д189); в отличие от цит. работы рассматривается нелинейная система ур-ний, определяющих ангармонич. силовые постоянные через эксперим. значения постоянных ангармоничности молекул H_2O , D_2O и HDO .

(ангармонич.
потенц.
ф-ция)

(+2)



Ф. 1975 № 9

ВР-Х1-4559

1975

H₂O

11 Д114. Применение техники одночастичных функций Грина для расчета вертикальных потенциалов ионизации молекул с замкнутыми оболочками, описываемых полуэмпирическим ППДП/2 гамильтонианом. Biskupič Stanislav, Valko Ladislav, Kvasnička Vladimír. Application of one-particle Green functions technique for calculation of vertical ionization potentials of closed-shell molecules described by CNDO/2 semiempirical hamiltonian. «Theor. chim. acta», 1975, 38, № 2, 149—157 (англ.)

На основе метода одночастичных ф-ций Грина в приближении ППДП/2 рассчитаны нижние вертикальные потенциалы ионизации молекул H₂O, H₂CO, N₂, HF, CO, F₂. В выражении для массового оператора, использованном в вычислениях, учтены вклады ведущих диаграмм высших порядков, определяемые кулоновскими 2-частичными интегралами. Найденные значения вертикальных потенциалов ионизации хорошо согласуются с данными эксперимента. Библ. 33.

С. В. Христенко

X

75

Ф. 1975
N 11

1975

 H_2O

(γ)

14 Б27. Энергии ионизации внутренних электронов малых молекул. Buckingham A. D., Handy N. C., Whitehead R. J. Inner-electron ionisation energies of small molecules. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 2, 71, № 1, 95—101 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО рассчитаны энергии ионизации внутренних $1s$ -электронов и хим. сдвиги этих энергий для след. молекул: H_2O , CO , O_2 , CH_3OH , H_2CO , SiO , CH_4 и H_2S . Энергии ионизации получены при равновесной молек. геометрии как разности энергий молекул в основном состоянии и соотв-щих ионов (метод Δ ССП), а также по теореме Купменса. Использован миним. базис слейтеровских функций, каждая из к-рых приближалась пятью гауссовыми функциями. Рассмотрена энергия релаксации внешних электронов при ионизации и зависимость величины энергии релаксации от атомного окружения в молекулах. Показано, что значения хим. сдвигов, рассчитанные методом Δ ССП, лучше согласуются с экспериментом по сравнению с полученными по теореме Купменса.

А. Дементьев

X. 1975. N 14

44



H₂O

1975

11 Б84. Практические сведения о молекулярных группах симметрии. Bunker P. R. Practically everything you ought to know about the molecular symmetry group. «Vibr. Spectra and Struct. Vol. 3». New York, 1975, 1—129 (англ.)

Статья обзорно-справочного характера. Обсуждено использование симметрии для классификации колебательно-вращательных уровней молекул. Подробно обсуждено применение молек. групп симметрии для исследования жестких (H_2O , CH_3F , CO_2) и нежестких (NH_3 , CH_3OH , $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, CH_3CCCH_3 , B_2F_4 , CH_3NO_2 , CH_3SiH_3 , H_2O_2 , Y_4XXY_4 , ферроцен) молекул. Библ. 79. М. Гофман

x 1976 N 11

1975

H₂O

U.K.

спектр
нормы

59334w Continuum absorption by water between 330 and 825/cm. Burch, Darrell E.; Gryvnak, David A.; Gates, Francis J. (Aeroneutron. Div., Philco-Ford Corp., Newport Beach, Calif.). U. S. N. T. I. S., AD/A Rep. 1974, No. 003623/6GA, 13 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Govt. Rep. Announce. (U. S.)* 1975, 75(6), 62. The continuum absorption by H₂O in several narrow spectral intervals between 330 and 825 cm⁻¹ was studied exptl. Emphasis is placed on intervals where most of the absorption results from lines centered more than 1 cm⁻¹ and pressures of pure H₂O + N₂ mixis. at room temp. Results are compared with theor. results and with those reported previously in the same spectral intervals for samples at higher temps.

C.A. 1975. 83 N 6

* 13-10557

1975

 H_2O O_2

6 E5. Экстраполяция энергии в расчетах КВ. Bu-
enker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D.
Energy extrapolation in CI calculations. «Theor. chim.
acta», 1975, 39, № 3, 217—228 (англ.)

Рассмотрено применение метода экстраполяции энер-
гии (Theoret. chim Acta, 1974, 35, 33) в расчетах, про-
водимых в приближении configuraц. взаимодействия
(КВ). В кач-ве примеров проанализированы расчеты
состояний 1A_1 , 1B_2 , 3B_2 молекулы воды и $^5\Pi_u$, $^3\Pi_u$, $^1\Pi_u$
состояний молекулы кислорода при различных поро-
говых значениях T , по к-рым проводится отбор конфи-
гураций во втором порядке теории возмущений. Расчет
молекулы H_2O показал, что энергии состояний, экстра-
полированные на нулевое значение порога T (что экви-
валентно включению всех возможных одно- и дважды-
возбужденных configuraций по отношению к заданным
основным configuraциям) совпадают с точностью
 10^{-4} ат. ед. с результатами прямого расчета с исполь-

Е.И. М.П.
1 расчет

☒ (+1)

X 1976 №6

зованием полного векового ур-ния. В случае расчетов потенциальных кривых состояний $^{5,3,1}\Pi_u$ молекулы O_2 применение метода экстраполяции коренным образом меняет взаимное положение этих кривых, показывая важность учета всех конфигураций. На основе опыта проведенных расчетов получены критерии, по к-рым можно судить о точности экстраполированного значения энергии молекулы. Отмечено, что наибольшие погрешности в данном методе могут возникать при появлении нескольких конфигураций, дающих примерно один и тот же вклад в энергию молекулы, напр., в случае состояния $^1\Pi_u$ молекулы O_2 при значении межъядерного расстояния 10 ат. ед. Обсуждено также применение метода в расчетах, использующих для построения конфигураций натуральные орбитали. А. Дементьев

H₂O

1975

Butcher R.J.

enxmpm
nomicus

"Proc Roy Soc London"
1975 A 344 N 1639,
541-561 (anw)

(an. OCS; III)

60102.3153

Ф, Х, ТС

01921 H₂O

1975

влияние эффекта
на жескость на вращ. 3575

линии

Учет эффектов внутримолекулярных взаимо-
действий в ударной теории уширения изоли-
рованной спектральной линии давлением.

Быков А.Д., Макушкин Ю.С., Черкасов М.Р.

"Оптика и спектроскопия", 1975, 39, № 5,
880-885

П522

482 484

514

реф.

ВИНИТИ

OH_2 (до 2, 4 см. поем. кв. мек. 1975
яврем)

Canuto S.R. Tjarna J. D. M.
J. Phys B. 1975, 8 (18)
2987-94.

C.A. 1976. 84 N/2

80007e (кв. см)

60129.7327
Ph, Ch, TC

40604
УДК (Кб. мех. физ.)

1975
8742

К р. N 60129.7289

Carney G.D., Kern C.W. (сир. SO_2 ; III)

Vibration-rotation analysis of some
nonlinear molecules by a variational
method.

"Int. J. Quantum Chem. Symp.", 1975, N 9,
317-323 (англ.)

525 528

542

0550 ПИК ВИНТИ

50730.651

25065

1975

Ch, TC

/publ. u. m.)

H₂O

X-9502

■ Čársky Petr, Slanina Zdeněk, Zahradník
Rudolf. Vybrané kapitoly z aplikované
kvantové chemie. XI. Semiempirické a
neempirické výpočty rovnovážných konstant
reakcí v plynné fázi. "Chem. listy",
1975, 69., N6, 529-543

(chem. rez. angl.)

384 385

0413
ВИНИТИ

Витисс 4066

1975

H₂O

фотолиз

21 Б154. Спектроскопия возбуждения поляризованной фотофлуоресценции: новая техника изучения молекулярной фотодиссоциации. Фотолиз H₂O в вакуумном ультрафиолете. Chamberlain G. A., Simons J. P. Polarised photofluorescence excitation spectroscopy: a new technique for the study of molecular photodissociation. Photolysis of H₂O in the vacuum ultraviolet. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 355—358 (англ.)

Описан новый способ определения симметрии электронно-возбужденных состояний, находящихся в области преддиссоциации, и измерения времен жизни, предшествующих распаду молекулы. Исследован процесс фотодиссоциации: $H_2O + h\nu (\approx 130 \text{ нм}) \rightarrow H + OH(A^2\Sigma^+)$. Сделан вывод о том, что вращательно возбужденные фрагменты OH образованы через преддиссоциацию колебательного состояния 1B_1 , а не электронного состояния 1A_1 . Предполагается, что колебательное состояние, принадлежащее электронному состоянию 1A_2 , соответствует одному кванту колебания $\nu_3(b_2)$.

Резюме

х 1975 №21

☑ (4)

ОН вращ. возб. соотв. из.

H₂O

1975

1 Д389. Спектр комбинационного рассеяния паров воды. Chan P. W., Ryder E. B. Raman scattering from water vapor. «Spectrosc. Lett.», 1975, 8, № 7, 427—438 (англ.)

Получены спектры комб. рас. паров воды при давл. 680 мм рт. ст., возбужденные импульсами рубинового лазера длительностью 10 нсек и мощностью 2 Мвт с длиной волны, перестраиваемой в интервале 6943,1—6944 Å. По методу внутреннего стандарта измерено относительное диффер. сечение рассеяния для возбуждения на длине волны 6943,8 Å. С азотом в качестве стандарта эта величина составляет $0,39 \pm 0,12$. В исследованный интервал длин волн возбуждающего света попадает собств. полоса поглощения H₂O, однако увеличения интенсивности комб. рас. не наблюдалось. По мнению авторов, существующие теории резонансного комб. рас. не в состоянии объяснить отсутствие усиления. Библи. 24.

М. В. Тонков

спектр
комб. рас.

ф. 1977v1

H₂O

D₂O

энергет.
спектр

1975

2 Д443. Возбуждение H_2O и D_2O электронным ударом. Энергетические спектры в диапазоне 4,2—12 эВ при различных углах рассеяния и энергиях падающих электронов. Chutjian A., Hall R. I., Trajmar S. Electron-impact excitation of H_2O and D_2O at various scattering angles and impact energies in the energy-loss range 4.2—12 eV. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 2, 892—898 (англ.)

Исследован энергетич. спектр электронов в диапазоне 4,2—12 эВ, рассеянных на молекулах H_2O и D_2O . Выявление электронных переходов, разрешенных оптически, проводилось в измерениях спектра энергетич. потерь при больших энергиях падающих электронов и рассеянии под малыми углами. Электронные переходы,

(+1)

X

Ф 1946 N2

запрещенные по спину или по симметрии, исследовались в режиме постоянной энергетич. разности при энергии падающих электронов, близкой к порогу возбуждения, и рассеянии под большими углами. Выявлен ряд новых особенностей в энергетич. спектрах и предложено их соотнесение с электронными переходами в D_2O и H_2O на основе сравнения с точными теоретич. расчетами, выполненными *ab initio*, и использования данных по изотопич. сдвигу колебательных полос между H_2O и D_2O . Кратко сформулирован ряд теоретич. и эксперим. задач по выяснению природы высокоэнергетичных (>11 эв) переходов в молекуле воды.

Библ. 22. С. Л.

Среднеквадратич. ампл.
колебаний

1975

H_2O

11 Б175. Новый метод вычисления среднеквадратичных амплитуд колебаний молекул. Cyvin S. J. An original approach to the calculation of mean-square amplitudes. «Spectrosc. Lett.», 1975, 8, № 6, 399—404 (англ.)

Предложен метод вычисления среднеквадратичных амплитуд колебаний молекул, основанный на разложении функций $\coth(hc\omega k/2kT)$ по нечетным степеням отношения $hc\omega k/2kT$. Для простых молек. моделей метод позволяет получить аналитич. выражения среднеквадратичных амплитуд при $T=0^\circ K$. Рассмотрен пример молекул типа H_2O . М. Р. Алиев

расчет
ср. кв.
ампл.
колеб.

x 1976 N 11

⑦ 2 одну сторону
одну сторону.

H₂¹⁷O

X4-9504

1975

B9-11-4579

Abstract: Microwave spectroscopy can provide the energy levels of the lower isotopes of H₂O. De Laun, Frank C. Hemminger, *J. Chem. Phys.*, 64, 1975, 56(1), 138-41 (Engl). The rotational spectrum of H₂¹⁷O in the ground vibrational state was investigated by microwave spectroscopy. Fifteen transitions at 200-300 cm⁻¹ were measured. Both the quadrupole and the rotation-nuclear spin tensor for the ¹⁷O nucleus were calculated from the hyperfine splittings of the rotational transition. In addition, the low-*J* lines are of significance in the atmospheric absorption of geoelectromagnetic radiation in the microwave region. The microwave transitions are combined with earlier data for H₂¹⁶O and H₂¹⁸O to calculate the ground state energy levels of H₂O.

Spans.
C. H. K. M. P.

C. H. 1975. 83 NY

3-9504

1975

H₂O

67554-18-066

(м.п.)

11 Д461. Микроволновый спектр и уровни энергии H₂¹⁷O в основном колебательном состоянии. Lucia Frank Cde., Helminger Paul. Microwave spectrum and ground state energy levels of H₂¹⁷O. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 1, 138—145 (англ.)

С помощью микроволн. спектрометра высокого разрешения в области 2,0—0,4 мм исследован вращательный спектр молекулы H₂¹⁷O в основном колебательном состоянии. Измерено 15 вращательных переходов. Из анализа сверхтонкого расщепления вращательных переходов рассчитаны тензоры квадрупольной и спин-вращательной молекулярной сверхтонкой структуры. Даны рассчитанные значения энергетич. уровней H₂¹⁷O в основном состоянии.

ф. 1975 № 11

43-9504

1975

H₂O

(м.п.)

23 Б334. Микроволновый спектр и энергии вращательных уровней основного колебательного состояния молекулы H₂¹⁷O. De Lucia Frank C., Helminger Paul. Microwave spectrum and ground state energy levels of H₂¹⁷O. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 1, 138—145 (англ.)

В диапазоне 100—800 ГГц измерен МВ-спектр молекулы H₂¹⁷O. Идентифицированы линии 7 вращательных переходов с $J \leq 6$ в основном колебательном состоянии и квадрупольная СТС линий. Анализ спектра выполнен с использованием приведенного вращательного гамильтониана Уотсона, полученного при условии $\bar{R}_6 = 0$. Определены вращательные и центробежные постоянные: $A = 830282,838$, $B = 435341,662$, $C = 277510,396$, $\Delta_J = 37,44401$, $\Delta_{JK} = -171,5584$, $\Delta_K = 965,7665$, $\delta_J = 15,2267$, $\delta_K = 36,2566$, $H_J = 1,48878 \cdot 10^{-2}$, $H_{JK} = -2,10405 \cdot 10^{-2}$, $H_{KJ} = -4,81054 \cdot 10^{-1}$, $H_K = 4,409069$, $h_J = 7,844745 \cdot 10^{-3}$, $h_{JK} = -2,11625 \cdot 10^{-1}$, $h_K = 5,4855 \cdot 10^{-1}$ (все в МГц). Для постоянных квадрупольной связи ядра ¹⁷O получены значения: $\chi_{aa} = -8,899$, $\chi_{bb} = -1,269$, $\chi_{cc} = 10,169$ МГц. Вычислены энергии вращательных уровней H₂¹⁷O вплоть до уровня 8₅₃ с $E = 1251,298$ см⁻¹.

64.54-11-268

X 1975 N 23

М. Р. Алиев

50711.1839

Ch, Ph, TC

 H_2O 41195

1975

* 4-9446

De Lucia Frank C., Helming Paul. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. V. Water vapor.
"J. Phys. and Chem. Ref. Data", 1974,
3, N 1, 211-219

0404 пм (англ.)

377 379

396

ВИНИТИ

71-8998

1975

H_2O

D_2O

Спектры

21 Б224. Спектры вынужденного комбинационного рассеяния H_2O и D_2O . Dheer M. K., Madhavan D., Ramachandra Rao D. Stimulated Raman spectra of H_2O and D_2O . «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 342—344 (англ.)

Получены спектры ВКР (область вал. кол. O—H и O—D), возбужденные рубиновым лазером с модулированной добротностью (мощность в импульсе ~ 100 Мвт, длительность импульса — 50 псек), излучение которого фокусировали линзой $f=6$ см в кювету-с-в-ом. Широкие полосы в спектрах ВКР, занимающие область от 3120 до 3460 cm^{-1} в спектре H_2O и от 2200 до 2750 cm^{-1} в спектре D_2O , обусловлены возбуждением двух (соотв., 3220, 3380 и 2400, 2500 cm^{-1}) перена- лагающихся линий, а не самофокусировкой. А. Бобров

(41) 

α 1975 n 21

50609.4738

96201

1975

Ph, Ch, TC, MGU

H₂O

* 4-8998

Dheer M.K., Madhavan D., Ramachandra Rao D.
Stimulated Raman spectra of H₂O and D₂O.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 32, N 2,

341-344

(англ.)

0382 глгк

351 351

ВИНИТИ

№20

1975

коэф. сило-
вого поля

+16



(2 Б92) Описание силового поля для деформационного движения трехатомных молекул. Diab Salim Simons Gary. Force field description of the bending motion of triatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 34, № 2, 311—316 (англ.)

Предложен новый метод описания деформационных линейных и нелинейных трехатомных молекул с помощью разложения потенциала в ряд по угловой переменной $\rho_3 = [\sin \theta/2 - \sin \theta_e/2] / \sin \theta_e/2$ и по линейным переменным $\rho_1 = (r_1 - r_{1e})/r_1$, $\rho_2 = (r_2 - r_{2e})/r_2$. Введенная переменная ρ_3 оказалась удобной, т. к. она удовлетворяет тем же требованиям, что и потенциал $V(\theta)$ для трехатомной молекулы: а) симметрия относительно поворота на 180° , б) существование сим. минимума при 180° для линейных молекул, в) существование двух несим. минимумов для нелинейных молекул, соотв-щих более быстрому возрастанию потенциала при уменьшении угла θ , чем при его увеличении. Расчет коэф. разложе-

2 1976 n2

ния потенциала в переменных ρ_i может быть проведен с помощью метода наименьших квадратов либо по спектральным данным, либо по известным силовым коэф. для линеаризованных смещений. Приведены коэф. для квадратичного силового поля нелинейных молекул H_2O , SO_2 , NO_2 , O_3 , H_2S , ClO_2 , линейных CO_2 , CS_2 , OCS , N_2O , HCN , SiCN и для кубичного силового поля нелинейных молекул H_2Se , SeO_2 , OF_2 , SiF_2 , GeF_2 . Для молекул H_2O , O_3 и HCN проведено сравнение полученного силового поля с деформац. потенциалами, вычисленными неэмпирич. методами. Для нелинейных молекул новый метод приводит к более точным данным по силовому полю, чем неэмпирич. расчеты в рамках метода ССП на ограниченном базисе и примерно к тем же данным, что

расчеты методом конфигурац. взаимодействия на расширенных базисах.

Б. И. Жилинский

1975

$H_2O, SO_2, NO_2, O_3,$
 $H_2S, ClO_2, CO_2,$
 $CS_2, OCS, N_2O,$
 $HCN, CCl_4,$
 $OF_2, SiF_2, GeF_2,$
 H_2Se, SeO_2
 $Vi, cur. not$

199560z Force field description of the bending motion of triatomic molecules. Diab, Salim; Simons, Gary (Dep. Chem., Wichita State Univ., Wichita, Kans.). Chem. Phys. Lett. 1975, 34(2), 311-16 (Eng). In a continuation of previous work (S., 1974; S. and J. L. Novick, 1974), the general quartic force fields for H_2O , SO_2 , NO_2 , O_3 , H_2S , ClO_2 , CO_2 , CS_2 , OCS , N_2O , HCN , and $ClCN$, and the general cubic force fields for H_2Se , SeO_2 , OF_2 , SiF_2 , and GeF_2 were calcd. in terms of power series in the bond-length variables $\rho_1 = (r_1 - r_{1c})/r_1$ and $\rho_2 = (r_2 - r_{2c})/r_2$ and in the bond-angle variable $\rho_3 = [\sin(\theta/2) - \sin(\theta_c/2)]/\sin(\theta_c/2)$. The force-field bending potential-energy functions derived from the general force fields are more accurate than those obtained from the available ab initio calcs. with limited basis sets, and are comparable to the values from more sophisticated calcs. where available.

(16) 

P.A. 1975 83 n 24

50403.9009
Ch, TC, DB, MGU

49587

H₂O

1975

3147

Diercksen Geerd H.F., Kraemer Wolfgang
P., Roos Björn O. SCF-CI studies of cor-
relation effects on hydrogen bonding and
ion hydration. The systems: H₂O, H⁺.

H₂O, Li⁺ · H₂O, F⁻ · H₂O, and H₂O · H₂O.

"Theor. chim. acta", 1985, 36, N. 4, 249-
274 (англ.)

304 305

0329

ВИНИТИ

H_2O (II)

STUEN 3763

1975

Dill J. D.

Allen L. C.

"J. Amer. Chem Soc"

1975, 97, N25, 7220-26

(ans)

(ans $(NH_3)_2$; III)

1975

 H_2O CO_2 NH_3 спектр
и.к.

излучен.

72



Ф 1976 N 12

12 Д341. ИК-излучение молекул H_2O , CO_2 и NH_3 , возбуждаемых столкновениями с N_2 , O и Ar . Dunn M. G., Skinner G. T., Treanor C. E. Infrared radiation from H_2O , CO_2 , or NH_3 collisionally excited by N_2 , O , or Ar . «AIAA Journal», 1975, 13, № 6, 803—812 (англ.)

Исследован спектральный состав ИК-излучения молекул H_2O , CO_2 и NH_3 , возбуждаемых столкновениями с потоком быстрых моноэнергетич. частиц N_2 ($V=5,8$ км/сек), O ($V=4,3$ км/сек) или Ar ($5,4$ км/сек). Представлена схема основного узла установки, состоящая из инжектора медленных частиц (H_2O , CO_2 , NH_3) в ударную трубу и приемника ИК-излучения. Выделение различных спектральных областей производилось при помощи набора фильтров в области $2,5—14$ мк. Развита теория, связывающая энергию излучения с сечением колебательного возбуждения при столкновении σ , радиационным временем жизни τ и условиями опыта. Полученные следующие значения σ сравнены с теоретич. оценками. Библ. 19. А. К.

H₂O

преддис-
социация

x 1976
n 11

11 Б119. Преддиссоциация ионов воды. El and J. H. D.
The predissociations of water ions. «Chem. Phys.», 1975,
11, № 1, 41—47 (англ.)

1975

Методом фотоэлектронно-фотоионных совпадений измерена зависимость относит. доли ионов D₂O⁺, OD⁺ и D⁺ от начальной энергии D₂O ($\tilde{B}^2B_2$), образующихся при фотоионизации D₂O (энергия источника ионизации $h\nu=21,22$ эв). Ионы идентифицировались по времени задержки между импульсами регистрируемых электронов и ионов. По форме пиков, соответствующих различным ионам в получаемых, таким образом, масс-спектрах, определена также кинетич. энергия образующихся ионов. При одинаковой избыточной энергии D₂O⁺ ионы OD⁺ получают большую кинетич. энергию, чем D⁺. Полученные результаты позволили высказать предположение, что в образовании D⁺ и OD⁺ участвуют различные поверхности потенциальной энергии D₂O⁺: D⁺

является результатом преддиссоциации D₂O⁺ через состояние A, а OD⁺ результатом преддиссоциации через состояние $\tilde{X}$ (переход $\tilde{B}$ в $\tilde{X}$ и $\tilde{A}$ осуществляется посредством внутренней конверсии). Е. Николаев

X 4 - 9275

1975

H₂O

22 Б226. Интенсивности колебательно-вращательных переходов в молекулах типа H₂O. Применение расчета для случая $2\nu_2$, ν_1 и ν_3 полос H₂¹⁶O. Flaud J. M., Samy-Peyret C. Vibration-rotation intensities in H₂O-type molecules application to the $2\nu_2$, ν_1 , and ν_3 bands of H₂¹⁶O. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1-3, 278-310 (англ.)

(2i)

Предложен метод расчета интенсивностей колебат. вращат. переходов в молекулах типа H₂O, учитывающий центробежные искажения, различия вращательных постоянных для разных колебательных уровней и резонансные эффекты. Выведены ф-лы, удобные для непосредственных расчетов. Сравнение эксперим. и теоретически вычисленных значений интенсивностей для 240 полос поглощения показало хорошее согласие (ошибка в среднем не превышает 10%). Используя предложенный метод расчета получены выражения и вычислены значения моментов переходов для трех уровней систем типа H₂O: (020), (100) и (001). Вычислены и затабулированы интенсивности колебат.-вращат. полос $2\nu_2$, ν_1 и ν_3 H₂¹⁶O.

Б. Г. Антипов

X. 1975
N 22

H₂O

24

8 Д497. ИК-спектры поглощения смесей H₂O—NaOH во всей области смешивания при температурах до

1975

350°С и давлениях до 2000 бар. Franck E. U., Charuel M. Infrared absorption spectra of H₂O-NaOH-mixtures in the complete miscibility range to 350°С and 2000 bar. «Rev. Phys. Chem. Jap.», 1975, Spec. Issue, 600—601 (англ.)

В области 2700—4000 см⁻¹ исследованы ИК-спектры смесей H₂O и NaOH. Состав смеси варьировался от чистой воды до чистого расплава гидрата окиси натрия (т-ра плавления 318°С). Использовалась специально сконструированная кювета с сапфировым окном, позволяющая регистрировать спектры исследуемых смесей при т-рах до 350°С и давл. до 2000 бар. Показано наложение двух полос: воды при 3500 см⁻¹ и широкой полосы с максимумом около 2900 см⁻¹, которая интерпретирована как полоса ассоциатов молекул H₂O и ионов OH⁻. Оценена величина энтальпии образования таких ассоциатов — $\Delta H = 18 \pm 8$ кдж/моль.

В. М. Шрайбер

☒

Ф. 1976. Л8. ΔH_f $(-12 \frac{1}{2})$ H₂O—NaOH; H₂O·OH⁻

расчет тем. ср., ч. н. (O_2 , N_2 , H_2O , 1975
(O_2)₂, (N_2)₂, (H_2O)₂) XI 4552

Ромаш В.В., Тергузова А.Ф., Килин В.А.,
Тимоков Е.И., Самсонов Б.Ф., II, 138.
В сб. "Квант. химия", Киев, "Штиинца"
1975, , 97-227

Расчет размеров
гроз СНД0/2.

Рижин, 1975, 21573

~~малых молний ме-~~

10

мг
гр 2507
6

H₂O

smmucc 5907

1975

(2i)

Fredin L; et al

Chem. Soc., 1975, 7,

11-13

51117.56
Ph, TC, MGU,
Ma, DB, Ch

96625 Раман -
H₂O - спектр

1975
3520

French M.J., Long D.A. A versatile
computer-controlled spectrometer for
hyper Rayleigh and hyper Raman spectroscopy.
"J. Raman Spectrosc.", 1975, 3,
N 4, 391-406 (англ.)

~~0502 нм~~

465 469 494

ВИНИТИ

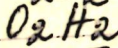
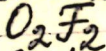
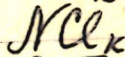
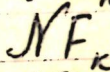
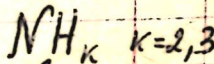
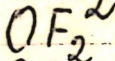
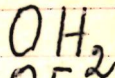
(валентн. углы, расчет)

1975

23 Б33. Валентные углы в галогенидах и гидридах азота и кислорода. Glidewell C. Bond angles in halides and hydrides of nitrogen and oxygen. «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1975, 11, № 5, 353—357 (англ.)

Показано, что значения валентных углов ряда галогенидов и гидридов азота и кислорода, не могут быть удовлетворительно объяснены в рамках модели отталкивания электронных пар, но хорошо воспроизводятся в модели взаимодействия несвязанных атомов. В расчете использованы значения ван-дер-ваальсовых радиусов, полученные Бартеллом: N, 1,14; O, 1,13; F, 1,08; Cl, 1,44; H_N, 0,81 и H_O 0,76А. Рассмотрены молекулы OX₂, NX_k (X=H, F, Cl, k=2, 3), O₂F₂ и O₂H₂. Отклонения вычисленных значений от эксперим. составляют ±1,3—4,9°.

А. Клягина



X 1975 N23

(47) X

1975

Над

Требов Л. А. и др.

кв. мех.
расчет

Кварт. химия Кеммерев
Ипполита, 1975, 5-64'

См № 1, III

H₂O

Оттиск 3302

1975

2 Д479. Спектроскопия паров воды в области 5 мк с помощью перестраиваемого лазера, использующего явление комбинационного рассеяния света с обращением спина. Guerra M. A., Ketabi M., Sanchez A., Feld M. S., Javan A. Water vapor spectroscopy at 5 μ using a tunable SFR laser. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 3, 1317—1319 (англ.)

Исследована форма и ширина линии поглощения паров воды в зависимости от давления паров и буферных газов (N₂, O₂, Xe, A). В качестве источника света использован перестраиваемый непрерывный лазер на основе явления вынужденного комб. рас. света с обращением спина, накачиваемый излучением СО-лазера ($P=2$ Вт). Исследованы переходы [000,5₁₅—010,6₂₄] и [000,5₃₂—010,6₄₃] полосы ν_2 . Показано, что коэф. самоуширения линий, а также уширения буферными газами хорошо согласуются с имеющимися теоретич. данными. Измерена ширина линии паров воды в атмосфере при 22°С и влажности 35%. Библ. 14. X. В.

ширина
линии

Ф 1976 №2

50421.7818

TC, Ph, Ch

H₂O

30526GR

1975

4006

Guest M.F., Saunders V.R. The calculation of valence shell ionization potentials by the Δ SCF method. "Mol. Phys.", 1975, 29, N 3, 873-884

(англ.)

(см. HF, III)

0350 тик

322 324

0342

ВИНИТИ

H₂O

Gunnarsson O.

1975

(Ei)

" Int. J. Quantum Chem
Symp " 1975, n 9, 83-93 (a.u.)

(cu. xmu. ches; III)

50624.8886
Ch, Ph, TC, MGU

H₂O

96201

1975

* 4-9220

Hausman R.F., Jr, Bloom S.D., Bender C.F.

A new technique for describing the electronic states of atoms and molecules - the vector method.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 3, 483-488
0392 ПИК

(англ.)

364 364

0384

0392 ВИНТИ

H_2O

(Ae^-)

$(1+)H_3O^+$ $\boxtimes$

рекомбинация
и образ.

2. 1975 № 22

22 Б1026. Сродство к протону воды и механизм и кинетика образования H_3O^+ в пламенах H_2 , O_2 и N_2 . Hayhurst Allan N., Telford N. Roland. Proton affinity of water and the mechanism and kinetics of production of H_3O^+ in flames of H_2 , O_2 and N_2 . «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 1, № 6, 1352—1362 (англ.)

Масс-спектрометрически измерены концен-ции ионов H_3O^+ в пламенах богатых смесей $H_2-O_2-N_2$ при атмосферном давл. Определены концен-ционные профили по оси пламени. Обсуждается механизм образования H_3O^+ . Для р-ции $H+H+OH \rightleftharpoons H_3O^++e^-$ (I) в интервале т-р 2025—2445°K определены константа равновесия $K=2,0 \cdot 10^{-29} \exp(-1,41 \cdot 10^4/T)$ см³/молекула и константа скорости прямой р-ции $k=8,2 \cdot 10^{-36} \exp(-1,41 \cdot 10^4/T)$ см⁶/молекула²·сек. Сродство к протону газообразных молекул воды составляет 699 ± 17 кДж/моль. Полученные значения сравниваются с данными др. авторов. Предполагается, что р-ция (I) протекает в две стадии с образованием возбужденных молекул (H_2 или H_2O), а затем H_3O^+ и свободного электрона. Также в две стадии может проходить и обр. процесс рекомбинации H_3O^+ с e^- .

В. М. Заманский

H₂O

43-9457

1975

11 Д423. ИК-спектры и структура воды в матрицах из инертных газов. Huong P. V., Cornut Jean-Claude. Spectre infrarouge et structure de l'eau dans les matrices de gaz inertes. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1975, 72, № 4, 534—536 (франц.; рез. англ.)

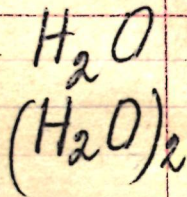
Получены ИК-спектры поглощения в области 3000—3800 см⁻¹ с разрешением не хуже 1 см⁻¹ молекул воды, изолированных в матрицах из Ar и N₂ при t-ре 16—20° K. Изучены изменения в наблюдаемых спектрах в зависимости от конц-ии и t-ры отжига образца. Анализ полученных результатов позволил идентифицировать полосы поглощения, относящиеся к мономерам, димерам и полимерам молекул воды. Зарегистрировано 6 полос поглощения, отвечающих вал. кол. групп OH в димерах (H₂O)₂ (в см⁻¹): 3714, 3625, 3697, 3688, 3546 и 3520. Этот результат указывает на существование 2 типов димеров. Кроме того, отнесены полосы поглощения, соответствующие колебаниям молекул воды на более высоких стадиях ассоциации. Библ. 6.

Ю. М. Л.

и.к. спектры

Ф. 1975
N 11

1975



J:

 (+1) ☒

X 1975 № 23

(23 Б267.) Изучение взаимодействий с участием водородных связей по инфракрасным спектрам с использованием [низкотемпературной] матричной техники в инертных газах. Huong P. V. Etude infrarouge des interactions par liaison hydrogène à l'aide de la technique des matrices de gaz inertes. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1975, 72, № 4, 415 (франц.)

Рассмотрены возможности ИК-спектроскопич. изучения межмолек. взаимодействий в матрицах инертных газов на примере малых (вода) и больших молекул (γ -аминомасляная к-та (I), играющая важную роль как ингибитор в процессах центральной нервной системы). В первом случае из анализа эволюций спектров в зависимости от концентрации предложено отнесение ИК-полос вибраторов ОН молекул H_2O , находящихся на различных стадиях самоассоциации; показано, в частности, существование двух типов димеров воды (циклич. и открытых). Во втором случае удалось изолировать I в нейтр. форме, проследить димеризацию нейтр. молекул I и образование цвиттер-ионной формы. Показано, что образование цвиттер-ионной формы про-

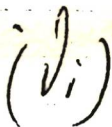
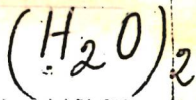
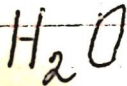
исходит по механизму двойного переноса протона; это обстоятельство может быть полезным при выяснении роли I как ингибитора передачи нервных импульсов.

Резюме



*4-9457

1975



23 Б266. Инфракрасные спектры и структура воды в матрицах инертных газов. Huong P. V., Cornut Jean-Claude. Spectre infrarouge et structure de l'eau dans les matrices de gaz inertes. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1975, 72, № 4, 534—536 (франц.; рез. англ.)

Измерены при 20° К ИК-спектры поглощения воды в тв. матрицах аргона и азота и предложено отнесение наблюдаемых полос. Область свободных вибраторов ОН (данные для N₂ в скобках): мономер 3638 см⁻¹ (3634 см⁻¹) и 3728 (3725); открытый димер ...ОН₂ 3629 (3626) и 3717 (3714); открытый димер ...Н—О—Н 3700 (3697); циклич. димер —О—Н—О—Н 3690 (3688);

(+1)



X 1975 N 23

олигомер $\dots \text{O} \begin{array}{l} \diagup \text{H} \\ \diagdown \text{H} \dots \end{array}$ 3687 (3684). Область связанных

вibrаторов: открытый димер $\text{O}-\text{H} \dots \text{O} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array}$ 3547 (3546);

олигомер (ассоциированной с двумя молекулами)

$-\text{H} \dots \text{O}-\text{H} \dots \text{O} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array}$ 3430 (?); циклич. димер 3512

(3520); олигомер (ассоциированный с тремя соседними

молекулами) $\dots \text{H} \begin{array}{l} \diagdown \text{O}-\text{H} \dots \text{O} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} \end{array}$ 3300 (?); полимер 3220

$\text{H} \begin{array}{l} \diagdown \\ \diagup \end{array}$ (3210). Б. В. Рассадин

1975

H₂O

170203z Librational modes of water molecule in solids.

Jain, Y. S. (Dep. Phys., Indian Inst. Technol. Kanpur, Kanpur, India). *Solid State Commun.* 1975, 17(5), 605-7. (Eng).

The librational modes of H₂O mol. were crit. discussed. Assuming a simple model for H₂O, equations were developed to compute the force consts. k_H and k'_H which primarily det. the frequencies of the modes. These modes should be sensitive to H-bonding and insensitive to metal-oxygen coordination. The unique assignments of rocking and wagging modes are possible if the nature of H-bonds exhibited by H₂O mol. is correctly known.

C. A. 1975. 83 N20

XU-9487

1975

 H_2O D_2O

спектры
валентных
электронов

23 Б199. Изотопические эффекты и эффекты электронно-колебательного взаимодействия в спектрах валентных электронов H_2O^{16} , H_2O^{18} и D_2O^{16} . Karlsson L., Mattson L., Jadrny R., Albridge R. G., Pinchas S., Bergmark T., Siegbahn K. Isotopic and vibronic coupling effects in the valence electron spectra of $H_2^{16}O$, $H_2^{18}O$, and $D_2^{16}O$. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 12, 4745—4752 (англ.)

В области энергий ионизации 11—20 эв исследованы с высоким разрешением спектры валентных электронов молекул H_2O (I), H_2O^{18} (II) и D_2O^{16} (III), возбуждавшиеся резонансным излучением He-I β . (537 А) тлеющего разряда УФ-лампы (давление в анализаторе энергий поддерживалось равным $\sim 5 \cdot 10^{-6}$ мм). Приведены спектры измеренных энергий ионизации, соотв-щих конечным состояниям ионизации 2B_1 , 2A_1 и 2B_2 молекул

X1975 N23

I—III и дано отнесение наблюдавшейся для этих полос колебательной структуры, представляющей собой прогрессию деф. кол. ν_2 (состояние 2A_1) или прогрессию, связанную с кол. ν_2 и ν_1 (состояния 2B_1 и 2B_2) ионов I—III. Из анализа величин изотопич. сдвигов в исследованных спектрах молекул I—III принято, что в возбужденном ионном состоянии (2A_1) колебания ν_2 происходят относительно равновесной линейной конфигурации ($D_{\infty h}$). Найдено, что прогрессия ν_2 в полосе 2A_1 подвержена сильному электронно-колебательному взаимодействию. Приведены вычисленные значения силовых коэф. (все в 10^{-5} дин/см) I в нейтр. состоянии

$k_1=7,613$, $k_8/l^2=0,703$ и в ридберговском состоянии $k_1=5,742$, $k_8/l^2=0,564$, а также для иона I в состоянии 2B_1 $k_1=5,93 \pm 0,04$, $k_8/l^2=0,56 \pm 0,03$. Соотв-щие величины силовых коэф. приведены также для III и для иона II (состояние 2B_1). А. П. Александров

H₂O

Ж-8343

1975

6 Д213. Расчет постоянных ангармоничности молекул H₂O, H₂S, H₂Se и их дейтерозамещенных. Ка-шталь В. Н. «Оптика и спектроскопия», 1975, 38, № 3, 506—509

Выведены в общем виде расчетные формулы для коэф. ангармоничности молекул типа XY₂. Численные расчеты, проведенные для молекул H₂O, H₂S, H₂Se и их дейтерозамещенных, показали, что в потенциальной ф-ции необходимо учитывать «недиагональные» постоянные ангармоничности.

Резюме

Ж-8343-1975
Ж-8343-1975
Ж-8343-1975

Ф1975N6

Ж2 ☒

*3-9487

1975

 H_2O D_2O фотоэл.
спектр

(+1)

ф. 1975 № 11

11 Д309. Проявление связи между колебаниями молекулы и ее изотопным составом в спектрах валентных электронов молекул $H_2^{16}O$, $H_2^{18}O$ и $D_2^{16}O$. Karlsson L., Mattsson L., Jadrny R., Albridge R. G., Pinchas S., Bergmark T., Siegbahn K. Isotopic and vibronic coupling effects in the valence electron spectra of $H_2^{16}O$, $H_2^{18}O$, and $D_2^{16}O$. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 12, 4745—4752 (англ.)

Прослежены изменения в фотоэлектронных спектрах высокого разрешения молекул $H_2^{16}O$, $H_2^{18}O$ и $D_2^{16}O$, вызываемые изменением изотопного состава. Источником возбуждения служило резонансное излучение HeI, что позволило исследовать 3 наиболее отдаленные орбитали $1b_1$, $2a_1$ и $1b_2$. Регистрация спектров производилась многоканальной пластинчатой детекторной системой с последующей обработкой сигнала компьютером, включенным на линию с электронным спектрометром. На основе полученных данных проведено соотнесение по-

лос фотоэлектронного спектра с энергетич. состояниями молекул и сделаны заключения о структуре молекулярных ионов, видах возбужденных колебаний и величинах адиабатич. энергий ионизации. Проведены теоретич. расчеты молекулярных констант, результаты которых сопоставлены с эксперим. полученными величинами. Найдено, что на последовательность ν_2 в полосе 2A_1 влияет сильное колебательное взаимодействие в молекуле. Библ. 24.

С. Л.

(13)
ОП

H₂O

*4-8343

1975

(μ, n)

177346m Calculation of the anharmonicity constants of water, hydrogen sulfide, hydrogen selenide, and their deuterated derivatives. Kapishtal, V. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1975, 38(3), 506-9 (Russ). General relations for calcg. the anharmonicity coeffs. of XY₂ mols. are given. The calcns. performed for H₂O, H₂S, H₂Se, and their *d*-deriv. mols. (the values of force consts., harmonic frequencies, and anharmonicity consts. and coeffs. are given) revealed that the nondiagonal anharmonicity consts. should be taken into account in the potential function. L. Sourkova

(+2)

17

C.A. 1975. 82. N26

XU-8343

1975



(и.н.)

12 Б125. Расчет постоянных ангармоничности молекул H_2O , H_2S , H_2Se и их дейтерозамещенных. Капштал В. Н. «Оптика и спектроскопия», 1975, 38, № 3, 506—509

Выведены в общем виде расчетные ф-лы для коэф. ангармоничности молекул типа XY_2 . Численные расчеты, проведенные для молекул H_2O , H_2S , H_2Se и их дейтерозамещенных, показали, что в потенциальной функции необходимо учитывать «недиагональные» постоянные ангармоничности.

Резюме

(+2)



X. 1975. N 12

1975

Physiol -
Chem Power

H₂O, CO

(+2)
Chem Sp

139317a Double-beam high resolution Fourier spectrometer for the far infrared. Kauppinen, Jyrki (Phys. Dep., Univ. Oulu, Oulu, Finland). *Appl. Opt.* 1975, 14(8), 1987-92 (Eng). The construction and performance of a double-beam Michelson-type Fourier spectrometer are described. The instrument covers the range 10-450 cm⁻¹ with a max. resolution of 0.025 cm⁻¹ and an accuracy of frequency within ± 0.001 cm⁻¹. The optical path difference was measured by means of an He-Ne gas laser. To illustrate the general performance of the instrument, the pure rotational spectra of H₂O and CO were recorded.



P.A. 1975-83. N16

60129.9198

Ch. TC

96559

 $H_2O (AH^+)$ 1975
#4-11193

Kebarle P., Yamdagni R., Hiraoka K.,
McMahon T.B. Ion molecule reactions
at high pressure: recent proton affini-
ties, gas phase acidities and hydrocar-
bon clustering results. "Int. J.
Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1976, 19, N1,
71-87 (англ.)

523 525 .

53 0540 пик

ВИНИТИ

H₂O

11 B64. Энергия возбуждения 3B_1 -состояния H₂O, рассчитанная по данным для обобщенных сил осцилляторов. Klump Kirby N., Lassettre Edwin N. Excitation energy of 3B_1 state of H₂O calculated from generalized oscillator strengths. «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 19, 1825—1831 (англ.; рез. франц.)

1975

расчет
вертик.
энергии
возбужд.

Рассчитана вертикальная энергия возбуждения молекулы H₂O в состояние 3B_1 . Метод расчета основан на приближенной ф-ле, связывающей разность энергий синглетного и триплетного состояний с обобщенными силами осцилляторов f_v для синглет-синглетного перехода (величины f_v пропорциональны амплитудам электрон-молек. рассеяния в борновском приближении). Значения f_v получены экспериментально для перехода $\tilde{A}^1B_1 \leftarrow \tilde{X}^1A_1$ в области 7,4 эв при энергиях налетающих электронов от 300 до 600 эв и при значениях квадрата изменения импульса до 4,5 ат. ед. Необходимая для вычислений аналитич. зависимость f_v от изменения импульса получена аппроксимацией эксперим. данных. Рассчитанное значение разности энергий синглет-триплет (0,38 эв) позволяет оценить вертикальную энергию возбуждения в 3B_1 -состояние как 7,0 эв (с вероятной погрешностью $\pm 0,1$ эв), что хорошо согласуется с результатами неэмпирич. вычислений и с эксперим. данными.

X 1976
N 11

А. В. Немухин

H₂O

1975

6 Д139. Энергия возбуждения состояния 3B_1 , H₂O, рассчитанная из обобщенной силы осциллятора. Kirby N. Lassettre Edwin N. Excitation energy of 3B_1 state of H₂O calculated from generalized oscillator strengths. «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 19, 1825—1831 (англ.; рез. франц.)

Энергия
возб. свеч.

Экспериментально с помощью разработанного ранее электронного спектрометра определена обобщенная сила осциллятора для возбуждения уровня 7,4 эв в H₂O при начальных энергиях электронов от 300 до 600 эв и величине квадрата изменения импульсов сталкивающихся электронов до 4,5 ат. ед. Данные применялись для расчета энергии возбуждения нижнего 3B_1 -состояния H₂O с использованием приближенной ф-лы Лассетра и Диллона. Полученная величина 7,0 эв находится в хорошем согласии с точными квантовохимич. расчетами и с экспериментом. Оцененная ошибка, полученная на основе ошибок, найденных для CO и He, составляет 0,1 эв. Это является вероятной ошибкой, а не верхней границей ошибки.

Г. К.

Ф 1976 № 6

H₂O

литтер 6565

1975

Жулов В. Ф.

Железистый - браунный
обмен энергии в системе
пары воды.

Рукопись деп. в ВИНИТИ
N608-75 деп.

оттиск 3629

1975

H₂O

D₂O

21; м.п.

(+1)

⊗

X1976 N9

9 Б217. Спектры обертонов H₂O, D₂O и H₂O в D₂O в твердом состоянии. Kroh D., Ron A. The overtone spectra of H₂O, D₂O and mixtures of H₂O in D₂O ice. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 36, № 4, 527—530 (англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения в области обертонов вплоть до 8000 см⁻¹ H₂O, D₂O и их смесей в различных соотношениях при т-ре 77° К. Спектры характеризуются довольно сложной структурой, зависящей от отношения H₂O/D₂O. С привлечением данных для основных тонов найдено для H₂O $\omega_e = 3930$ см⁻¹, $\omega_e x_e = -300$ см⁻¹; для D₂O, соотв., 2694 и -127 см⁻¹. Наблюдаемая структура спектров может быть интерпретирована с точки зрения возбуждений единичных связей ОН или OD (связанные возбуждения) и возбуждений, включающих соседние связи ОН и простирающихся по всему кристаллу (несвязанные возбуждения). Большая ангармоничность связанного состояния объяснена как следствие низкого барьера потенциальной кривой протона с двойным минимумом. Б. В. Рассадин

H₂O

1975

Kutzelnigg Werner.

таблицы
переходных
коррелируемых.
поправок

"Localizat and Delocalizat
Quantum Chem Vol 1"
Dordrecht - Boston 1975, 143 -
153. (англ.)

(англ Be H₂; III)

H-DM

075.

4824

1975

Kerr J. A., et al.

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

(Do)

H_2O (u.n.) XI-4565 1975

Lucia R.C., Helming P;

J. Mol. Spectrosc., 1975, 56, 11, 138-
145 (u.n.)

microwave spectrum of H_2O^{17} and
ground state energy levels

in QJ , 1975, 110461

10 (P)

H₂O

Журнал есть в ОХН
~~перечень~~

1975

Do, I, kb.
мех. факт

84: 79920r Influence of basis sets on the calculation of molecular properties. Leroy, G.; Reckinger, G.; Ruelle, J. L. (Lab. Chim. Quant., Univ. Cathol. Louvain, Louvain-la-Neuve, Belg.). *Bull. Soc. Chim. Belg.* 1975, 84(11), 1105-18. F. Within the framework of the Hartree-Fock model, the efficiency of several at. Gaussian basis sets was studied for calcn. of prop. properties. The LCAO-SCF-MO method is discussed. The total energy, energy of atomization, 1st ionization potential, net charge, dipole moments and bond populations are calcd. for CH₄, C₂H₄, C₂H₆, cyclopropane, H₂O, NH₃, F₂, and Cl₂. The results are compared. For the intermol. complexes H₂O-Cl₂ or NH₃-Cl₂ there are calcd. and compared the equil. geometries, heats of formation, net charges and charge transfers to Cl₂. The efficiency of the basis sets utilized is evaluated. J. Troian.

Заканчиваю Марта 27/11/77

Р.Д. 1976 84 N 12

(+7) X

1

1975

H₂O

160471a Double self-consistent-field calculations on the ground state water molecule. Energies, geometry and force constants. Liakus, Arthur (Univ. Nebraska, Lincoln, Nebr.). 1974. 122 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 75-3437. From *Diss. Abstr. Int. B* 1975, 35(8). 3856.

кв.мех

пацрем

C. A. 1975, 82 v 24

H₂O, D₂O (*isotopes & manpage*) 1975

Mann B., Luck W.A.P., Neikes T.,
Schmidt E., XI-4752

Report 1974, AED-CONF-74-183-
-005, 6 pp. From Nucl. Sci. Abstr.
1975, 32 (3), N5971.

Matrix isolation spectroscopy
of water and deuterium oxide,
C.A. 1975 83 N22 185778y 10 (4)

50204.7370
Ph, Ch, TC

H₂O

30526GR 02

1975

X 4-8047

Maestro M., Moccia R.

Localized molecular second-order
properties.

"Mol. Phys.", 1975, 29, N 1, 81-96

(англ.) 0295 пик

273 276

ВИНИТИ

H₂O

Жз - 11167

1975

9 Б37. Базисные наборы гауссовых функций, подходящие для расчетов в валентном приближении с применением метода модельного потенциала. McWilliams D., Huzinaga S. Gaussian basis sets suitable for accurate valence-shell calculations using the model potential method. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 11, 4678—4684 (англ.)

Рассмотрен метод расчета атомов и молекул в рамках приближения модельного потенциала для учета электронов замороженного остова. Показано, что условие ортогональности валентных и остоковых орбиталей удобно учитывать с помощью добавления в модельный потенциал проекц. операторов. Получены значения параметров модельных потенциалов для атомов от C

расчет
гауссов
молекулы

(+9)



X 1976 N9

до F и от P до Cl. Расчеты выполнены методом ССП с использованием базиса гауссовых функций 4—31 ГФ. Полученные параметры использованы для расчета молекул. Орбитальные энергии и коэф. ЛКАО для молекул H_2O и N_2 , рассчитанные в методе модельного потенциала сопоставлены с результатами полного расчета. На примере молекул CH_4 , NH_3 , H_2O , N_2 , HCN , PH_3 , H_2S , ClF показано, что метод модельного потенциала воспроизводит геометрию этих молекул с той же точностью, что и полные неэмпирич. расчеты в базисе 4—31 ГФ при значительно меньших затратах машинного времени.

А. Е. Смоляр

H₂O

расчет
молекулы

X 1975 N17

17 B26. Исследование приближений «маффин-тин» для потенциала и плотности заряда в ССП- X_α -методе рассеянных волн на примере расчетов H₂O. Mitzdorf Ulla. Investigation of the muffin-tin approximations for potential and charge density in the MS- X_α method by means of calculation of H₂O. «Theor. chim. acta», 1975, 37, № 2, 129--145 (англ.)

Детальный анализ результатов расчета молекулы H₂O ССП- X_α -методом рассеянных волн показывает, что приближения модели «маффин-тин» как для потенциала, так и для плотности электронного заряда сильно влияют на результаты. Влияние этих приближений одинаково по порядку величины. Хорошие результаты для полных энергий молекул достигаются взаимной компенсацией ошибок двух приближений, а не их минимизацией. Полная энергия сильно изменяется при варьировании радиуса или положения внешней сферы. Рассчитанные равновесные расстояния существенно зависят от выбора радиусов атомных сфер и всегда превышают эксперим. значения (в этом случае основной причиной погрешности является приближение для потенциала, а не для плотности зарядов).

По резюме

1975

H₂O

ВР-4581-XI

1975

10 Д222. О вычислении дефекта инерции, постоянных l -удвоения и силовых постоянных. Müller Achim, Mohan Nageswaran, Nand Rai Sachchida. On the inertia defect, l -doubling constant and force constant solutions. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1975, 72, № 2, 158—162 (англ.; рез. франц.)

С использованием условий $L_{12}=0$ или $L_{11}=0$ для форм колебаний и экстремальных значений корриолисовых постоянных вычислены дефекты инерции нелинейных молекул H₂O, H₂S, H₂Se, NO₂, O₃, SO₂, ClO₂, OF₂, OCl₂, SiF₂ и GeF₂ и постоянные l -удвоения линейных молекул OCS, OCS₂, FCN, ClCN, BrCN, JCN, HCP и HCN. Показано, что дефекты инерции рассматриваемых нелинейных молекул, за исключением гидридов, и постоянные l -удвоения всех линейных молекул мало чувствительны к значениям силовых постоянных и их значения, вычисленные приближенными методами, близки к эксперим. данным.

М. Р. Алиев

расчет
дефекта
инерции
и l -удво-
ения.

ф. 1975

(+17)

ⓧ

51229.8487

Ch, Ph, TC, MGU

H_2O ($T_{\text{раств}}$)⁴⁰⁶⁰⁴

1975

xy-10910

Nerbrant Per-Olof.

(см. №2, III)

Application of many-body Green's functions to the calculation of molecular ionization potentials.

"Int. J. Quantum Chem.", 1975, 9, N 5, 901-916

(англ.; рез. франц., нем.)

0532-лнк

499 502

5129

ВИНИТИ

H₂O

Kishikawa Shigeaki 1975
Watanabe Tsutomu.

рацем
неспе-
цифич.

"Chem Phys" 1975, 8, N1-2,
201-207 (англ)

(см NH₃; III)

* 4 - 8336

1975

H₂O

Peinel Gustav

"Mot. Phys"
1975, 29 N2, 641-3

pacem
M.

Pacem. guncel. id. id.
ma

H20

1975

Perrizo Jerry J.

u.k. Champ

Diss Abstr Int B 1975,
35(8) 4098

(see NO; III)

H₂O

1975

68505n Infrared spectrum and structure of water in inert gas matrixes. Pham Van Huong; Cornut, Jean C. (Lab. Spectrosc. Infrarouge, Univ. Bordeaux I, Talence, Fr.). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1975, 72(4), 534-6 (Fr). By using a high-resoln. spectrometer with negligible background noise, measurements of the ir spectra of water in N₂ matrixes at 16-20°K and Ar matrixes at 20°K were made as functions of the water concn. and annealing of the matrix at 35°K. The obsd. bands were assigned to the vibrations of the free and assocd. O-H bonds in water mols. in various degrees of H-bonding: (a) both H atoms free [monomer, open proton-acceptor dimer (i.e., only the O atom H-bonded)]; (b) 1 O-H bond free [open donor dimer with the O atom free and 1 H atom free, cyclic dimer, oligomer]; and (c) assocd. O-H (open dimer, oligomer assocd. with 2 neighboring water mols., cyclic dimer, oligomers assocd. with 3 neighboring water mols., tetraassocd. multimers]. The waveno. assigned to a given O-H bond was generally larger (by 1 to 10 cm⁻¹) in the Ar than in the N₂ matrixes.

И. К. Череп

В. А. Мухоморова

Л. А. 1975. 83. 28

60219.8721
TC, Ph, Ch

25071

H₂O

1975

45-11489

Polák R., Kavan J.

On the nature of localized orbitals in some σ - and π -electron systems.

"Collect.Czech.Chem.Commun", 1975, 40, N 12,
3743-3750 (англ.)

0553 ББК

534 536

5 4 5

ВИНИТИ

OH_2

1975

Pope J. A.

"Mol Phys" 1975, 29,
N2, 599 - 611 (англ.)

Энергия
корреляции

(см H₂; III)

(геометр)
 H_2O
 H_3^+
 CH_2O
 $HNCO$
 CH_5^+
 $C_3H_5^+$
9/1976 N2

2 Д171. Оптимизация геометрии в неэмпирической теории молекулярных орбиталей. Poppinger Dieter. Geometry optimization in ab initio molecular orbital theory. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 34, № 2, 332—336 (англ.)

На примере расчета методом ССП МО ЛКАО в базе сгруппированных гауссовских ф-ций ОСТ-ЗГФ ряда простых молекул (H_2O , H_3^+ , CH_2O , цикло- $HNCO$, CH_5^+ , $C_3H_5^+$) сопоставлены различные методы оптимизации геометрии в применении к неэмпирич. расчетам. Сравнивались два градиентных квазиньютоновских метода и два метода линейного поиска без вычисления производных. В квазиньютоновских методах производные молекулярных интегралов вычислялись численно методом центральных разностей. Выбор шага вдоль одномерного направления осуществляется с помощью параболич. интерполяции. Отмечено, что уточнение длины шага приводит к уменьшению общего числа итераций и следовательно к уменьшению числа вычислений градиента, но требует большего числа вычислений ф-ции. Квазиньютоновские методы оказались особенно эффективны в тех случаях, когда внутренние координаты молекулы сильно связаны между собой.

А. Багатурьянц

⊗ (45)

1975

1975

 H_2O O_3 O_2

расчет
коэффици.
поглощ.
расчет спектров

Ф 1976 N 4

4 Д404. Спектральный анализ коэффициентов поглощения H_2O , O_3 и O_2 в длинноволновой ИК-области в стратосфере. Rabache P., Rebours B. Spectral analysis of absorption coefficients of H_2O , O_3 and O_2 in the far infrared in the stratosphere. «Infrared Phys.», 1975, 15, № 3, 179—188 (англ.)

Выполнен расчет коэф. поглощения газообразных H_2O , O_3 и O_2 в области $0-200 \text{ см}^{-1}$. При описании контуров учтен только ударный механизм уширения, который приводит к дисперсионной форме линий. Для H_2O частоты, интенсивности и коэф. уширения заимствованы из литературных данных. Для озона частоты, рассчитанные по ф-лам асимметричного волчка, исправлены на нежесткость молекулы в приближении симметричного волчка, интенсивности вычислены по матричным элементам асимметричного волчка, коэф. уширения, принятые независимыми от J и τ и пропорциональными $V T$, оценены по данным для колебательно-вращательных спектров. Для кислорода рассчитана интенсивность магнитного дипольного спектра, принятые

(42) ☒

коэф. уширения считались не зависящими от т-ры. Конц-ия изученных молекул в стратосфере оценена по литературным данным. Приведены рассчитанные спектры. Вклад в поглощение озона является определяющим в ИЧ-области. Библ. 21. М. В. Тонков



51111.6013

Ch, Ph, TC

30526 GR

24

H₂O

1975

*4-10356

Raimondi M., Tantardini G.F., Simonetta M.
Influence of the basis set and convergence in ab-initio valence-bond calculations.

"Mol. Phys.", 1975, 30, N 3, 797-808

(см. LiH; III)

(англ.)

0493 пик

4 8 5

ВИНИТИ

464 465

1975

 H_2O

15 Б285. Простая, надежная модель для описания деформационной моды воды. Rogovin D., Tigelaar H., Sargent M., I. A simple, reliable model of the bending mode of water. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 31, № 1, 147—153 (англ.)

Предложена простая и надежная модель для описания деф. кол. молекулы воды, использующая потенциал Морза. Модель хорошо предсказывает колебательно-вращательную структуру полосы ν_2 и ее обертонов.
По резюме

X 1975 N 15

1975

 H_2O (ν_2)

161986j Simple, reliable model of the bending mode of water. Rogovin, D.; Tigelaar, H.; Sargent, M., III. (Opt. Sci. Cent., Univ. Arizona, Tucson, Ariz.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 31(1), 147-53 (Eng). A simple, reliable model of the bending mode vibration of the water mol. based on the Morse oscillator is presented. The model yields accurate predictions of the rotation-vibration level structure in the various ν_2 bands as well as the geometric structure of the ground state.

C.A. 1975. 82 N 24.

H_2S

H_2Se

H_2Te

JnF

$JnCl$

$JnBr$

JnI

Bcl

$Alcl$

$Gacl$

$Tlcl$

H_2O

1975

19 Б30. Релятивистские расчеты молекул в модели Дирака—Слейтера. Rosen A., Ellis D. E. Relativistic molecular calculations in the Dirac—Slater model. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 8, 3039—3049 (англ.)

Предложен метод расчета энергий и волновых функций молекул, использующий релятивистский гамильтониан Дирака—Слейтера. Базис четырехкомпонентных волновых функций получен из атомных волновых функций Дирака—Слейтера. Для вычисления орбитальных энергий и волновых функций молекул применен дискретный вариационный метод (ДВМ). Представлены результаты для ряда молекул: H_2X ($X=O, S, Se, Te$), InX ($X=F, Cl, Br, J$), XCl ($X=B, Al, Ga, Tl$). Проведено сопоставление с результатами нерелятивистских расчетов, использовавших ДВМ и численные волновые функции Хартри—Фо-

(расчет ϵ_i, J)

(11) ☒

x/1975 N19

ка—Слейтера, и др. нерелятивистских расчетов. Проанализированы релятивистские сдвиги уровней и спин-орбитальное расщепление. Теор. энергии ионизации сравниваются с экспериментальными ПИ. В целом получено хорошее согласие между эксперим. и теор. энергиями связи валентных уровней, вычисленными с помощью процедуры переходного состояния. Большинство вычислений проведено в миним. базисе. Для H_2S проведены также вычисления в расширенном базисе. По сравнению с результатами для миним. базиса энергии валентных уровней изменились на десятые доли эв. Резюме

оттиск 3361

1975

 H_2O

2 Д147. Неэмпирические исследования методом ССП и КВ основного состояния молекулы воды. Сравнение базисов СОГТ и ОСТ вблизи хартри-фоковского предела. Rosenberg Bruce J., Shavitt Isaiah. Ab initio SCF and CI studies on the ground state of the water molecule. I. Comparison of CGTO and STO basis sets near the Hartree—Fock limit. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 5, 2162—2174 (англ.)

(м.п.)

Методом ССП МО ЛКАО в шести базисах сгруппированных орбиталей гауссовского типа (СОГТ) и в четырех базисах орбиталей слэтеровского типа (ОСТ), а также методом конфигурационного взаимодействия (КВ) с учетом всех однократно и дважды возбужденных конфигураций вычислены электростатич. силы, действующие на ядра (по теореме Гельмана — Фейнмана), дипольный и квадрупольный моменты, тензоры магн. экранировки, магн. восприимчивости и квадрупольного взаимодействия, а также парные корреляционные энергии для основного состояния (1A_1) молекулы воды. Во всех расчетах длины связей О—Н и валентные углы

Ф 1946 №2

$\text{H}-\text{O}-\text{H}$ фиксировались и принимались равными $0,95839 \text{ \AA}$ и $104,45^\circ$ соответственно. Найдено, что полная энергия, вычисленная в наилучшем по длине базисе ($-76,064226$ ат. ед.) всего на $0,003$ отличается от предельной хартри-фоковской. Корреляционная энергия, вычисленная методом КВ позволяет учесть $74,5\%$ полной корреляционной энергии. Двумя способами найдены потенциалы ионизации (ПИ) с трех верхних занятых уровней ($1b_1$, $3a_1$ и $1b_2$): 1) из расчетов основного состояния по теореме Купманса; 2) из расчетов H_2O^+ в соответствующих возбужденных состояниях (2B_1 , 2A_1 и 2B_2). Найдено, что купмансовские ПИ примерно на 1 эв больше экспериментальных. ПИ, вычисленные вторым способом, на 1 эв меньше экспериментальных. Наилучшее согласие получено при вычислении ПИ вторым способом с учетом КВ (отличие от экспериментальных ПИ $0,2$ эв.). Вычисленные значения одноэлектронных свойств согласуются с экспериментальными (отклонение $5-10\%$).

В. А. Корсунов

H₂O

Rosenberg M.

1975

"J. Chem Phys" 1975, 63,

paper n^o 12, 5354-5361 (англ)

кв. мех.

(см №; III)

H₂O

1975

9 Д390. О ширинах и интенсивностях субмиллиметровых линий поглощения вращательного спектра водяного пара. Рядов В. Я., Фурашов Н. И. «Изв. высш. учеб. заведений. Радиофизика», 1975, 18, № 3, 358—370 (рез. англ.)

Приведены эксперим. данные о коэф. поглощения водяного пара в резонансных областях линий, соответствующих переходам $1_{-1}-1_1$ ($\lambda_{ij}=0,538$ мм) и 2_2-3_{-2} ($\lambda_{ij}=1,635$ мм). Измерения выполнены в атмосферном воздухе с использованием ламп обратной волны и пневматич. приемников ОАП-2. По измеренным контурам линий поглощения определены их ширины, интенсивности и резонансные длины волн. Дана сводка полученных разными авторами эксперим. значений полуширин и интегр. интенсивностей (сил) вращательных линий H₂O в диапазоне $\lambda > 0,05$ мм и проведено сравнение их между собой и с теоретич. расчетами. Автореферат

ф. 1975 № 9

1975

H₂O

Sambe H; et al.

J. Chem. Phys.,

м.п. сд.поси.

реда. сфисс.

1975, 62 N3, 1122-26.

(сис. CO; III)

H₂O

1975

Santakumari B.
Babu Joseph K.

параметры
асимметрии
атомов и
связей.

"Indian J Pure and
Appl Phys" 1975, 13,
n 5, 294-298 (англ.)

(англ. H₂Se, III)

60129.8496

40892

1975

Ch, B, Ph, TC, MGU, Gph

H_2O Раман-спектр

3713

Sceats Mark, Rice Stuart A., Butler J.E.

The stimulated Raman spectrum of water
and its relationship to liquid structure.

"J.Chem.Phys.", 1975, 63, N 12, 5390-5400

(англ.)

0550 пик

523 528

ВИНИТИ

60226.4816

Ch, Ph, TC

35223

 H_2O (до)

1975

3838

Schlegel H.Bernhard, Wolfe Saul,
Bernardi Fernando. Ab initio computation
of force constants. II. The estimation of
dissociation energies from ab initio SCF
calculations. "Can. J. Chem.", 1975, 53,
N 23, 3599-3601 (англ., рез. франц.)

(см. H_2O (III))

545 546

0559 БИВНИТИ

51118.1862

TC, Ch, Ph

H₂O (суд. ное)
40892

1975

* 4-10345

Schlegel H. Bernhard, Wolfe Saul, Berna-
rdi Fernando. Ab initio computation of
force constants. I. The second and third
period hydrides.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 8, 3632-
3638

(суд. HF; III)

(англ.)

0489

476 478

4 1 1

ВИНИТИ

H₂O

1975

Schwarz W. H. E.

(энергия
потерь кин.
ЭН.
и. и.)

Chem. Phys., 1975, 11,
N 2, 217 - 28.

(с к HCl) III

H₂O

1975

Semkow A. M.
Suthers R. A.

no members

no members

"Chem. Phys. Lett" 1975, 32,
N1, 116-122 (annu)

(see Lett. III)

1975

H₂O

расчет

19 Б36. Эффективный метод учета большого количества конфигураций в расчетах методом конфигурационного взаимодействия. Segal Gerald A., Wetmore Ross W. An efficient method for large scale configuration interaction calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 3, 556—560 (англ.)

Предложен способ учета большого числа конфигураций в расчетах электронных систем методом конфигурац. взаимодействия, не требующий большого объема памяти ЭВМ. Пространство конфигураций делится на два подпространства (a и b), одно из к-рых (a) натянуто на наиболее существенные конфигурации. Решения уравнения Шредингера, полученные в подпространстве a , уточняются с помощью ряда теории возмущений Бриллюэна—Вигнера, модифицированного таким образом, что в ходе

x 1975 N 19



теорет. спектр.
расчет молекулы.

итерац. решения ур-ний, необходимы лишь матрицы размерности подпространства a . Развиваемая методика применена для расчета основного состояния 1A_1 и возбужденных состояний симметрии 1B_1 молекулы воды на базе сгруппированных гауссовых функций. В состоянии 1B_1 размерность подпространства a составляла 40, а размерность полного пространства конфигураций 1862. Получены след. результаты: энергия возбуждения в состояние: 1B_1 в подпространстве a составляет 12,75 эв, после учета остальных конфигураций по предложенной методике получено значение 11,46 эв, к-рое хорошо согласуется с эксперим. значением 11,37 эв.

А. Дементьев

H₂O

7 Б25. Влияние [учета] электронной корреляции на [рассчитанный] комптоновский профиль молекулы H₂O. Smith V. H., Jr, Diercksen G. H. F., Kraemer W. P. The influence of electron correlation on the compton profile of H₂O. «Phys. Lett.», 1975, A 54, № 4, 319—320 (англ.)

1976

Для основного состояния молекулы H₂O сравниваются изотропные комптоновские профили $J(q)$, рассчитанные при эксперим. геометрии ядер с волновой функцией метода Хартри — Фока (ХФ) и с функцией метода конфигурац. взаимодействия (КВ), включающей все одно- и двукратно возбужденные конфигурации. Использован базис сгруппированных гауссовых функций; значения полной энергии, полученные в приближениях ХФ и КВ, равны —76,05198 и —76,28256 ат. ед. соотв. Указано, что $J(q)$, рассчитанные в обоих приближениях, согласуются с эксперим. данными в пределах точности последних. Интервал $0 \leq q \leq 8$ разбивается на 3 области ($0 \leq q \leq 0,45$; $0,45 \leq q \leq 1,6$; $q > 1,6$), в к-рых $J(q)$, вычислены в приближении КВ соотв. больше, меньше и слегка больше, чем результат расчета в приближении ХФ. Отмечено, что электронная корреляция дает заметный вклад в $J(q)$, однако величина этого эффекта меньше колебаний $J(q)$, вызываемых изменением базиса на уровне приближения ХФ.

А. В. Абраменков

X 1976 M7

1975

 H_2O H_2O^+

расчет
равнов. геом.
 V_i , эн. иониз
и.

ф. 1975 № 8

8 Д157. Расчет H_2O и H_2O^+ с использованием ограниченного базисного набора молекулярных орбиталей. Smith Jack A., Jørgensen Poul, Øhrn Yngve. A limited basis molecular orbital calculation on H_2O and H_2O^+ . «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 4, 1285—1288 (англ.)

Проведен МО ССП расчет следующих состояний H_2O^+ : 2B_1 , 2A_1 , 2B_2 , 2A_1 , 2A_1 и основного 1A_1 -состояния H_2O . Использовался базисный набор МО из работы Неймана и Московница (РЖФиз, 1969, 3Д117). Рассчитаны параметры равновесной геометрич. конфигурации, силовые постоянные, основные колебательные частоты, энергии ионизации молекулы H_2O и электрические дипольные моменты. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными и данными более точных расчетов.

А. Зембеков

(+1) ☒

51110.6609

96201

1975

TC, Ch, Ph, MGU

H₂O

* 3-10326

Siegbahn H., Asplund L., Kelfve P.

The Auger electron spectrum of water

vapour. "Chem. Phys. Lett.", 1975, 35,

N 3, 330-335

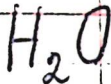
(англ.)

461 462

480

0438-1111
ВИНИТИ

1975



(и.и.)

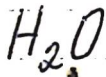
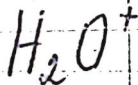
(+1)

X 1975 N 16

16 Б30. Расчет H_2O и H_2O^+ по методу молекулярных орбиталей в ограниченном базисе. Smith Jack A., Jørgensen Poul, Øhrn Yngve. A limited basis molecular orbital calculation on H_2O and H_2O^+ . «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 4, 1285—1288 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение H_2O в основном состоянии и H_2O^+ в состояниях 2B_1 , $^2A_1(3a_1)$, 2B_2 , $^2A_2(2a_1)$ и $^2A_1(1a_1)$. Использован базис гауссовских функций O/10s5p1d/H/4s1p) сгруппированный в O/5s3p1d/H/2s1p. Рассчитаны Пв потенциальной энергии, равновесная геометрия, силовые постоянные, дипольные моменты. Из анализа нормальных координат с помощью найденных значений силовых постоянных рассчитаны соответствующие частоты нормальных колебаний H_2O и H_2O^+ . Энергии вертикальных переходов из основного состояния H_2O в указанные состояния иона H_2O^+ сопоставлены с экспериментом.

Э. Герман



Kb. irr.
fraction

1975

atomic limited basis molecular orbital calculations on water and water(1+). Smith, Jack A.; Joergensen, Poul; Olsen, Torger (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, Fla.). *J. Chem. Phys.* 1975, 62(1), 1285-8 (Engl). An MO-SCF calcn. on a water of H_2O^+ and on the ground state of H_2O gave mol. geometries, force consts., and ionization energies for H_2O^+ and H_2O and dipole-moment derivs. and relative ir intensities for H_2O in good agreement with the available exptl. results and with published more sophisticated calcns.

IX

(+1)

C.A. 1975. 83 NY

1975

 H_2O

1) 4 Д464. Пространственный и спектральный анализ световых явлений малой длительности, сопровождающих реакции окисления и взрыва углеводородов при низкой температуре. Sochet Louis-René, Tourbez Hervé. Analyse spectrale et spatiale des phénomènes lumineux de courte durée qui accompagnent les réactions d'oxydation et de combustion de basse température des hydrocarbures. «С. г. Acad. Sci.», 1975, С 281 № 11, 343—346 (франц.; рез. англ).

С помощью многоканального электронно-оптич. спектрометра исследовано окисление пропана ($T \sim 300^\circ$ $p \sim 500$ мм рт. ст.). Спектрометр состоял из призматического спектрографа, на выходе которого был помещен ЭОП. Спектрограмма с экрана ЭОП или фотографировалась, или анализировалась телевизионной системой. временное разрешение $\sim 1/128$ сек. Обнаружено не

флуоресц.
($\alpha_0 - \alpha_1$)

Ф 1976 NY

сколько стадий возгорания пламени: два «холодных» пламени и, наконец, норм. пламя. Прослежено за изменением размеров пламени. Свечение «холодных» пламен обусловлено в основном флуоресценцией формальдегида. Обнаружены новые полосы флуоресценции формальдегида в области 5245—5749 Å, которые связаны с системами полос $a_0—a_1$.

А. В. Бобров

H₂O

43-9240

1975

поверхност.

поверхности

85227r Analytical potentials for triatomic molecules from spectroscopic data. Sorbie, K. S.; Murrell, J. N. (Sch. Mol. Sci., Univ. Sussex, Brighton, Engl.). *Mol. Phys.* 1975, 29(5), 1387-407 (Eng). Anal. potential energy surfaces for the ground states of stable triat. mols. were constructed which give the correct equil. properties and asymptotic behavior for the disson. limits. The potential surface of H₂O was detd. The predicted reaction coordinate for the C_{2v} insertion of O(¹D) into H₂ agreed with literature calcs.

вблизи
границы
предела

С.А. 1975, 83 и 10

50801.6747

96601

1975

Ph, Ch, TC, MGU

H₂O

AB-9526

Spears David P., Fischbeck Helmut J.,
Carlson Thomas A. Satellite structure
in the photoelectron spectra of the core
electrons of NO, N₂O and H₂O.

"J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.", 1975, 6, N 6, 411-420

(см. NO; III)

(англ.)

0425 пик

391 391

0417

ВИНИТИ

H_2O

(сильн. нест)

X-3-9519

1975

23 Б75. Применение метода Монте-Карло для вычисления ангармонических силовых постоянных. Ангармонические потенциальные функции некоторых нелинейных симметричных трехатомных молекул. Speirs G. K., Špirko V. Application of the Monte Carlo method to anharmonic force constant calculations. The anharmonic potential functions of some nonlinear symmetrical triatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 1, 104—123 (англ.)

По эксперим. данным для частот колебаний, X-постоянных ангармоничности и α -постоянных колебательно-вращательного взаимодействия методом Монте-Карло вычислены квадратич., кубич. и квартичные силовые коэф. для молекул H_2O (D_2O), H_2S , $^{14,15}NO_2$, SO_2 , OF_2 и ClO_2 . Расчеты выполнены для наиболее общего квартичного силового поля с 15 ангармонич. коэф. и

X 1975 N 23

(+6) ☒

39-11-4514

для поля Пливы с 5 параметрами. Для всех молекул, за исключением H_2O , найдены единственные наборы ангармонич. коэф., удовлетворительно воспроизводящие все эксперим. данные по α - и X -постоянным. Для H_2O найдены 3 набора ангармонич. коэф., к-рые удовлетворительно воспроизводят данные по X -постоянным, но приводят к одинаково плохому согласию с данными по α -постоянным. Отмечено, что для всех молекул (за исключением H_2O) силовое поле Пливы является хорошим приближением к наиболее общему полю. М. Р. Алиев

51103.1272

Ch, Ph, TC, MGU

96201

P. I.
T. I.

H_2O (список)

1975

3427

Steen H. B. Radioluminescence of H_2O
and D_2O ice. spectral characteristics.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 35, N4, 508-510

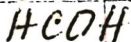
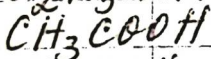
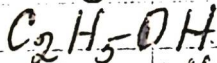
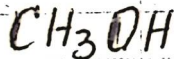
(англ.)

0479 смк

465

465 4 7 1

ВИНИТИ



X 1975 № 23

(4 Натомиз, ссл, наст., 7с) 1975

23 Б58. О расчете кислородсодержащих соединений методом МЧПДП/2'. Strohbusch Frank, Bratan Silke. Über die Berechnung von Sauerstoffverbindungen mit den MINDO/2'-Verfahren. «Z. Naturforsch.», 1975, 30a, № 5, 623—626 (нем., рез. англ.)

Описана методика включения интегралов проникновения в выражение для отталкивательного члена полной энергии в методе ССП МО ЛКАО в валентном приближении МЧПДП/2' и предложена соответствующая параметризация для кислородсодержащих простых углеводородов. По этой методике рассчитаны теплоты атомизации, равновесные длины связей $\text{O}-\text{H}$ и их силовые постоянные вал. кол. для H_2O (I), H_2O_2 , метилового и этилового спиртов, уксусной, муравьиной (II) и щавелевой к-т, формальдегида, ацетона, ацетальдегида, метилформата и H-связанных димеров I и II. Полученные результаты гораздо ближе к опытным, чем данные расчетов по стандартной схеме МЧПДП/2'.

В. Л. Лебедев

(46) 18

#4 - 9519

1975

H₂O

ИД156. Применение метода Монте-Карло для вычисления ангармонических силовых постоянных. Ангармонические потенциальные функции некоторых нелинейных симметричных-трёхатомных молекул. Speirs G. K., Spirko V. Application of the Monte Carlo method to anharmonic force constant calculations. The anharmonic potential functions of some nonlinear symmetrical triatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 1, 104—123 (англ.)

(М.Н.)

(+6) X

По эксперим. данным для частот колебаний, X-постоянных ангармоничности и α -постоянных колебательно-вращательного взаимодействия методом Монте-Карло вычислены квадратичные, кубические и квартичные силовые коэф. для молекул $\text{H}_2\text{O}(\text{D}_2\text{O})$, H_2S , $^{14,15}\text{NO}_2$, SO_2 , OF_2 и ClO_2 . Расчеты выполнены как для наиболее общего квадратичного силового поля с 15 ангармонич.

ф. 1975 № 11

коэф., так и для поля Пливы с 5 параметрами. Для всех молекул, за исключением H_2O , найдены единственные наборы ангармонич. коэф., удовлетворительно воспроизводящие все эксперим. данные по α - и X-постоянным. Для H_2O найдены 3 набора ангармонич. коэф., которые удовлетворительно воспроизводят данные по X-постоянным, но приводят к одинаково плохому согласию с данными по α -постоянным. Отмечено, что для всех молекул (за исключением H_2O) силовое поле Пливы является хорошим приближением к наиболее общему полю.

М. Р. Алиев

H₂O

1975

Stillinger Frank H.

curr. noem.

Isr. J. Chem 1975,
14, 130-7 (eng)



(cur CH₄; III)

50407.7248
Ch, Ph, Ex-C,
TC

40892

H₂O

1975

3198

Switalski Jurgen D., Schwartz Maurice E.
Valence electron studies with Gaussian-
based model potentials and Gaussian basis
functions. IV. Application to molecular
systems containing first row atoms.

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 4, 1521-1525

(англ.)

306 311 3 3 0

0338

ВИНИТИ

H₂O

расчет

16 Б34. Расчет основного состояния молекулы воды методом модифицированных электронных пар с точными интегралами. Takahashi Masaharu, Tanaka Kiyoshi, Honjo Nobumitsu, Ohno Kimio. Modified electron-pair calculation on the ground state of the water molecule with accurate integrals. «J. Phys. Soc. Jap.», 1975, 38, № 2, 532—533 (англ.)

Проведен расчет основного состояния молекулы H₂O методами связевых орбиталей, модифицированных электронных пар (МЭП) и конфигурац. взаимодействия с ограниченным числом конфигураций (7 и 12). Остов из электронов внутренней оболочки и двух неподеленных пар во всех методах принят фиксированным. В отличие от пред. расчета в рамках этих же приближений (РЖХим, 1960, 76159) использованы более точные интегралы от слейтеровских функций как с принятыми ранее, так и оптимизированными показателями экспонент. Подтвержден вывод о том, что в приближении МЭП получаются результаты, к-рые лучше, чем результаты метода ССП на заданном базисе и близки к таковым метода КВ с ограниченным числом конфигураций.

А. В. Немухин

X 1975 N 16

1975

 H_2O

8Д158. Расчет методом модифицированных электронных пар основного состояния молекулы воды с помощью точных интегралов. Takahashi Masaharu, Tanaka Kiyoshi, Honjo Nobumitsu, Ohno Kimio. Modified electron-pair calculation on the ground state of the water molecule with accurate integrals. «J. Phys. Soc. Jap.», 1975, 38, № 2, 532—533 (англ.)

расчет
основного
состояния.

Приведены результаты расчетов полной энергии основного состояния молекулы H_2O и ее энергии диссоциации методом модифицированных электронных пар (МЭП) и методом конфигурационного взаимодействия электронов. В качестве базиса волн. ф-ций использовался миним. базис слэтеровских атомных орбиталей и слэтеровские орбитали с оптимизированными показателями экспонент. Значения молекулярных интегралов перекрывания брались по уточненным данным работы (РЖФиз, 1970, 9Д150); последнее несколько улучшило значение полной энергии молекулы H_2O по сравнению с ранее имевшимися результатами. Из приводимых для энергии данных следует, что расчет

Ф 1975 NR

методом МЭП оказывается проще и точнее, чем с помощью волн. ф-ций самосогласованного поля; отличие вычисленной энергии диссоциации молекулы H_2O разными методами от эксперим. значения (10,06 эв) достигает 100%, а для полной энергии молекулы (эксперим. значение составляет $\sim 76,48$ ат. ед.) доходит до 0,9 ат. ед.

А. Радциг

1975

 H_2O N_2O

(vi)

①

11 Д405. Интенсивность линий H_2O и N_2O в области 1900 см^{-1} . Toth Robert A., Farmer Crofton B. Line strengths of H_2O and N_2O in the 1900 см^{-1} region. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 182—191 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразных H_2O и N_2O в области $1820—2000\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,15\text{ см}^{-1}$. Приведены частоты колебательно-вращательных линий и их интенсивности, определенные методом эквив. ширины. В спектре паров воды наблюдаются линии полосы ν_2 $H_2^{16}O$, $H_2^{17}O$ и $H_2^{18}O$ и линии горячего перехода $2\nu_2—\nu_2$. В спектре N_2O измерены интенсивности R- и P-линий и интегр. интенсивность Q-ветви полосы $\nu_1+\nu_2^1$, а также интенсивность Q-ветви полосы $\nu_1+\nu_2—\nu_2$. Найденные интенсивности линий H_2O ниже приводимых в литературе. Интенсивности линий N_2O отличаются от рассчитанных для жесткого волчка множителем $1+\xi m$, где $\xi = -0,0107$. Библ. 17. М. В. Тонков

Ф. 1975 N 11

H₂O

1975

Toth Robert A

encomp.

Gov. Rep. Announce Index
(U.S.) 1975, 75(23) 13

(see CH₄; III)

50319.7667

Ph, TC

30088

H₂O

1975

См. Исправление на странице
- Errata. "J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer", 1975, 15, N 2, 203

(англ.)

0325 пик .

294 302

3 17

ВИНИТИ

рубрик. Категория оценок набор

G. D. T. TEJWANI and P. VARANASI, "Approximate Mean Absorption Coefficients in the Spectrum of Water Vapor Between 10 and 20 microns at Elevated Temperatures", *JQSRT* 10, 373 (1970).

There is a typographical error in equation (11). The factor $\left[\frac{1 - \exp(-hc\omega_2/kT_0)}{1 - \exp(-hc\omega_2/kT_1)} \right]$ on the right hand side of equation (11) should read $\left[\frac{1 - \exp(-hc\omega_2/kT_1)}{1 - \exp(-hc\omega_2/kT_0)} \right]$. Equations (6) and (7) are also incorrect. In both of these equations, the denominator on the right hand side should be pQ , instead of pQ . Consequently, the above-mentioned factor should be removed from equation (11). Therefore, all calculated results for mean absorption coefficients in Table 1 and Figs. 1-4 and for emissivities in Figs. 5-8 should be multiplied by $\left[\frac{1 - \exp(-hc\omega_2/300k)}{1 - \exp(-hc\omega_2/kT_1)} \right]$.

The new results should be in better agreement with the experimental values in Figs. 4-8.

The following errors appear in the paper "Error Introduced by Application of the Classical Approximation to X-ray Spectra in the Spectral Thermometry of a Seeded Deuterium Thermonuclear Plasma" by B. V. ROBOUCH and P. GRATREAU (*JQSRT* 14, 211-219):

- (1) the equation at the very bottom of p. 217: " $S_H = \dots$ " has the exponentials e^x appearing as x twice in the brackets;
- (2) the expression for $C_0 = \dots$ on p. 218, paragraph " $\alpha_i: \dots$ " should be separated by a comma (,) after Z^2 from " $g_{bl}(n, u)$ the averaged ..."

13-9279

1975

H₂O

- 1) 11 Д406. Положение линий H₂O в области спектра 1,33—1,45 мк. Toth Robert A., Margolis Jack S.
) Line positions of H₂O in the 1.33 to 1.45 micron region.
) «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 229—251. (англ.)

Спектр поглощения $\bar{\nu}$ колебательно-вращательных полос H₂O в области 6950—7500 см⁻¹ исследован с помощью вакуумного спектрометра с разрешением 0,07 см⁻¹. Спектры регистрировались при давлении H₂O в моноходовой кювете от 1 до 9 мм рт. ст. и оптич. пути 8—32 м. Приведены результаты измерений положения центров линий, их интенсивностей, а также даны значения квантовых чисел верхнего и нижнего состояний и вращательные энергии нижнего уровня для каждого перехода. Точность определения положения центра линий: 0,007 см⁻¹ для неперекрываемых линий и 0,01—0,015 см⁻¹ для перекрываемых. Проведено сравнение результатов измерений с расчетными данными Бенедикта. Библ. 5.

1,33-1,45 мк.

Ф. 1975
 № 11

X4-9279

1975

H₂O

J. i. m. n.

23 Б325. Положение полос поглощения H₂O в области 1,33—1,45 мк. Toth Robert A., Margolis Jack S. Line positions of H₂O in the 1.33 to 1.45 micron region. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 229—

Получен спектр поглощения с высоким разрешением H₂O в области 6950—7500 см⁻¹. Изучена структура пятиг полос, две из к-рых принадлежат к типу A [(101) и (021)], а три — к типу B [(200), (002), (120)]. Проведено отнесение частот и вычислены вращательные постоянные. В спектре обнаружено несколько полос, имеющих аномально большую интенсивность, обусловленную ферми-резонансом и кориолисовым взаимодействием.

Б. Г. Антипов

X1975N23

H₂O

*4-9279

1975

check

177628c. Line positions of water in the 1.33 to 1.45 micron region. Toth, Robert A.; Margolis, Jack S. (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 55. 55(1-3), 229-51 (Eng). Five bands of H₂O occurring at 6600-7500 cm⁻¹ were recorded with a vacuum ir spectrometer with spectral resolu. of 0.07 cm⁻¹. Measurements and quantum assignments are given and upper-state levels are detd. Two of the bands, (101) and (021), are type A with origins at 7249.811 and 6671.51 cm⁻¹, resp. The 3 other bands, (200), (002), and (110), are type B with origins at 7201.540, 7445.07, and 6775.10 cm⁻¹, resp.

C.A. 1975. 82 N26

H₂O

*43-10358

1975

123615a Spectrum of water (oxygen-18) in the 2900 to 3400 cm⁻¹ region. Toth, Robert A.; Margolis, Jack S. (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 57(2), 236-45 (Eng). Measurements of line center positions of H₂¹⁸O in the 2900 to 3400 cm⁻¹ region were made at high resolution. This region contains absorptions of the (020) band and P-branch absorptions of the (100) and (001) bands of H₂¹⁸O. Values of the energy levels of the (020) state were detd. in which ground state energy levels derived by P. E. Fraley et al. (1969) and J. G. Williamson et al. (1971) were used in the anal. A new set of ground state levels was obtained by an iterative procedure.

(u.n)

C. A. 1975. 83 n 14

1975

 H_2O

(ин)

4 Д403. Спектр H_2O в области $2900-3400\text{ см}^{-1}$.
Toth Robert A., ~~Margolis~~ Jack S. Spectrum of
 $H_2^{18}O$ in the 2900 to 3400 см^{-1} region. «J. Mol. Spec-
trosc.», 1975, 57, № 2, 236—245 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения паров воды в об-
ласти $2900-3400\text{ см}^{-1}$ при давл. $2-8\text{ мм рт. ст.}$ в слое
 $8-40\text{ м}$ с разрешением $0,04-0,07\text{ см}^{-1}$. Образец содер-
жал 50% обогащенной изотопом ^{18}O воды. Приведены
частоты наблюдаемых колебательно-вращательных ли-
ний, отнесенных к полосам ν_1 , ν_3 и $2\nu_2$ и полученные
спектры. Рассчитаны энергии вращательных уровней
молекулы $^{18}H_2O$ для чисел J от 0 до 12 в основном и
возбужденном $2\nu_2$ колебательных состояниях. Библ. 7.

М. В. Тонков

*4-10628

1975

H₂O

7 Б24. Корреляционные диаграммы электронных состояний H₂O и фрагментов. Tsurubuchi Seiji. Correlation diagrams for electronic states of H₂O and fragment species. «Chem. Phys.», 1975, 10, № 2—3, 335—344 (англ.)

(м.н.)

На основании корреляц. диаграмм одноэлектронных уровней, правил корреляции многоэлектронных термов и результатов неэмпирич. расчетов H₂O в качеств. форме построены Пв потенциальной энергии H₂O, отвечающие синглетным и триплетным состояниям. Обнаруженные области квазипересечения Пв, а также их конеч. пересечения использованы для объяснения ряда закономерностей спектра возбуждения радикала ОН, отщепленного от H₂O при электронном ударе или фотопоглощении. Отмечено, что радикал ОН в состоянии A²Σ⁺ может возникать из триплетного состояния H₂O, причем во время разлета ОН и Н двухатомный фрагмент находится под действием большого момента сил. Последнее качественно объясняет сильное вращательное возбуждение ОН в низших колебательных состояниях терма A²Σ⁺.

Е. Е. Никитин

X 1976 N7

50917.8825
B, Ch, Ph, TC, MGU

раман спект
40392
1975
 $H_2O(тв)$ * 4-9767

Venkatesh C.G., Rice Stuart A., Bates
John B.

A Raman spectral study of amorphous solid
water.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 3, 1065-1071
(англ.)

40450 пик

422 424

ВИНИТИ

H_2O

1975

HDO

у

12 Д313. Некоторые оптические характеристики паров воды высокой плотности. Ветров А. А., Юхневич Г. В. «Оптика и спектроскопия», 1975, 39, № 3, 488—492

D_2O

у

В области 3500, 2600 и 1600 cm^{-1} измерены спектры поглощения вал. кол. паров H_2O , HDO и D_2O и деф. кол. паров H_2O с плотностью от 0,003 до 0,11 $г/см^3$. Выделено поглощение, обусловленное ассоциациями молекул воды. Определены абс. интенсивности полос поглощения мономеров и комплексов. Решением обратной спектральной задачи показано, что в парах воды при плотностях 0,11 $г/см^3$ присутствуют протонодонорные молекулы, образующие одну водородную связь. Автореферат

спектры
полащ.

ф. 1975 N 12

(+2) ☒

H₂O

1975

Bolkner P, et al.

"Chem Phys Lett" 1975,
31, N 3, 566-570 (over)

растрин
маленьки.

(all CH₄; III)

H₂O

SO₂

OCS

(u.n.)

* 4-9289

1975

J 177365s Variational calculation of vibration-rotation energy levels for triatomic molecules. Whitehead, R. J.; Handy, N. C. (Dep. Theor. Chem., Univ. Chem. Lab., Cambridge, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 55(1-3), 356-73 (Eng). A variational method was used to calc. the low-lying vibration-rotation energy levels of various triat. mols. The wave functions were expanded as a linear combination of products of polynomials of the normal coordinates multiplied by suitable spherical harmonics of the Euler angles. The mol. vibration-rotation Hamiltonians given by J. K. G. Watson (1968,1970) for nonlinear and linear mols. were employed. By using numerical integration, the method can be applied to any mol. for any form of the potential surface. Calcns. were carried out on the nonlinear triats. H₂O and SO₂ and the linear system OCS. Potential-energy surfaces expressed in terms of variables Δr_{12} , Δr_{13} , and $\Delta \theta$, where

(+2) ☒

C.A. 1975, 82, N26

Δr represents a change in bond length and $\Delta \theta$ a change in bond angle, were derived by many workers using perturbation theory and potential functions of this form were used in the calcs. The results for H_2O indicate that none of the surfaces employed are satisfactory. For the best surface, although the band origin for the (000)-(010) transition is within 4 cm^{-1} of the exptl. value, the band origins for the (000)-(100) and (000)-(001) transitions are in error by at least 60 cm^{-1} . The results for SO_2 are much closer to expt., which indicates that perturbation theory is more accurate for the potential surface detn. in this case. The results for OCS are similarly much closer to the exptl. values. This variational method is recommended as a means of investigating the quality of potential surfaces.

H₂O

1975

Williams Geoffrey R. J.

racem

ΔE

rel. rephaseog.

"Mol Phys" 1975
30, N4, 1005-1013
(1975)

(all CH₄; 119)

44-10364

1975

H₂O

Kb. rec.
pacem

209605j Self-consistent pair function study of the equilibrium bond angle of the water molecule. Wilson, Stephen; Gerratt, Joseph (Dep. Theor. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Mol. Phys.* 1975, 30(3), 789-95 (Eng). A min. basis set of Slater functions used to parametrize the orbitals gave an equil. H-O-H bond angle 104.27° with an ab initio pair function model (1975). The qual. valence-shell electron-pair repulsion theory of directed valence (Gillespie, R. J., 1970) is quant. justified.

C.A. 1975. 83 N26

* 5-10364

1975

 H_2O

3 Д118. Расчет равновесного угла между связями в молекуле воды методом самосогласованных парных функций. Wilson Stephen, Gerratt Joseph. A self-consistent pair function study of the equilibrium bond angle of the water molecule. «Mol. Phys.», 1975, 30, № 3, 789—795 (англ.)

Для вычисления равновесного угла между связями в молекуле воды использована простая неэмпирич. модель парных ф-ций. Расчет проводился в миним. базисе слэтеровских ф-ций. Вычисленное значение угла НОН ($104,27^\circ$) находится в хорошем согласии с экспериментом ($104,45^\circ$), в то время как ССП МО расчеты в ана-

логичном базисе дают значение $\angle \text{НОН} \approx 98^\circ$. Предложенная модель приводит к большой экономии времени счета по сравнению с расчетами ССП МО. Показана эффективность описания электронной структуры молекулы воды непосредственно в терминах локализованных орбиталей. Полученные результаты полностью согласуются с выводами качеств. теории направленных валентностей.

О. В. Сизова

X 1976 N3

расчет
равнов.
геометрии

1975

 H_2O

10 Д174. Исследование возбужденных состояний молекулы воды методом конфигурационного взаимодействия. Winter N. W., Goddard W. A., III, Bobrowicz F. W. Configuration interaction studies of the excited states of water. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 11, 4325—4331 (англ.)

Методом КВ произведен расчет 16 возбужденных (синглетных и триплетных) состояний молекулы H_2O , соответствующих переходам с МО $1b_1$ и $3a_1$ на ридберговские орбитали $3s$, $3p$. Всего в расчете учитывалось от 4000 до 6000 детерминантных ф-ций (для различных состояний). Результаты расчетов сравниваются с данными других авторов. Получено хорошее согласие с экспериментом.

В. И. Барановский

 (ϵ_i)

ф. 1975 N 10

1975

 H_2O

расчет
основных
и возбужден-
ных состояний

23 Б28. Исследование возбужденных состояний воды методом взаимодействия конфигураций. Winter N. W., Goddard W. A., III, Bobrowicz F. W. Configuration interaction studies of the excited states of water. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 11, 4325—4331 (англ.)

Методами ССП и взаимодействия конфигураций (ВК) рассчитаны основное и 16 возбужденных синглетных и триплетных состояний молекулы воды. Использовался набор сгруппированных гауссовых функций $4s2p/2s$, дополненный диффузными $3s$ - и $3p$ -функциями с показателем экспоненты 0,028 на атоме кислорода. Волновая функция каждого состояния в методе ССП получена из функции основного состояния возбуждением одного электрона с одной из двух верхних орбиталей на любую

X/1975 N 23

виртуальную, а в методе ВК эта функция включала все
одинарные и двойные возбуждения для соотв-щей функ-
ции ССП с каждой занятой орбитали кроме первой.
В результате сравнения рассчитанных и эксперим. энер-
гий возбуждения ΔE для 5 переходов сделан вывод, что
погрешность вычисления ΔE во всех случаях составляет
величину порядка 0,1 эв. Продемонстрирована зависи-
мость ΔE от включения в базис диффузных орбиталей
при условии использования метода взаимодействия кон-
фигураций. Сопоставлены результаты данного и преды-
дущих вычислений ΔE , проведенных различными неэм-
пирич. и полуэмпирич. методами. А. В. Немухин

50328.7201
Ch, TC

-H₂O 92073
(E₇)

1975

4-8368

Yamabe Shinichi, Kato Shigeki, Fujimoto
Hiroshi, Fukui Kenichi.
An MO study of the hydrogen bond
system of H₂O-HF.

"Bull.Chem.Soc.Jap.", 1975, 48, N. 1,
1-5
(англ.)

0328-714X

3 12 3 12 9 2 0

ВИНИТИ

50924.7232
Ph, TC, MGU

прорисовка ен. ледяной
92493

H₂O

1975

* 13-10018

Yamashita Iwao.

Crossed-beam experiment on rotational
population distribution of OH(A² Σ⁺)
split from H₂O by Lyman alpha photon
impact.

"J. Phys. Soc. Jap.", 1975, 39, N 1, 205-212

(англ.)

№ 470 - 0.455 гек № 460

427 427

0 4.17

ВИНИТИ

H_2O , H_2O , H_2O , CO_2 , N_2O 1975
(кв. мех. расчет.)

Моголов В.А., XI-4527

Ис. структура. химии, 1975, 16(2),
327-9.

Комплекс программ, предназначенный
для неэмпирических расчетов
молекулярных базисных функций комбина-
ционных...

С.А. 1975.83 п10. 875312 10

⊕ 10

H₂O

1975

Ferner M.,

J. Chem. Phys.,

1975, 62, 17, 2788-2799

энергия
связи D₀
геометрия
сил. поле.



(см H₂; III)