

ОН
ОД

1940

спектр
ЭПР

15 B254. Электронный парамагнитный резонанс двух-
атомных гидридов в газовой фазе. I. Сверхтонкое и
квадрупольное взаимодействие O^{17} в ОН и ОД. Car-
rington A., Lucas N. J. D. Electron resonance of ga-
seous diatomic hydrides I. ^{17}O hyperfine and quadrupole
interactions in OH and OD. «Proc. Roy. Soc. London»,
1970, A 314, № 1519, 567—583 (англ.)

В результате исследования спектров ЭПР радикалов
 $O^{17}H$ и $O^{17}D$ определены параметры магнитного сверхтон-
кого и электр. квадрупольного взаимодействий. Е. О.

X. 1940. 15

ОН

6 Д568. Магнитный резонансный спектр возбужденных колебательных состояний ОН и предсказание радиоастрономического спектра. Churg Antonie, Levy Donald H. The magnetic resonance spectrum of vibrationally excited OH and a prediction of the radioastronomy spectrum. «Astrophys. J.», 1970, 162, № 3, Part 2, L161—L165 (англ.) 1970

спектр

и.и.

С помощью микроволнового спектрометра исследован магн. резонансный спектр $^2\Pi_{3/2}$, $J=3/2$ вращательных уровней радикалов ОН для пяти колебательных состояний $v=0, 1, 2, 3, 4$. Радикалы в возбужденных колебательных состояниях получены как продукты реакции атомарного водорода с F_2O . Из сравнения наблюдаемых и вычисленных спектров определены необходимые константы взаимодействий и вычислены частоты пере-

ф. 1971. 69

ходов λ — удвоения в нулевом поле для состояния $^2\Pi_{3/2}$, $J=3/2$, $v=1$ радикала ОН. Отмечено, что в ИК звездах возможна оптич. накачка излучением с длиной волны 2 мк колебательного состояния $v=1$ радикала ОН и возможно наблюдение радиоизлучения на вычисленных частотах λ -дублетов.

В. М. Рыжков

XI-885

1970

OH (near. west.)

Carlone C.,

Diss. Hist. Int., 1970, B30,

N 9, 4310

10

ОН

1970

5 В110. Определение энергий связанных и квазисвязанных (резонансных) состояний для различных молекулярных потенциалов. Johnson B. R., Balint-Kurti G. G., Levine R. D. The determination of bound and quasibound (resonance) state energies for molecular interactions. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 7, № 2, 268—272 (англ.)

Предложен метод определения энергий связанных и квазисвязанных состояний двух атомов по особенностям матрицы рассеяния. В качестве иллюстрации рассмотрен основной терм молекулы ОН. Е. Никитин

X. 1971. 5

1970

ОН

10 Д765. Люминесценция систем, содержащих ион гидроксила. Maria H. J., McGlynn S. P. Luminescence of systems containing hydroxyl ion. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 7, 3402—3408 (англ.)

Исследована флуоресценция радикала ОН в щелочно-галондных кристаллах, водных растворах NaOH, $Zn(OH)_2$, $Cd(OH)_2$ диэтиламина, аммиака и $PbO + NaOH$. Флуоресценция приписана переходу $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ радикала ОН, образованного из иона OH^- при возбуждении УФ-светом за счет фотопереноса электрона матрице. Наблюдалась фосфоресценция изученных систем при $\lambda \sim 400$ мик, приписанная переходу $^4\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ радикала ОН. Обсуждаются возможные электронные состояния ОН и схема энергетич. уровней его в модели конфигурационных кривых. Библ. 16. В. Ф. П.

спектр

8,1

9.1970. 109

X-6953

1970

OH, H_2 , HF, HBr и др., Li_2 , Na_2 , CO и др.
(мат. мет., расчет)

Mirajkar S.M.,

Indian J. Phys., 1970, 44, no. 521-531

HO

лето ф.к

OM

1970

(20308) Level crossing experiment in the OH free radical.
Marshall, Alan F. (State Univ. of New York, Stony Brook,
N.Y.). 1970, 73 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann
Arbor, Mich., Order No. 70-9025. From *Diss. Abstr. Int. B*
1970, 30(11), 5182. SNDC

C.S. 1971.74.6

1970

OH

Nadler M., Kaskan W.E.

J.Quant.Rad.Trans., 10, 25

Collisional broadening of OH
 $2\Sigma^+ - 2\P$ lines in flames.

OH

1970

(60847y) Rotation-vibration energy transfer in collisions between OH($A^2\Sigma^+$) and argon and molecular nitrogen. Welge, Karl H.; Filseth, Stephen V.; Davenport, J. (Centre Res. Exptl. Space Sci., York Univ., Toronto, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1970, 53(2), 502-7 (Eng). Collisional relaxation of OH($A^2\Sigma^+$, v' , K') in high rotational levels of $v' = 0$ and 1 has been investigated with respect to transitions from rotational levels in $v' = 0$ to levels in $v' = 1$. Initial nonequil. rotational distributions of OH ($A^2\Sigma^+$) in $v' = 0$ and 1 were produced by monochromatic photodissocn. of H_2O with the radiation of a Kr resonance lamp at 1236 and 1165 Å. The effect of added foreign gases (Ar and N_2) on the population of individual levels in $v' = 0$ and 1 has been studied under steady-state conditions by observing the emission intensities of individual lines in the (0, 0) and (1, 1) bands of the OH ($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$) transition. The essential observation was made on the population of the rotational

C.A. 1970:73:12

el $K' = 15$ in $v' = 1$. The population of this level increased significantly in the presence of Ar and N_2 beyond the initial population produced from H_2O alone. In comparison, the population of adjacent levels remained relatively unchanged or decreased when foreign gas was added. The effect on the ($v' = 1, K' = 15$) level is attributed to the collisional transfer process $OH (A^2\Sigma^+, v' = 0, K' = 20) + Ar, N_2 \rightarrow OH (A^2\Sigma^+, v' = 1, K' = 15) + Ar, N_2 + \Delta E$, where the energy difference, $\Delta E = 27 \text{ cm}^{-1}$, between the 2 levels is small compared to the heat bath energy, $kT = 250 \text{ cm}^{-1}$. For this process and its reverse, a rate const. of the order of $10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ sec}^{-1}$ has been derived. According to angular-momentum conservation, the process involves, in the case of Ar as collision partner, an increase in the impact parameter which is estd. to be about $0.3 \text{ \AA}$.

RCIO

ОН (и.п)

1971

Борисов Ю. А., Булгаков Н. Н.

Теория электр. оболочек
атомов и молекул: Виль-
нос, "Миниш", 1971, 167/169

См СН: III

1971

Boyd R. F.,
Whitehead M. A.

J. Chem. Soc.,

1971, A, v22, 3549.

(Cell. Btr) III

OH

см. на об.

у

Сравнение орбит. периодов и чисел
потенциалов по числу (5V)

Система парашютов

М-ла	Орбит.	<u>I</u>	<u>II</u>	<u>III</u>	<u>IV</u>	экон.
ОН	Л	14.88	13.41	15.13	13.73	13.36
	С	15.80	14.57	16.33	15.24	
	С	33.93	34.39	33.24	33.61	

DM

Cade P. G. et al.

1971

J. Chem. Phys., 54(8),
3517.

возбужд.
показатель

(coll. O₂) III

Осн. катал. и
Гуркин, 1972, ДАН.

OH

11 - 882

1971

11 B1085. Инфракрасный лазер на гидроксильном радикале. Callear A. B., Bergh H. E. van den. An hydroxyl radical infrared laser. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 8, № 1, 17—18 (англ.)

При импульсном фотолизе смеси O_3 с H_2 в резонаторе лазера (трубка из прозрачного кварца длиной 2 м с внутренним диам. 22 мм) обнаружено стимулированное излучение OH^* на вращательно-колебательных переходах Р-ветви $v=3 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 0$. Радикалы OH^* с инверсной колебательной заселенностью образуются в р-циях $O(^1D) + H_2 \rightarrow H + OH^*(v \leq 2)$ и $H + O_3 \rightarrow O_2 + OH^*(v \leq 9)$. Стимулированное излучение появляется при энергии фотолизующей вспышки 400—2000 дж для смесей $O_3/H_2 = 1/10$ при полном давл. 1—10 мм. Добавки 700 мм He не влияют на лазерную эмиссию, а добавки 70 мм N_2 полностью ее подавляют, вероятно,

импульсный.
общий

(+1) в общей III

X. 1971. 11



из-за дезактивации $O(^1D)$. Полная пиковая мощность лазерного излучения по оценке составляет 2 вт. Спектр свечения состоит из 7 линий: 3407, 3368, 3249, 3210, 3168, 3092 и 3054 см^{-1} , отождествленных с определенными колебательно-вращательными переходами радикала OH^* . Относит. интенсивности линий могут быть вычислены в предположении, что отношение заселенностей $\text{OH}(v=n)/\text{OH}(v=n-1) \approx 0,5$. Новый лазер может найти применение для детектирования OH в химически реагирующих системах, включая земную атмосферу. В. Е. Скурат

OH

1971

11 Д349. Измерения времен жизни и g -факторов свободных радикалов OH и OD методами пересечения уровней и двойного оптического резонанса. De Zafra Robert L., Marshall Alan, Metcalf Harold. Measurement of lifetime and g factors by level crossing and optical double resonance in the OH and OD free radicals. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 5, 1557—1567 (англ.)

S. N.

С помощью методов пересечения уровней в нулевом поле (эффект Ханле) и двойного оптич. резонанса измерены времена жизни и g -фактора нескольких вращательных подуровней возбужденного состояния $A^2\Sigma^+$



(+1) III

(+1) 6m



З. 1971. 112

свободных радикалов ОН и ОД. Изложены основы теории молекулярного эффекта Ханле и подробно описана использованная эксперим. аппаратура. Сигнал двойного оптич. резонанса наблюдался на пяти первых вращательных подуровнях состояния $A^2\Sigma$. Полученные значения g -факторов находятся в хорошем согласии со значениями, ожидаемыми для случая чистой b -связи в этом состоянии. Эффект Ханле наблюдался на четырех вращательных подуровнях ОН ($k=2\div 5$) и семи вращательных подуровнях ОД ($k=2\div 8$). Полученные результаты сведены в таблицы. Библ. 20. В. С. 3.

OH

radux

fmn

адс. укт.

р.п. 1944, 45, 12

1971

820839 Absolute intensities and oscillator strengths of several lines of the 1-0 and 2-1 vibration-rotation bands of the OH radical. d'Incan, Jean; Effantin, Christiane; Roux, Francoise (Lab. Spectrom. Mol., Fac. Sci. Lyon, Lyons, Fr.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1971, 11(8), 1215-24 (Eng). Line radiancies (R_L) have been obtained in the 1-0 and 2-1 vibration-rotation bands of the OH radical by using a high resolu. ir grill spectrometer, a blackbody and an oxyacetylene flame. From temp. measurements and calcd. values of the OH partial pressures in different regions of the flame, the optical path has been derived. Integrated absorption S''_{ij} and oscillator strength f''_{ij} have been deduced for the 4 components (lambda and spin doubling) of the P branch line $J = 11$ through $J = 17$ in the 1-0 transition and $J = 9$ through $J = 16$ in the 2-1 transition. The values $|R_1^0| = 3.1 \times 10^{-2} D$ and $|R_2^1| = 3.9 \times 10^{-2} D$ have been obtained for the vibrational matrix elements of the 1-0 and 2-1 bands. Dipole moment coeffs. have been calcd. Results have been compared with those of Heaps and Herzberg.

ОН

1971

(З Б236.) Абсолютные интенсивности и силы осцилляторов ряда линий вращательно-колебательных полос 1—0 и 2—1 радикала ОН. D'Incan Jean, Effantin Christiane, Roux Françoise. Intensités absolues et forces d'oscillateur de quelques raies des bandes de vibration-rotation 1—0 et 2—1 du radical ОН. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1971, 11, № 8, 1215—1224 (франц.; рез. англ.)

С помощью ИК-спектрометра высокого разрешения измерена сила (R_L) ряда вращательных линий P -ветви полос 1—0 ($11 \leq K \leq 17$) и 2—1 ($9 \leq K \leq 16$) (~ 2690 — 3100 см^{-1}) радикала ОН, образующегося в кислородно-ацетиленовом пламени. Кроме того, измерена излучательная способность черного тела (R_S) при различных

спектр

① f m n

2, 1972, 3



т-рах. Средняя т-ра пламени по измерениям четырех ветвей P_1 и P_2 полос 1—0 и 2—1 оценена равной $3350 \pm 50^\circ \text{K}$. Из т-рных измерений и вычисленных величин парц. давл. ОН в различных областях пламени определена оптич. толщина $X = 1,85 \times 10^{-2} \text{ см} \cdot \text{атм}$ (вероятная ошибка $\leq 10\%$). С помощью ф-лы $R_L = (R_\omega^0)_T S X [(R_\omega^0)_T]$ — излучательная способность черного тела при т-ре T для рассматриваемой длины волны ω] вычислены по данным измерений интегральные интенсивности S и силы асцилляторов $f_{VJ}^{V'J'}$ вращательных линий ветвей P_1 и P_2 полос 1—0 и 2—1 радикала ОН. Из величин S определены также значения матричных элементов колебательного перехода $R_V^{V'} = \int \psi_V^* M \psi_V d\tau$: $|R_1^0| = 3,1 \times 10^{-2}$ и $|R_2^1| = 3,9 \times 10^{-2} D$. По величинам этих матричных элементов определялись коэф. в разложении дипольного электрич. момента M в ряд вблизи положения равновесия $r = r_e$ $M = M_0 + M_1(r - r_e) + M_2(r - r_e)^2 + \dots$. В зависимости от принятого знака $R_V^{V'}$ найдены четыре пары величин: $(\bar{M}_1 = +0,480, \bar{M}_2 = +0,793D)$, $(\bar{M}_1 = +1,193, \bar{M}_2 = +12,930D)$, $(\bar{M}_1 = -0,480, \bar{M}_2 = -0,793D)$, $(\bar{M}_1 = -1,193, \bar{M}_2 = -12,930D)$, где $\bar{M}_1 = M_1 r_e$, $\bar{M}_2 = M_2 r_e^2$. Найденное отсюда соотношение $\bar{M}_2 / \bar{M}_1 = 1,65$ и $10,8$, что существенно отличается от величины $-0,514$, приведенной в литературе.

А. П. Александров

ОН

XI-2420

1971

5 Д157. Преддиссоциация континуумом связанного состояния без пересечения потенциальных кривых. Применение к спектру ОН. Durmaz S., Murrell J. N. Predissociation by the continuum of a bound state without curve crossing. Application to the spectrum of ОН. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 12, 3395—3398 (англ.)

Вычислены факторы Франка—Кондона для переходов из дискретных колебательных уровней с $v=0\div 9$ электронного состояния $A^2\Sigma^+$ на континуум основного электронного состояния $X^2\Pi$ радикала ОН. Расчеты выполнены с использованием потенц. ф-ции Ридберга—Клейна—Риса для значений квантового числа $N=0\div 30$ (N — квантовое число полного углового момента за вычетом спина). Из полученных факторов Франка—Кондона оценены вероятности преддиссоциации колебательно-вращательных уровней состояния $A^2\Sigma^+$ и показано, что наблюдаемая в спектрах поглощения и излучения ОН

предисс.

Ф. 1972. 52.

преддиссоциация уровней с $v=2\div 5$ состояния $A^2\Sigma^+$ удовлетворительно объясняется переходами $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ (континуум) без пересечения потенц. кривых (ранее такая преддиссоциация интерпретировалась пересечением потенц. кривой состояния $A^2\Sigma^+$ с потенциальной кривой несвязывающего состояния типа $^2\Sigma^-$).

М. Р. Алиев

X-2790

1971

ОН

11 В20. Преддиссоциация связанного состояния континуумом в отсутствие пересечения термов. Применение к спектру ОН. Durmaz S., Murrell J. N. Predissociation by the continuum of a bound state without curve crossing. Application to the spectrum of ОН. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 12, 3395—3398 (англ.)

спектр.

Рассчитаны факторы Франка — Кондона (ФФК) для переходов между колебательно-вращательными состояниями возбужденного электронного терма $A^2\Sigma^+$ и состояниями непрерывного спектра основного электронного терма $^2\Pi$ молекулы ОН. Отношение рассчитанных величин ФФК для состояний с колебательными квантовыми числами $v=2$ и 6 примерно на три порядка больше отношения экспериментально измеренных обратных времен жизни соотв-щих уровней. Авторы связывают это с прямой преддиссоциацией уровня $v=6$ терма $A^2\Sigma^+$ в результате пересечения с термом $^4\Pi$.

С. Я. Уманский

У. 1972. 11

XI - 2790

1941

OH

нрелуеау

(енекта)

(8299u) Predissociation by the continuum of a bound state without curve crossing. Application to the spectrum of OH. Durmaz, S.; Murrell, I. N. (Sch. Mol. Sci., Univ. Sussex, Brighton, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1971, 67(12), 3395-8 (Eng). Calcns. of the Franck-Condon overlaps between the bound vibrational levels of the $A^2\Sigma^+$ state of OH and the continuum levels of the ground state $X^2\Pi$ suggest that the weak predissocn. of the levels $v = 2-5$ could be due to a direct predissocn. to the ground state and not to the crossing by another excited state. Accurate measurements of the intensity of the emission lines could test this hypothesis.

C. A. 1972. 46. 2

OH

1971

119283d Ultraviolet hydroxide spectrum. Furst, Benjamin
(Clarkson College Technol., Potsdam, N.Y.). 1971, 147 pp.
(Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No.
72-1730. From *Diss. Abstr. Int. B* 1972, 32(7), 4137.

Y 99 - chem

C.A. 1972. 76. 20

OH

XI - 4348
continued 2931

1971

42590w Predissociation in the spectrum of hydroxide. Reinterpretation. Gaydon, A. G.; Kopp, I. (Imp. Coll., London, Engl.). J. Phys. B 1971, 4(5), 752-8 (Eng). The weak predissocn. in the $v = 1$ and 2 levels of $A^2\Sigma^+$, previously attributed to a $^2\Sigma^-$ state crossing on the inner limb of the potential curve of $A^2\Sigma^+$, has been reexamd. assuming crossing on the outer limb. It can be accounted for either by a $^4\Pi$ state or by a $^4\Sigma^-$ state, of which the latter seems more probable. This can account for the different strengths of lines from the F_1 and F_2 components of $A^2\Sigma^+$.

предиссоциация
гидроксида

C.A. 1971. 75.6

ОН

оттиски 2931
XI-4848

1971

23 Б73. Преддиссоциация в спектре ОН; новая интерпретация. Gaydon A. G., Kopp I. Predissociation in the spectrum of OH; a reinterpretation. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1971, 4, № 5, 752—758 (англ.)

спектр

Обсуждается возможный механизм преддиссоциации с колебательных уровней $v=1$ и $v=2$ состояния $A^2\Sigma^+$ радикала ОН. Считается, что область пересечения термов, где локализован неадиабатич. переход, лежит на внешней связывающей части потенциальной кривой состояния $A^2\Sigma^+$. Наиболее вероятными термами, пересекающимися терм $A^2\Sigma^+$, являются термы $^2\Pi$ и $^4\Sigma^-$. Из них $^4\Sigma^-$ более предпочтителен, что следует из анализа сил линий компонент F_1 и F_2 состояния $A^2\Sigma^+$. А. Зембеков

X-1971.23

OK 4 Д923. Исследование полос гидроксила (4—1) и (5—2) в ночном свечении. Harrison A. W., Evans W. F. J., Llewellyn E. J. Study of the (4—1) and (5—2) hydroxyl bands in the night airglow. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 19, 2509—2517 (англ.; рез. франц.)

1971

Рассмотрены результаты систематич. измерений (в течение года) излучения ночного неба в полосах гидроксила (4—1) и (5—2), расположенных около 1 мк. Измерения выполнены с помощью спектрометра с разрешением 27 Å. Из сравнения расчетного спектра с экспериментальным определены четыре вращательные т-ры для Р-ветви изучаемых полос. Обнаружены сезонные вариации этих т-р. Показано, что вращательные т-ры за длительный период наблюдения частично коррелированы с вариациями полной яркости полос, однако в течение ночи такая корреляция отсутствует. Сделано предположение, что вертикальный профиль излучения гидроксила слабо изменяется в течение ночи. Определены средние абс. яркости полос, составляющие для полосы (4—1)—4,6 и 3,5 крелей и для полосы (5—2)—5,8 и 4,3 крелей соответственно для зимних и летних условий. Библ. 27.

Г. Е. Синельникова

Ф. 1972
42.

OH

Bp-3056-IX 1971.

Hansen K. H

Freinkel E.

(passim

reac. emp;

Do)

Theor. chim.

Acta, 1971, 20,
N2, 105-112

OH

1971.

Herzberg G.

" Highlights of
Astronomy, 1971.

415-20.

amuse 1065

OH

B.B. Land
A.C. Gaydon.

1971

822

rotat.
temp.

"Flame" 16, 55-60, (1971)

Absorption Spectrum of Ethylene
Diffusion Flames"

Рассмотреть
структ., ϵ_i, ν_i ,
см. n

$\text{CH}, \text{CH}^+, \text{CH}_2, \text{CH}_2^+, \text{CH}_3, \text{CH}_3^+$
 $\text{CH}_4, \text{CH}_4^+, \text{CH}_5, \text{CH}_5^+, \text{NH},$
 $\text{NH}^+, \text{NH}_2, \text{NH}_2^+, \text{NH}_3, \text{NH}_3^+,$
 $\text{NH}_4, \text{NH}_4^+, \text{OH}, \text{OH}^+, \text{OH}_2, \text{FH}_2^+$
 $\text{OH}_2^+, \text{OH}_3, \text{OH}_3^+, \text{FH}, \text{FH}^+, \text{FH}_2$

1971
11 13
14

Nathan W. A. Merrifield W. J. Curtis J. A.
 XI 2757 / Pople J. A.
 J. Amer. Chem. Soc., 1971, 93, No 4, 6377-

Molecular orbital theory - 6387 (am.) 35
 of the electronic structure of orga-
 nic compounds. X. A systematic study
 of geometries and energies of ANn molecu-
 lar ions, 1972, and 9521 cations.

OH

Legoux, J.

1971

(u.b.en.)

"Rev. Phys. Appl.", 1971,

6, N2, 259-61.

(cure. NH_3 , III)

OH

omni 2933
XI-2863

1971

M.N.

(52410x) Reanalysis of the $A^2\Sigma^+-X^2\Pi_1$ system of hydroxide.
Moore, Elaine A.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Phys. Scr.* 1971, 3(5), 223-30 (Eng). By using statistical methods improved spectroscopic consts. are obtained for the $A^2\Sigma$ and $X^2\Pi_1$ states of OH. In particular, careful attention was paid to the A-doubling consts. The difficulty of choosing a formula to express all the energy levels is discussed and complete tables of term values are included. The term values are accurate to better than 0.1 cm^{-1} .

C.A. 1972. 76.10

OH

chemistry

C. A. 1941. 45.24

1941

145811v Infrared emission of OH in the fundamental and first overtone vibration-rotation bands. Murphy, Randall Edward (Utah State Univ., Logan, Utah). 1970, 142 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-26,986. From *Diss. Abstr. Int. B* 1971, 31(7), 4257.

OH, OD

M.N.

Спектр
магнетизма

Spay

C.A. 1941. 45.24

XI-2714

1941

45809d Magnetic rotation spectra of the $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_1$ transition of OH and OD. Nanes, Roger (Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). 1970, 165 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-26,687. From Diss. Abstr. Int. B 1971, 31(7), 4259.

ОН
ОД

XI-1851

1971

2 Д447. Магнитные вращательные спектры перехода $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$; ОН и ОД. Nanes R., Robinson D. W. Magnetic rotation spectra of the $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ transition of OH and OD. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 2, 963—974 (англ.)

С помощью фотоаппаратной методики исследованы с высоким разрешением спектры поглощения, зеемановского расщепления и магн. вращения (0,0)-полосы перехода $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ радикалов ОН и ОД. Радикалы генерировались при высокочастотном разряде (2450 мГц) через чистые H_2O и D_2O . В каждой из полос обнаружены все 12 ветвей (в полях 1300 и 2700 Гс), наиболее интенсивными из которых были P_1 - и Q_1 -ветви. В некоторых случаях спектры магнитоопт. вращения позволили зарегистрировать зеемановскую структуру, не разрешаемую в спектрах поглощения в магн. поле. Анализ спектра проводился с помощью ЭВМ. Расчеты дали хорошее согласие с экспериментом. Библ. 23. В. С. З.

И. П.

Ф. 1972. 22

(+)

✕

ОН

13 Б144. Разрешенная по времени спектроскопия импульсного разряда в парах воды: наблюдение излучения с $C^2\Sigma^+$ -состояния ОН. Remy François. Time resolved spectroscopy of a pulsed discharge through water vapor: observation of emissions from the $C^2\Sigma^+$ state of ОН. «Spectrosc. Lett.», 1971, 4, № 9, 319—327 (англ.)

При возбуждении импульсным электрич. разрядом (импульсы длительностью $2 \cdot 10^{-6}$ сек., амплитудой 1500 в и частотой 25 тц) паров воды наблюдалось излучение ОН при 2683,5 А, соответ-щее переходу $(0-9)C^2\Sigma^+ - A^2\Sigma^+$, а также группа эмиссионных полос в области 1850 А. Изучено изменение интенсивностей этих линий во времени. Обнаружено, что в обоих случаях кривые затухания состоят из двух экспонент с характерными временами примерно 80 и 320 нсек. В соответствии с полученными временами жизни проведено отнесение полос к переходам с $a^3\Sigma_g^+$ состояния H_2 и $C^2\Sigma$ состояния ОН. Обсуждена интерпретация группы полос в области 1850 А.

О. Г. Гаркуша

Семин

47874

XV

+1

X. 1972.

13

OH

XI-2880

1971

~~39722f~~ High-field Stark effects on the near ultraviolet spectrum of the hydroxyl radical. Scarl, Ethan A.; Dalby, F. W. (Phys. Dep., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *Can. J. Phys.* 1971, 49(22), 2825-32 (Eng). Spectra due to the $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ transition of the OH radical in elec. fields of over 300,000 V cm⁻¹ were obtained. The dipole moment of the $A^2\Sigma^+ v = 0$ state of OH was (1.98 ± 0.08) D. From the variation of the dipole moment with vibrational quantum no. in the $^2\Pi$ state, the transition probability for the pure vibrational transition $v = 1 \rightarrow v = 0$ was $A_{10} = 80 \text{ sec}^{-1}$.

cleanup

ju

C.A. 1972, 76.5

OK

Veseth L.

1944

J. Mol. Spectrosc. 2, 1944
22, No. 2, 228-242

M.H.

(Cm. Can) 14

ОН

Bendayyoli G. L,
Bernardi F., Palmieri P.

1972.

расши
контакт
сверхтонкого
взаимод.

"Mol. Phys.", 1972, 23, N1,
193-196.

● (см NH₂, III)

OH

(79761v) Theoretical potential energy curves for OH, HF^+ , HF , HF^- , NeH^+ , and NeH . Bondybey, Vladimir; Pearson,

Peter K.; Schaefer, Henry F., III (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(3), 1123-8 (Eng). Ab initio calcs. have been carried out on the ground states of OH, HF^+ , HF , HF^- , NeH^+ , and NeH . Extended basis sets were used and electron correlation was included by way of 1st-order wavefunctions. Dissocn. energies and other spectroscopic consts. are in good agreement with available exptl. data except for the bond distance of HF^+ . Electron detachment in collisions between H and F^- is discussed on the basis of the calcd. potential curves. Potential curves were also obtained ab initio for the 3 lowest excited states of NeH . These curves are qual. similar to those reported earlier by Slocumb, Miller, and Schaefer for HeH . The $\text{C}^2\Sigma^+$ state of NeH is predicted to have a potential max. of 0.87 eV at internuclear sepn. ~ 4 bohr.

B, M, N.

Kb. max

pcc:ret

1972

141-3141
(X)

(+5)



C.A. 1972. 44. 12

OH, OD (m.n.)

XII 3148

1972

Ducas T.W., Geoffrion L.D., Osgood
R.M. Jr., Yawan R.,

Appl. Phys. Lett., 1972, 21, N1, 42-
-44 (anal.)

Observation of laser oscillation
in pure rotational transitions
of OH and  OD free radicals.

PrePuz, 1972, 120934. NO 



OH

XI - 3189

1972.

107070q Accurate wavenumbers of the $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ (0,0) and (1,0) bands of OH and OD. Engleman, Rolf, Jr. (Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N. Mex.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1972, 12(9), 1347-50 (Eng). The important $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ (0,0) absorption band of OH was re-measured from spectra obtained by flash photolysis of H_2O_2 vapor. Accurate waveno. measurements using Th stds. show that the previous rotational line measurements are about 0.1 cm^{-1} too large. Measurements are also given for the (1,0) band of OH and the (0,0) and (1,0) bands of OD.

M. N

C.A. 1972. 77. N16

X1 - 3189

1972

OH

2 Д357. Точные значения частот вращательных линий полос 0—0 и 1—0 перехода $A^2\Sigma-X^2\Pi$ OH и OD. Engleman Rolf, Jr. Accurate wavenumbers of the $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ (0,0) and (1,0) bands of OH and OD. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1972, 12, № 9, 1347—1350 (англ.)

С помощью импульсного фотолиза паров H_2O_2 и D_2O при низком давлении получены спектры поглощения полос перехода $A^2\Sigma-X^2\Pi$ радикалов OH и OD. Низкая т-ра ($\sim 350^\circ K$) и давление обеспечивают меньшую ширину вращательных линий ($\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$) по сравнению с дуговыми источниками спектра ($\sim 0,3 \text{ см}^{-1}$). Используя спектрограф высокой разрешающей силы и спектр тория в качестве эталона, оказалось возможным более точно определить частоты вращательных линий. Показано, что частоты линий полосы 0—0 OH систематически на $0,1 \text{ см}^{-1}$ ниже прежних данных; аналогичное отклонение наблюдалось для полосы 0—1 OD. Для полос 0—1 OH и 0—0 OD различие незначительно. Библ. 11.

В. Александров

Физор-73-2

(+1)

Д

OH

X1 - 3189

1972.

5 Б109. Точные значения волновых чисел для переходов $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ (0,0) и (1,0) молекул OH и OD. Engleman Rolf, Jr. Accurate wavenumbers of the $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ (0,0) and (1,0) bands of OH and OD. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1972, 12, № 9, 1347—1350 (англ.)

(vi) С помощью ториевого стандарта частоты измерены положения полос вращательной структуры молекул OH (OD), полученных при импульсном фотолизе паров

H_2O_2 (H_2D_2). Найдено, что прежние значения частот для переходов $A^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ (0,0) и (1,0) завышены примерно на $0,1 \text{ см}^{-1}$. Приведены точные значения частот.

Б. Локшин

X. 1973. № 5.

+1



OH (Ae^*)

X-8897

1972

KOH (Do)

Reugier A.,

These doct. sci phys. Fac. sci Univ.

Paris, 1972, 113 p. (99p)

Ionisation thermique et chimique
dans les flammes.

2276 op. K

Rueher, 1975, 1551194 D.

10, 4

ОН (у.р. сивир) № 3051 1972

Forest B.,

Diss. Abstr. Int., 1972, B32, N7, 4137
(ann.)

Ultraviolet hydroxide spectrum

40

⑤

~~(cell - opposite)~~

10 (S) (C) ~~(confidential)~~ 07, 1972, 46, 120, 119283d

ОН

Hinkley R.K.;
et al

1972

раств.

"Mol. Phys",
1972, 24, N 5, 1095-102.

"Конст. спин-орбит. взаимодейст.

(см. Ветт; III)

IX - 3864

1972

14 B56. Λ -удвоение состояний $^2\pi$ двухатомных молекул. Hinkley R. K., Hall J. A., Walker Teh, Richards W. G. A doubling in $^2\pi$ states of diatomic molecules. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1972, 5, № 2, 204—212 (англ.)

С использованием неэмпирич. хартри-фоковских волновых функций вычислены матричные элементы операторов спин-орбитального взаимодействия и взаимодействия орбитального движения электронов с вращением двухатомной молекулы, связывающие состояния $^2\pi$ с состояниями $^2\Sigma^+$; расчеты проведены для ОН, ВеН, СН и НО. Полученные значения матричных элементов использованы для вычисления постоянных удвоения p и q $^2\pi$ состояний этих молекул. Рассмотрена применимость модели «чистой прецессии» к указанным молеку-

расчет
м.н.

(+)

☒

X. 1972. 14

лам, согласно к-рой орбитальное квантовое число L сохраняется, а сумма 2-го порядка сводится к одиночному члену. Показано, что вычисленные для ОН и ВеН в рамках модели «чистой прецессии» значения p и q полностью согласуются с эксперим. значениями p и q , для СН расхождение между вычисленными и эксперим. значениями p и q малó, а для NO модель «чистой прецессии» неприменима.

М. Р. Алиев

OH

IX - 3864

1972

BeH

CH

NO

92371s Λ Doubling in $^2\Pi$ states of diatomic molecules. Hinkley, R. K.; Hall, J. A.; Walker, T. E. H.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *J. Phys. B* 1972, 5(2), 204-12 (Eng). The Λ doubling consts. of the $^2\Pi$ states of OH, BeH, CH, and NO are calcd. from Hartree-Fock wavefunctions to test the validity of Van Vleck's hypothesis of pure precession. Excellent agreement with expt. is found for OH and BeH while for CH the discrepancies are relatively small. In the case of NO, however, no agreement is found and it is concluded that the hypothesis only holds when the mol. situation resembles that in atoms.

Auct. b² 7

(43) 11

C.A. 1972. 76.16

ОН

1972

резонанс.
поглощ.

✓ 4 Д445. Резонансное поглощение свободными радикалами ОН, наблюдаемое при воздействии излучения лазера на молекулах H_2O . Kasuya Takahiro, Shimoda Koichi. Resonant absorption of free OH radical observed by an H_2O laser. «Jap. J. Appl. Phys.», 1972, 11, № 10, 1571 (англ.)

Наблюдалось явление магн. резонансного поглощения в свободных радикалах ОН при воздействии на них излучения с $\lambda = 118$ мк от лазера на H_2O . При изменении напряженности магн. поля от 6 до 50 э наблюдалось 7 линий поглощения, которые идентифицированы как зеемановские компоненты вращательных переходов электрич. диполя ОН. А. И. Сербин

Ф. 1973 № 4

OH

fix 4085

1972

Kim M., et al.

Daehan Mwakak Mwaejee,
1972, 16, N5, 261-4.

(кв. мех.
растет
сел. усть.)

(сел. Л. Н.) III

OH (сверхур)

FO (Do)

(OF)₅-

Levy D.H.,

J. Chem. Phys., 1972, 56, N3, 1415-1416
(англ.)

Production of hydroxyl
in the reaction of $H + F_2O$ and
binding energy of FO.

BreXun, 1972, 135897 2 to

Ⓢ

XI 2845

1972

OH

1972

Marliere C., Burrie J. et al.

C. R. Acad. Sci., Ser. 1972,

M.N. 275, 315-18.

(see SO) III

$C_2; N_2; O_2; H_2; CH; NH; OH;$
 $CN, NO; H_3; H_4; CH_2; CH_3; CH_4;$
 $NH_2; NH_3; H_2O; H_3O^+$

1972
 xi 3315
 (Ei, paciem)

Mathew F.M., Ellison F.O.

J. Chem. Phys., 1972, 57, N12, 5183-
 -5202 (anal.)

Semiempirical scaled molecu-
 lar orbital theory. 32

Potc Luvii, 1973, 9528

10 (ca. $C_2^{1/2}, III$)

OH

XI-2862

1972

M.H.

2Π -coor.

63368r Molecular parameters of the hydroxy free radical. Mizushima, Masataka (Dep. Phys. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, Colo.). *Phys. Rev. A* 1972, [3]5(1), 143-57 (Eng). Theoretical formulas with higher-order perturbation terms are given for the rotational levels of 2Π states and are applied to the OH free radical. By analyzing existing data values of several mol. parameters including the rotational const. B , the spin-orbit coupling constant A and Λ -doublet constants α and β are obtained for some vibrational states. The magnetic g factors are discussed and analyzed. A recent expt. on laser magnetic resonance is also discussed.

C.A. 1972. 76. 12

ОН

X1-2862.

1972

12 Б16. Молекулярные параметры свободного радикала ОН. Mizushima Masataka. Molecular parameters of OH free radical. «Phys. Rev. A: Gen Phys.», 1972, 5, № 1, 143—157 (англ.)

Вычислены высшие поправки теории возмущений к вращательным уровням состояний $^2\Pi$ двухатомных молекул. Результаты применены к анализу эксперим. данных для молекулы ОН и для определения значений вращательной постоянной B , спин-орбитального коэф. A и параметров Λ -удвоения α и β . Соотв-щие параметры табулированы, как функции вращательного и колебательного квантового числа. Дан также теор. анализ результатов эксперимента по лазерному магнитному резонансу для ОН: вычислены интенсивности и поляризации переходов.

Т. К. Ребане

расчет
м.ч.

X. 1972. 12

ОН

Рамик Н. Önder

1972

"Theor. Chim. acta"

1972, 28, n1, 85-98.

... расчёты энергии
корреляции для молекул...

● (см. ВН; III)

ОН (I)

✓ 1 Д297. Образование вращательно-возбужденного ОН($^2\Sigma^+$) при разряде в парах воды. Pichamuthu J. P., Hassler J. C., Coleman P. D. Formation of rotationally excited ОН($^2\Sigma^+$) in the water vapor discharge. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 3, 1360—1361 (англ.)

1972

уровни

Изучена временная зависимость интенсивности УФ-эмиссии ($^2\Sigma^+$, $v=0 \rightarrow ^2\Pi$, $v=0$) радикала ОН (I), образующегося в импульсном разряде через пары воды при давл. 0,1—2,0 мм рт. ст. Показано наличие сильного отклонения от термич. распределения I по вращательным уровням. Максим. интенсивность излучения наблюдалась с пятого вращательного уровня и монотонно уменьшалась в обе стороны, достигая 25% от максим. величины для 2 и 23 уровней. Обсуждаются возможные механизмы образования наблюдаемого неравновесного распределения по вращательным уровням.

П. Ш.

Р. ж. Ф. 1973. 1

1972

$\overline{XI}$ - 320.1
 H_2O , OH (D_0 , в. век паер)

Peterson C., Pfeiffer G. V.,

Theor. chim. acta,

1972, 26, № 4, 321-330

(см. H_2O ; III) • HO св. ф. к

OH

1972

106305n Beam-maser measurements of the ground-state transition frequencies of hydroxyl. Ter Meulen, J. J.; Dymanus, A. (Fys. Lab., Katholieke Univ., Nijmegen, Neth.). Astrophys. J. 1972, 172(1)(Pt. 2), L21-L23 (Eng). Rest frequencies of the 4 transitions between the $F = 2,1$ hyperfine levels of the $^2\Pi_{3/2}$, $J = 3/2$, Λ -doublet states of OH were detd. with a beam-maser spectrometer. The frequencies are accurate to about 100 Hz, and the sum rule is satisfied to within about 100 Hz.

C.A. 1972. 76. 18

1973

ОН

исправл.
к статье

12 Б241. Исправления авторов Sutherland R. A.,
Anderson R. A. к статье «Излучательные и преддиссоциационные времена жизни состояния $A^2\Sigma^+OH$. Anderson R. A., Sutherland R. A. Radiative and predissociate lifetimes of the $A^2\Sigma^+$ state of OH. Erratum. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6690 (англ.)
К РЖХим, 1973, 15Б144

X. 1974 N 12

OH

1973.

(C.n.)

Anderson, Alfred B.

J.Chem.Phys.

1973, 58(I), 381-3.

● (ex. LiH; III)

OH

1973

7

Berkowitz J., Appelman E.H., Chupka W.A.
"J. Chem. Phys.", 1973, 58, N^o 5, 1950-1954.

(see HOF; I)

OH

офис 2106

1973

Cade Paul E, Huo Winifred.

математ

вещ. ф-у

"Atom. Data and Nucl. Data
Tables" 1973, I2, W5, 415-66(eng)

(see. Lit; III)

OH

Clyne, Coxon, and Fat

1973

J. Molec. Spectros. 46, 146 (1973)

The $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_i$ electronic band system
of the OD free radical.

OH

XI-3417

1973

128620e Calculated potential energy curves of hydroxyl radical. Easson, Ian; Pryce, M. H. L. (Dep. Phys., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *Can. J. Phys.* 1973, 51(5), 518-29 (Eng). A configuration-interaction calcn. of the electronic energies of the OH radical was performed by using from 34 to 46 configurations for the doublet states; and from 11 to 25 configurations for the quartet states. The results are presented for the 6 lowest states of $^2\Sigma^+$, $^2\Sigma^-$, $^2\Pi$, $^2\Delta$; $^4\Sigma^+$, $^4\Sigma^-$, $^4\Pi$, and $^4\Delta$ symmetries. The calcns. were performed for a range of internuclear distances from 0.8 to 3 Å. The method of computation was designed to give the kind of accuracy for the lowest 3 or 4 states of each symmetry which could be useful in the empirical anal. of the hitherto unanalyzed spectrum of OH in the 1850 Å region.

op-ign
nomeny.
Jefgum
kb. mex.
pacer

C. A. 1973. 78 N20

ОН

XI-3417

иттисек 1831

1973

7 Д131. Расчеты кривых потенциальной энергии молекулы ОН. Easson I a n, Pryce M. H. L. Calculated potential energy curves of ОН. «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 5, 518—529 (англ.; рез. франц.)

Проведен расчет потенц. кривых молекулы ОН на основе метода конфигурац. взаимодействия. Конфигурации строились из МО, образованных ортогонализацией по Шмидту 14 и 5 слэтеровских ф-ций, центрированных на атомах кислорода и водорода соответственно. Во всех использованных конфигурациях сохранялся постоянным остов $(1s)^2(2s)^2$, остальные 5 электронов распределялись среди 17 валентных орбиталей. При расчетах дублетных ф-ций использовалось максималь-

потенц.
Энерг.

Ф. 1973. № 7

по 46 конфигураций для одного типа симметрии, в случае квартета использовалось 25 конфигураций, в остальных случаях число конфигураций колебалось между этими двумя предельными величинами. Рассчитано по 6 низколежащих электронных состояний следующих типов симметрии: $^2\Sigma^+$, $^2\Sigma^-$, $^2\Pi$, $^2\Delta$, $^4\Sigma^+$, $^2\Pi$, $^2\Delta$, $^4\Sigma^+$, $^4\Sigma^-$, $^4\Pi$ и $^4\Delta$. Потенц. кривые построены по 8 точкам, в которых проведен расчет. Межъядерное расстояние изменялось в пределах 0,8—3 Å. Для всех связанных электронных состояний определены равновесные межъядерные расстояния и энергия относительно основного состояния $X^2\Pi$. А. И. Дементьев

ОН

ХТ-3417

Оттиски 1831

1973

16 Б11. Расчет кривых потенциальной энергии ОН. Easson I an, Pryce M. H. L. Calculated potential energy curves of ОН. «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 5, 518—529 (англ.; рез. франц.)

(м.п.; ξ_i)
Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциалные кривые дублетных и кватретных состояний ОН различной симметрии при восьми межъядерных расстояниях (от 0,8 до 3А) в базисе ортогонализированных по Шмидту s -, p - и d -АО слејтеровского типа. Проведено разделение АО на функции миним. базиса и дополнительные по отношению к нему. Показано, что последние существенны в расчетах возбужденных состояний. Выбор конфигураций (34—46 для дублетных и 11—25 для кватретных состояний) обсужден с точки зрения классификации АО и подтвержден пробными

X. 1973. N 16

расчетами. Оптимизация экспонент проведена так, что экспоненты орбиталей 1-го класса минимизируют энергию основного состояния E_1 , а 2-го — функцию от E_1 , $E_2, \dots$, в к-рой важность состояний учтена введением весов. Результаты для низлежащих электронных состояний с симметрией $^2\Sigma^+$, $^2\Sigma^-$, $^2\Pi$, $^2\Delta$; $^4\Sigma^+$, $^4\Sigma^-$, $^4\Pi$ и $^4\Delta$ сравниваются с эксперим. данными и результатами др. авторов. Для всех связанных электронных состояний определены равновесное межъядерное расстояние и энергия T_e относительно основного состояния $X^2\Pi$.

В. Я. Симкин

OH

Egger Kurt W.
Cocks Alan P

1973

4-1600

(Ae⁻)

"Helv. Chim. Acta"

1973, 56, N 5, 1516-36

1973

OH

OD

22Б120. Исследование состояния $A^2\Sigma^+$ радикалов: OH и OD методами пересечения уровней в нулевом поле и оптически-радиочастотного двойного резонанса. German K. R., Bergeman T. H., Weinstock E. M., Zare R. N. Zero-field level crossing and optical radio-frequency double resonance studies of the $A^2\Sigma^+$ states of OH and OD. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 10, 4304—4318 (англ.)

m, n

f, m

Методами оптич-МВ-двойного резонанса и пересечения уровней в нулевом поле (эффект Ханла) исследована тонкая структура уровней $V'=0, N'=2, J'=3/2$ и $V'=0, N'=1, J'=3,2$ радикалов OH и OD, соотв., в возбужденном электронном состоянии $A^2\Sigma^+$. Для возбуждения состояния $A^2\Sigma^+$ использовали резонансные линии

1083

X. 1973 N 22

разрядных ламп, наполненных парами Zn и Ba для OH и OD соотв. По методу двойного резонанса определены значения g -фактора: $g(OH, F=1)=0,498$, $g(OH, F=2)=0,301$, $g(OD, F=5/2)=0,383$. Эти значения согласуются с теор. и, полученными для случая « b_1 » по Гунду. По эффекту Ханла (зависимость поляризации флуоресценции от напряженности внешнего магнитного поля) измерены радиац. времена жизни $\tau(OD)=0,65 \pm 0,06$ мксек, $\tau(OH, N=2, J=3/2)=0,58 \pm 0,05$ мксек. Пересмотрены также лит. данные по значениям τ и силы осциллятора f . Отмечено, что f_{00} перехода $0-0$ составляет около 99% от полной силы осциллятора, а τ сильно зависит от вращательного состояния. М. Р. А.

30719.8732
TE, Ch, Ph

OH

40892

U-1070

Green Sheldon.

Dipole moment and hyperfine constants of
OD A $2\Sigma^+$ from ab initio calculations.

"J.Chem.Phys.", 1973, 58, N 10, 4327-4330

(англ.)

0919 ВИК

901 902 0912

ВИНИТИ

ОН

* 4-3912

1973

6 Д535. Инфракрасная эмиссионная спектроскопия высокого разрешения пламен низкого давления. Hansen P., Strong J., Vanpree M., Vidaud P. High resolution infrared emission spectroscopy of low pressure pre-mixed flames. «Infrared Phys.», 1973, 13, № 4, 327—332 (англ.)

Измерены эмиссионные спектры пламен ($O_2-C_2H_4$, H_2-Cl_2 и H_2-CIF_3) в области 500 см^{-1} . Получены точные значения волновых чисел и профили спектральных линий основного состояния ОН и HCl, а также ранее не исследовавшиеся линии спектра HF. Используемый спектрометр имеет щелочно-галогидную оптику и охлаждаемый жидким гелием детектор. Достигнутое разрешение для чисто вращательных линий HF, HCl, H_2O и ОН составляет $0,1\text{ см}^{-1}$. Ю. К. Бобров

профиль
спектр
линий

Ф. 1974 № 6

В

43

пламена ☒
HCl, HF;

OH

Julienne P.S. 1973

Mol Galactic Environ

negueccous.

Proc Symp 1971 (Publ 1973)

353-73 (eng)

(cu d'0, III)



40522.73 16
Ch, Ph, TE

ОН

40604

02

1973

кв. мех. расч. * 3-4960

К р. N 40522.7299

Karo Arnold, Krauss Morris, Wahl Arnold C.
Recent applications of the multiconfiguration self-consistent field method to polarizabilities, excited states, Van der Waals forces, and triatomic surfaces.

"Int. J. Quant. Chem. Symp.", 1973 N 17, 343-159
(англ.)

088 095

= 1 0 7

ВИНИТИ

30711.6106

Ph, Ch, TE, MGU

OH

интер.: ε ; 30088

Klein Lothar.

Strengths of the rotational lines of OH
($A^2 \Sigma^- X^2 \Pi$) and occupation of the molecular energy levels in arc plasmas.

"J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer",
1973, 13, N6, 581-594 (англ.)

888

890

09 07

0914 ВИНИТИ

OH

XI - 4132

1973

(u.n.)

138734a Calculation of Rydberg states of some diatomic molecules. Lefebvre-Brion, H. (Cent. Mec. Ondul. Appl., Paris, Fr.). *J. Mol. Struct.* 1973, 19(1), 103-7 (Eng). The virtual orbital method and the variational method for the calcn. of the Rydberg states were compared. The potential curves for the 1st $^1\Sigma^-$ and $^3\Sigma^-$ Rydberg states of OH were calcd. to be unstable.

C.A. 1974. 80. n24.

ОН

XI-4132

1973

Прим.

4 Б22. О расчете ридберговских состояний некоторых двухатомных молекул. Lefebvre-Brion H. On the calculation of Rydberg states of some diatomic molecules. «J. Mol. Struct.», 1973, 19, № 1, 103—107 (англ.)

Проведено сравнительное изучение двух методов расчета ридберговских состояний двухатомных молекул, основанных на одноклеточном приближении: 1) решение точных уравнений Хартри—Фока для каждого отдельного состояния; 2) приближение виртуальных орбиталей. В случае иона с открытой оболочкой для выполнения условия самосогласования для ридберговской орбитали вводился учет конфигурац. взаимодейст-

расчет
ридберг.
состоян.

х. 1975. мч.

вия между одновозбужденными ридберговскими состояниями. Метод применен к расчету $^2\Sigma^-$ - и $^4\Sigma^-$ -состояний ОН. Показано, что эти состояния являются нестабильными. Обсуждены отличия ридберговских состояний от других возбужденных состояний двухатомных молекул.

Б. И. Жилинский

O_2 ; NF ; SO ; SeO ; H_2 ; OH ; CO_2 ; 1973
 NO ; Na_2 ; CS ; CN ; BaO ; CS_2 ; Y_2 (обзор
сентябрь)
IX 4785

Levy D. H.

Adv. Magn. Resonance. Vol. 6. New-York
- London, 1973, 1-71 (англ.)

Gas phase magnetic resonance of
electronically excited molecules.

P.M. Pub., 1975, 3D 267 10

OH

1973

gun. moment

42626r Electric dipole moments of hydroxyl and hydroxyl-d radicals by molecular beam electric resonance. Meerts, W. L.; Dymanus, A. (Fys. Lab., Kathol. Univ., Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys. Lett.* 1973, 23(1), 45-7 (Eng). The Stark shifts of hyperfine A-doubling transitions originating from the $^2\Pi_{1/2}$ levels of OH and OD were obsd. From these shifts, the elec. dipole moments were calcd.: 1.6676(9)D for OH and 1.65312-(14)D for OD.

C. A. 1974. 80. N 8

OH

XV-3575

1973

2 Б170. О пересечении $^4\Sigma^-$ и $A^2\Sigma^+$ -состояний в OH.
 Palmer H. B., Naegeli D. W. On the crossing of the
 $^4\Sigma^-$ and $A^2\Sigma^+$ states of OH. «J. Chem. Phys.», 1973, 59,
 № 2, 994 (англ.).

На основании исследования распределения интенсивности в спектре испускания OH (переход $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$) установлено, что преддиссоц. возмущение состояния $A^2\Sigma^+$ отвечает энергии $40\,300\text{ см}^{-1}$ (относительно минимума основного состояния $X^2\Pi$). Эта величина энергии совместно с известным термом $^4\Sigma^-$ позволяет вычислить точку пересечения этого терма с возмущающим. Эта точка отрезает межъядерному расстоянию $1,35\text{ Å}$ и совпадает с величиной, предложенной ранее на основании экспериментов по определению времени жизни колебательных состояний терма $A^2\Sigma^+$. Поскольку найденная величина межъядерного расстояния весьма близка к величине $1,40\text{ Å}$, полученной неэмпирич. расчетом пересечения $^4\Sigma^-$ и $A^2\Sigma^+$ термов, возмущающий терм, ответственный за преддиссоциацию состояния $A^2\Sigma^+$, должен быть классифицирован как $^4\Sigma^-$.

Е. И. Дашевская

преддиссоц.

x. 1974

N2

1973-5

OH

XI - 3575

1973

(M.N.)

85014m Crossing of the $4\Sigma^-$ and $A^2\Sigma^+$ states of hydroxyl.
Palmer, H. B.; Naegeli, D. W. (Dep. Mater. Sci., Pennsylvania
State Univ., University Park, Pa.). *J. Chem. Phys.* 1973,
59(2), 994 (Eng). A reply is made to the polemic of R. A. Suther-
land and R. A. Anderson (*ibid.* 1973, 58, 1226) on the work of N.
and P. (*J. Mol. Spectrosc.* 1967, 23, 44) and P. and N. (*J. Mol.*
Spectrosc. 1968, 28, 417) concerning the predissocn. of OH-
($A^2\Sigma^+$).

1991-5

C.A. 1973. 79 N 14

ОН

XI - 3575

1973

12 Д207. О пересечении состояний $4\Sigma^-$ и $A^2\Sigma^+$ радикала ОН. Palmer H. B., Naegeli D. W. On the crossing of the $4\Sigma^-$ and $A^2\Sigma^+$ states of OH. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 2, 994 (англ.)

Указывается, что из работ авторов по изучению эмиссии системы $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\pi$ радикалов ОН и OD следует, что пересечение потенц. кривой $A^2\Sigma^+$ с отталкивательной потенц. кривой $4\Sigma^-$ имеет место при межъядерном расстоянии 1,35 Å и при энергии 40 300 см⁻¹ (относительно минимума основного состояния $X^2\pi$).

Б. Ф. Горднец

исп. менш
крив

Ф. 1973 N 12

1991-1661

40206.3711

TE, Ch, Ph, MGU

OH

96201

1973

1705

Politzer P., Elliott J.D., Meroney B.F.
Properties of atoms in molecules. A
proposed method for calculating the
extent of distortion of an atom. "Chem.
Phys. Lett.", 1973, 23, N 3, 331-334
(англ.)

025 025 v 31

0038 1114

ВИНИТИ

OH

1973

Roux F.,

изд. 1973.

абс. и математика.

These doct. sci.
Phys. Univ. Claude
Bernard Lyon,
1973, 241 p.

(с. 100; III)

OH

J. Simons; W.D. Smith.

1973.

"J. Chem. Phys"

($\bar{A}e$)

1973, 58, N 11, 4899-4904.

"Theory of electron affinities
of small molecules"

OH

1973

Sinnoglu Oktay, Fehik I. Omer.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, 1117, 5453-5442.

Знамен
часы

(см. ВН; III)

31211.8825
TE, Ch, Ph, MGU

014

40892

1973

У-2707

Tait K.S., Kolb C.E., Baum H.R.
and vibrational
Classical calculations of rotational exci-
tation in energetic atom-diatomic hydride
collisions.

"J.Chem. Phys.", 1973, 59, N 6, 3128-3137

(англ.)

1021 ББК

1005 1006

1 0 1 4

ВИНИТИ

OH
SH
SeH

XI-3607

1973

23-5125. Спектры фотоотщепления электронов от анионов двухатомных гидридов. Walker T. E. H. The photodetachment spectra of diatomic hydride anions. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 19, № 4, 493—496 (англ.)

Основное электронное состояние молекул AH^- (где $\text{A}=\text{O}, \text{S}$ или Se) является дублетным. Поэтому для процессов фотоотщепления электрона $\text{AH}^-(^1\Sigma^+) + h\nu \rightarrow \text{AH}(^2\Pi_{1/2}) + e^-$ и $\text{AH}^-(^1\Sigma^+) + h\nu \rightarrow \text{AH}(^2\Pi_{3/2}) + e^-$ следует ожидать наличия 2 энергетич. порогов. Соответствующее расщепление наблюдалось экспериментально лишь для SeH^- , для к-рого константа спин-орбитального взаимодействия в молекуле SeH $A=1800 \text{ см}^{-1}$. Величины A для OH и SH равны соотв. -139 и -376 см^{-1} , что достаточно для обнаружения расщепления в фотоионизац. спектрах анионов OH^- и SH^- . Однако в экспериментах это расщепление не наблюдается. Причиной этого является вращательное взаимодействие (ВВ) в промежуточ. комплексе $\text{AH} + e^-$, из к-рого происходит отщепление электрона. С учетом ВВ произведены расчеты относит.

считали

X. 1973 N 23

(+2) X

вероятностей переходов в соотв-щие конечные состояния комплекса и зависимостей сечений фотоотщепления электрона от избыт. энергии фотона. Найдено, что расщепления для наиболее интенсивных Q-ветвей вращательной структуры спектров фотоионизации должны составлять 1674 см^{-1} при 1300°K и 1746 см^{-1} при 300°K для аннионов SeH^- ; 244 см^{-1} для SH^- (между Q-ветвями спектра имеются еще 2 полосы значительной интенсивности, что делает возможным наблюдение 2 энергетич. порогов лишь при высоком разрешении); 54 см^{-1} для OH^- . Таким образом, из-за ВВ расщепление между 2 наиболее интенсивными вращательными Q-ветвями сильно уменьшается по сравнению с величиной A , несмотря на то, что вращательные постоянные B для обоих конечных состояний близки. Учет ВВ приводит к появлению числа вращательных ветвей выше значения σ , предсказываемого простой теорией. В рассмотрении не учтены др. эффекты, способные изменять спектры фотоотщепления электронов — взаимодействие континуумной орбитали с колебаниями молекулы и вращательные взаимодействия высших порядков типа Λ -удвоения, величина к-рого в $\text{OH}^- \sim 10\text{ см}^{-1}$.

В. Е. Скурат

41226.9071

Ph, Ch, TC

OH

50701

103

1974

45-7711

Becker K.H., Capelle G., Haaks D., Tarczyk T. Lebensdauer-messungen an selektiv angeregten Zuständen von zweiatomigen Hydriden. "Ber. Bunsenges. phys. Chem.", 1974, 78, N 11, 1157-1160

(нем., рез.англ.)

0261.01K

248 248 - 2 53

ВИНИТИ

40402.3645

Ch, TE

OH (флуоресценция)

50701 02.

1974

Becker K.H., Haaks D., Tatarczyk T.
Monitoring of radicals with a tunable
dye laser. "Ber. Bunsenges. phys. Chem.",
1974, 78, N 2, 204

(англ.)

(англ. OH, I)
0076 нм

061 062

0069

ВИНИТИ

50218.9174

Ph, Ch, TC

011

(E) 1974
96200-32
пр. 1
диссерт.

1974

4-8128

Beenakker C.I.M., Heer F.J.de, Krop H.B.,
Möhlmann G.R. Dissociative excitation
of water by electron impact.

"Chem. Phys.", 1974, 6, N 3, 445-454

(англ.)

0305 лнк

278 280

297

ВИНИТИ

OH

*4-5659

1974.

IX - 4741

M.H.; J;

Mustin F.H., Elnot J.W.,
J. Chon Cos. Parady Brans.,
1974, Part 2, 70, US, 826-35.

(cor. L_2^+ ; III)

Li_2 , Li_2^- , LiH , BeH^+ , Be_2^- , $\overset{1974}{18} 4703$
 $LiBe$, CH , CH^+ , NH^+ , OH ($\bar{O}$, $\mu. u.$,
ракет)

Blustin P.H., Linnett J.W.,
J. Chem. Soc. Faraday Trans,
1974, Part 2, 70, N5, 837-52

10. 6

OH

1974

(M)

Brus R.E., Person W.B.,

J. Chem. Phys., 1974, 61,
61, 85, 1779-81.

(em. LiH; III)

41018.6813

Ph, Ch, TC

OH

96615 02

1974

2593

Caralp Louis, Cavalier Jean-Claude.

Détermination des géométries d'équilibre
et des constantes de forces par une
méthode de type CNDO. "J. Mol. Struct.",
1974, 23, N 1, 153-160

(англ.)

0215 пик

186 187 0207

ВИНИТИ

1974

ОН

8 Д919. Исследование кинетического поведения $\text{OH}(\text{X}^2\Pi$ и $\text{A}^2\Sigma^+)$ методом молекулярной резонансной флуоресценции. Clyne Michael A. A., Down Stephen. Kinetic behaviour of $\text{OH X}^2\Pi$ and $\text{A}^2\Sigma^+$ using molecular resonance fluorescence spectrometry. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1974, Part 2, 70, № 2, 253—266 (англ.)

Описан метод исследования кинетики радикала $\text{OH}(\text{X}^2\Pi, v=0)$ в проточной разрядной системе. Оценка констант OH производилась методом молекулярной резонансной флуоресценции (переход $\text{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \text{X}^2\Pi (0,0)$). Определены сечения тушения $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ водой, азотом,



Д. 1974. № 8

аргоном и гелием. Интенсивность резонансной флуоресценции прямо пропорциональна концентрации $\text{OH}(X^2\Pi, v=0)$ вплоть до концентраций $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Распад радикалов OH при общем давлении $120 \text{ н} \cdot \text{м}^{-2}$ обусловлен в основном

реакцией $\text{OH} + \text{OH} \xrightarrow{k} \text{H}_2\text{O} + \text{O}$ и гибелью на стенке. Константа скорости реакции (k), определенная двумя независимыми методами, равна для t -ры 300°K $(1,4 \pm 0,2) \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$. Из сопоставления полученных результатов с данными более ранних исследований получено среднее значение $k = (1,7 \pm 0,6) \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$. Библ. 37. И. Дворников

OH

N-4393 X4-8118

1974

12 Б13. Неэмпирическое исследование $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+$ состояний OH. I. Потенциальные кривые и свойства. Chu Shih-I., Yoshimine M., Liu B. Ab initio study of the $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+$ states of OH. I. Potential curves and properties. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 12, 5389—5395 (англ.)

(M.H.)

Методом конфигурац. взаимодействия (KB) проведен расчет потенциальных кривых молекул OH в электронных состояниях $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+$. Одночастичный базис состоял из функций слейтеровского типа: (O, 5s4p3d1f/H, 4s3p2d). Баис KB был отобран путем предв. расчета многоконфигурац. ССП с последующей оценкой по первому порядку теории возмущений наиболее существенных конфигураций. При построении конфигураций использовались также приближенные натуральные орбитали, полученные с помощью теории возмущений. В итоге,

X. 1975. N 12

расчет каждой потенциальной кривой ОН состоял из 4 шагов: 1) расчет в приближении многоконфигурац. метода ССП; 2) расчет КВ с ограниченным набором конфигураций, построенных на основе только валентных орбиталей ССП; 3) отбор наиболее существенных конфигураций и построение натуральных орбиталей, 4) завершающий расчет методом КВ. На последнем этапе КВ было использовано 7311 и 3965 конфигураций для $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+$ состояний, соотв. Получены след. величины спектроскопич. характеристик ОН (в скобках указаны эксперим. значения): $R_e(X^2\Pi) = 1,841 (1,834)$ ат. ед.; $R_e(A^2\Sigma^+) = 1,906 (1,913)$ ат. ед.; $D_e(X^2\Pi) = 4,43 (4,63)$ эв; $D_e(A^2\Sigma^+) = 2,29 (2,53)$ эв; $\mu(X^2\Pi, \gamma=0) = 1,634 (1,668)$ D. Рассчитаны также значения квадрупольных моментов и градиенты электр. поля на ядрах. А. Дементьев

гам,
X K

OH

N-4393

*4-8118

1974

(M. n)
(Kb. exx.
pactem)

15953a Ab initio study of the $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+$ states of the hydroxyl radical. I. Potential curves and properties. Chu, Shih-I; Yoshimine, M.; Liu, B. (Cent. Astrophys., Harvard Coll. Obs., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(12), 5389-95 (Eng). The CI wave functions, potential energy curves, and 1-electron properties are presented. The calcd. equil. internuclear sepn. (R_e , in bohrs), dissoen. energy (D_e , in eV), and dipole moment (μ , in D) in the $v = 0$ vibrational state, resp., are: OH($X^2\Pi$), 1.841, 4.43, 1.634; OH($A^2\Sigma^+$), 1.906, 2.29, 1.875. Calcd. values are also given for OD. The spectroscopic consts. for OH and OD calcd. from the theor. potential curves agree satisfactorily with the available exptl. data. The other mol. properties calcd. include the quadrupole moments and the elec. field gradients at the nuclei.

C.A. 1975 83 N2

ХУ-8118
Х-4393

1974

ОН

Д163. Неэмпирическое исследование $X^2\Pi$ - и $A^2\Sigma^+$ -состояний ОН. I. Кривые потенциальной энергии и свойства. Chu Shih-I, Yoshimine M., Liu B. Ab initio study of the $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+$ states of OH. I. Potential curves and properties. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 12, 5389—5395 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны термы и молекулярные свойства $X^2\Pi$ - и $A^2\Sigma^+$ -состояний радикала ОН. Волн. ф-ция системы представлялась в виде разложения по n -частичному базисному набору т. наз. ф-ций состояния конфигурации (ФСК), которые, в свою очередь, строились в виде линейной комбинации слэтеровских детерминантов, состоящих из подобранных по симметрии ф-ций элементарного базиса. Все ФСК выбраны с учетом спиновой и орбитальной симметрии полной системы. Расчет был разбит на следующие этапы:

м.п.
До
Кривые
потенц.
энерг.

901975N6

1) КВ-расчет с ограниченным набором ФСК, дающим качественно правильное поведение терма; 2) расчет в 1-ом порядке теории возмущений с использованием волн. ф-ций КВ, полученных на 1-ом этапе, с целью отбора ФСК для построения базиса n -частичной волн. ф-ции для конечного КВ-расчета; 3) КВ-расчет с ф-циями, полученными на 2-ом этапе, упорядоченными по симметрии и в порядке уменьшения чисел заполнения и обрезанными 12σ -, 9π -, 6δ - и $1f$ -типами орбиталей. Найдены потенц. кривые, спектроскопич. постоянные и зависимости от расстояния дипольного и квадрупольного момента. Рассчитанные энергии диссоциации $X^2\Pi$ - и $A^2\Sigma^+$ -термов отличаются от экспериментальных соответственно на 0,2 и 0,24 эв. Отмечается, что это различие может быть уменьшено при расширении одночастичного базиса.

А. Зембеков

OH

оттиски 2070 1974
XI-4046

18 Б1153. Определение сродства к электрону OH , NH_2 , NH , SO_2 и S_2 методом лазерного фотоотщепления электрона. Celotta R. J., Bennett R. A., Hall J. L. Laser photodetachment determination of the electron affinities of OH , NH_2 , NH , SO_2 , and S_2 . «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 5, 1740—1745 (англ.)

 Ae^-

На установке со скрещенными лазерным лучом и пучком отрицат. ионов OH^- , NH_2^- , NH^- , SO_2^- , S_2^- изучены энергетич. распределения электронов, возникающих в процессе фотоотщепления. Использовали лазер на ионах аргона с фиксированной частотой. По распределениям определены величины сродства к электрону (эв): OH 1,829 (+0,010; -0,014); NH_2 $0,779 \pm 0,037$; NH $0,38 \pm 0,03$; SO_2 $1,097 \pm 0,036$; S_2 $1,663 \pm 0,040$. Измерен также параметр β анизотропии углового распределения фотоэлектронов при 4880 А, оказавшийся равным $-0,993 \pm 0,040$ и $0,027 \pm 0,012$ для OH^- и NH_2^- соотв. Получены данные о колебательных константах отрицат. ионов.

В. Е. Скурат

(44)

☒

X. 1974
N18

ОН

оттисы 2070
XL-4046

1974

(Аe)

8 Д431 Определение сродства к электрону OH , NH_2 , NH , SO_2 и S_2 методом лазерного фотоотрыва. Celot-
ta R. J., Bennett R. A., Hall J. L. Laser photodetach-
ment determination of the electron affinities of OH , NH_2 ,
 NH , SO_2 and S_2 . «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 5, 1740—
1745 (англ.)

Исследовались энергетич. спектры электронов, полу-
ченных в результате фотоотрыва от ионов OH^- , NH_2^- ,
 NH^- , SO_2^- и S_2^- под воздействием излучения ионного
Аг-лазера. Полученные значения сродства к электрону
для OH , NH_2 , NH , SO_2 и S_2 равны соответственно:
1,829; 0,779; 0,38; 1,097 и 1,663 эв. Для OH^- и NH_2^- из-
мерен параметр анизотропии углового распределения
электронов, возникающих при облучении светом с
 $\lambda = 4880 \text{ \AA}$, равный, соответственно, $-0,993 \pm 0,040$ и
 $0,027 \pm 0,012$. Библ. 21. И. Дворников

Ф. 1974. № 8

✕

+4

+1 м.с.

ОН

1974

Константа
квадрат.
реакции.

18 Б968. Кинетическое поведение $\text{OHX}^2\pi$ и $\text{A}^2\Sigma$ при помощи молекулярной резонансно-флюоресцентной спектроскопии. Clyne Michael A. A., Down Stephen. Kinetic behaviour of $\text{OHX}^2\pi$ and $\text{A}^2\Sigma^+$ using molecular resonance fluorescence spectrometry. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1974, Part 2, 70, № 2, 253—266 (англ.)

Поточная система с резонансно-флюоресцентной регистрацией радикалов. ОН использована для определения константы скорости квадратичной гибели радикалов. Радикалы $\text{OH X}^2\Pi$ образовывались в р-ции $\text{H} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{NO}$. Резонансно-флюоресцентный спектр имеет наибольшую интенсивность в области 306,5—

Х. 1974 N 18

312 мкм и содержит, главным образом, тонкую вращательную структуру полосы 0,0 системы $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$. Константа скорости тушения состояния $A^2\Sigma$ при 300° К составляет $(2,7 \pm 0,3) \cdot 10^{-10} - (1,2 \pm 0,3) \cdot 10^{-11}$; $< 5 \cdot 10^{12}$ см³ молекула⁻¹·сек⁻¹ для тушения H₂O, N₂ и Ar и He соответственно. Для константы скорости квадратичной рекомбинации радикалов OH получено значение $(1,7 \pm 0,6) \cdot 10^{-12}$ см³ молекула⁻¹·сек⁻¹. Точность определения этой величины существенно зависит от точности определения константы скорости р-ции распада $OH \rightarrow 1/2 H_2 + 1/2 O_2$.

Л. Ю. Русин

41014.8793
Ch, Ph, TC

OH

40392

02

1974

2554

Dayis M.G., McGregor W. ■ K., Mason A.A.

OH ■ chemiluminescent radiation from lean
hydrogen-oxygen flames.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 4, 1352-1356

(англ.)

0211 пик

183 184

- 203

ВИНИТИ

ОН

XI-3969

1974

15 Б328. Новый анализ микроволнового спектра радикала гидроксила. Destombes Jean-Luc, Marglière Claire, Rohart François, Burie Jean. Nouvelle analyse du spectre hertzien du radical hydroxyl. «С. г. Acad. sci.», 1974, В278, № 8, 275—278 (франц.)

На штарковском спектрометре измерены и затем идентифицированы два основных перехода Λ -удвоения радикала ^{16}OH в состоянии $^2\Pi_{3/2}$ с $I=13/2$ в области 52 700 Мгц. На основе полученных и известных из лит-ры данных определены по методу наименьших квадратов 3 постоянных центробежного искажения и 4 постоянных сверхтонкого магнитного взаимодействия. По составленной программе рассчитаны частоты переходов Λ -удвоения с точностью не хуже 170 кгц для $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$ состояний с I от 7/2 до 17/2. Точность расчета ниже точности эксперим. измерений. С. Н. Мурзин

м.п.

X/1974 N 15

ОН

XI-3969

1974

7 Д172. Новый анализ микроволнового спектра гидроксильного радикала. Destombes Jean-Luc, Marlière Claire, Rohart François, Burie Jean. Nouvelle analyse du spectre hertzien du radical hydroxyl. «С. г. Acad. sci.», 1974, В278, № 8, 275—278 (франц.)

С учетом спин-орбитального взаимодействия и центробежного искажения выполнен теоретич. анализ микроволн. спектра радикала ОН. В базисе волн. ф-ций случая «а» Гунда составлена матрица электронно-вращательной энергии и точным методом диагонализации вычислены частоты переходов между компонентами Λ -удвоения вращательных уровней с $J=1/2 \div 17/2$ основного электронного состояния $^2\Pi_{1/2,3/2}$. Из сравнения вычисленных и измеренных частот дана идентификация наблюдаемых частот и определены значения молекулярных параметров ОН.

М. Р. Алиев

ф. 1974 № 7

OH

XI-3969

1974

(u.n.)

126406g New analysis of the Hertzian spectra of the hydroxyl radical. Destombes, Jean L.; Marliere, Claire; Rohart, Francois; Burie, Jean (Lab. Spectrosc. Hertziennne, Univ. Sci. Tech. Lille, Villeneuve d'Ascq, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1974, 278(8), 275-8 (Fr). The Hertzian spectrum of the ^{16}OH radical was measured with a Stark modulation spectrometer, and the principal transitions of the A splitting, corresponding to the $J = 13/2$, were identified. A least squares anal. gave the magnetic hyperfine interaction and centrifugal distortion consts. as $D = 17.4$, $D_r = 108.8$, $\delta = -50.7$, $a = 85.7$, $b = -116.8$, $c = 144.5$, and $d = 56.4$ MHz. The $F-F'$ transition frequencies of the $^3\Pi_{1,2}$ and $^3\Pi_{3,2}$ states were calcd. to $J \leq 17/2$.

C.A. 1974. 80 N 22

OH

VI-4434

1974

SO

(A faciens)

105002y Zeeman modulation devices for microwave spectroscopy of free radicals. Destombes, Jean L.; Marliere, Claire; Rosseels, Pierre (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille 1, Villeneuve d'Ascq, Fr.). *J. Phys. E* 1974, 7(12), 996-8 (Fr). Two Zeeman modulation devices are described. In the 1st one, the magnetic field in a solenoid is square-wave modulated at 1 kHz. The 2nd one uses 2 orthogonal sets of Helmholtz coils. The direction of the magnetic field is sine modulated at 12.5 kHz and its amplitude may be chosen in the 0-10-G range. The resolu. and the sensitivity of the app. made it possible to measure new Λ doubling transitions of OH. The Zeeman splitting in the earth magnetic field was also obsd. on the SO radical.

C. A. 1975. 82. N 16(41) ☒

OH

1974

* 48-4500

OD

in much 2273

(u.n.)

1807-IX

138867w Absorption of hydroxyl in the 1200 Å region. Douglas, A. E. (Div. Phys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1974, 52(4), 318-23 (Eng). A strong absorption band of OH was obsd. near 1221 Å. From the anal. of the high resolu. spectra, it was detd. that the upper state is a $^2\Sigma^-$ Rydberg state. The consts. of the OH and the corresponding OD state were obtained. The new absorption band will give interstellar absorption lines of OH at 1221.166, 1222.071, and 1222.524 Å. New consts. also were detd. for the $A^2\Sigma^+$ and $X^2\Pi$ states of OD.



C.A. 1974. 20. N24

ОН

ОД

оттиск 2273

* 3-4500

1974

16 Б167. Спектр поглощения молекулы ОН в области 1200 Å. Douglas A. E. Absorption of OH in the 1200 Å region. «Can. J. Phys.», 1974, 52, № 4, 318—323 (англ., рез франц.)

В спектре поглощения продуктов электрич. разряда в парах воды, сфотографированном с задержкой в несколько микросекунд, найдена интенсивная полоса ОН ~1221 Å. Анализ тонкой структуры спектра показывает, что верхним состоянием является ридберговское состояние $^2\Sigma^-$. Для него получены постоянные (в см^{-1}): $T_0=81797,95$; $B_0=15,2179$; $D_0=16,16 \cdot 10^{-4}$; $\gamma=-0,293$. Аналогичные данные получены для ОД. К новой полосе ОН относятся линии поглощения межзвездного газа 1221,166, 1222,071 и 1222,524 Å. Отмечено, что линии поглощения ОН и ОД расположены так, что оптич. накачка линией Н 1215 Å невозможна. Приведены волновые числа линий и вращательных термов.

Д. И. Катаев

Спектр
поглущ.
(м.п.)

1803-IX

X. 1974 N16

+1

X

ОН

оттиск 2273 *43-4500

1974

8 Д452. Поглощение ОН в области 1200 Å. Douglas A. E. Absorption of OH in the 1200 Å region. «Can. J. Phys.», 1974, 52, № 4, 318—323 (англ.; рез. франц.)

В спектре поглощения радикала ОН обнаружена новая сильная полоса при 11221 Å. В результате анализа спектра установлено, что верхним является состояние $2\Sigma^-$. Вычислены молекулярные константы этого состояния и аналогичного состояния радикала OD. Приведены уточненные значения молекулярных постоянных состояний $A^2\Sigma$ и $X^2\Pi$ радикала OD. Предполагается, что наиболее сильные линии этого перехода могут проявляться в поглощении радикала ОН в межзвездном пространстве. Библ. 9.

И. Дворников

м.и.

XI-4031

ф.1974. №8



OD



40508.6067

Ch, Ph, TE

OH

40892

C12

1974.

2110

Ducas T.W., Javan A.

Measurement of microwave fine structure
in OH infrared transitions using frequ-
ency mixing with metal-to-metal infrared
diodes. "J.Chem.Phys.", 1974, 60, N4,
1677 (англ.)

108

584

0111111

086

087

ВИНИТИ

IX-4907 * 8-8255. 1974

param. m. n., J, D of $C_2, CN, CO, N_2, NO,$
 $O_2, PO, H_2, LiH, BeH, BH, CH, NH, OH, HF$

Engelke S. Z., Beckel C. L.,

Int. J. Quant. Chem., Symp., 1974,

N8, 209-217

Extended nickel β parameters
applied to () 10 diatomic molecules
Proc. X-ray, 1975, 11524

4 03 04 . 8874
TE, Ch, Ph

OH

30526

-1474
1876

Hariharan P.C., Pople J.A.

Accuracy of AN_n equilibrium geometries by
single determinant molecular orbital
theory.

"Mol. Phys.", 1974, 27, N 1, 209-214

(англ.)

0057 КММ

036 039

050

ВИНИТИ

Зак 6620

$\dot{O}H$

1974.

расчет
молку.

(Зн. и плотность)

Hirshfeld F.L., et al.

Mol. Phys., 1974, 27, 15,
1319-1343.

(corr. LiH, - III)

OH

1974

Hotop H, et al.

Ac
chem.

orbital
radiation sc

Acad Mass Spectrom
1974, 6, 281-93 (orig)

(see Sc; III)

Оттиски 2067

1974

ОН

ОД

($A\bar{e}$)

(8 Д430) Исследование при высоком разрешении фотоотрыва электронов от ионов OH^- и OD^- в пороговой области 7000—6450 Å. Hotoor H., Patterson T. A., Lineberger W. C. High resolution photodetachment study of OH^- and OD^- in the threshold region 7000—6450 Å. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 5, 1806—1812 (англ.)

С помощью перестраиваемого узкополосного (0,5—1 Å) лазера на красителе исследован фотоотрыв электрона от ионов OH^- и OD^- в спектральной области 7000—6450 Å. Из детального сопоставления наблюдаемых сечений с результатами модельных расчетов получены значения сродства к электрону: для OH^- и OD^- , соответственно, $(14723 \pm 15) \text{ см}^{-1}$ и $(14703 \pm 15) \text{ см}^{-1}$. Наблюдаемый изотопный эффект для сродства к электрону может быть почти целиком приписан различию в положении самых нижних вращательных уровней в $OH(^2P_{3/2})$ и $OD(^2P_{3/2})$.
Библи. 20. И. Дворников

Ф. 1974. № 8

(+1)

☒

(+1)

м.с.

1974

OH

X4-6436

X1-4281

are discussed, referring to the previous work.

S4056f Molecular constants of vibrationally excited hydroxyl radical from electron paramagnetic resonance. Lee, K. P.; Tam, W. G. (Cent. Rech. At. Mol., Univ. Laval, Quebec, Que.). *Chem. Phys.* 1974, 4(3), 434-9 (Eng). OH radicals in the vibrational states $v = 5$ to $v = 9$ of the ground $^2\Pi_{3/2}$, $J = 3/2$ state were detected by EPR at X-band frequencies. From an anal. of the complete spectra, 5 mol. parameters were obtained for each v . By adopting Van Vleck's hypothesis of pure precession, λ_v and the matrix element $\langle \Pi | B L_z | \Sigma \rangle_v$ were detd.

(M.H)

C.A. 1974. 81. N14

40508.6012

TE, Ph, Ch

40892

OH (2π)

C2

1974

X

4-4901

Lie George C., Clementi Enrico.

Study of the electronic structure of molecules. XXI. Correlation energy corrections as a functional of the Hartree-Fock density and its application to the hydrides of the second row atoms. CM.HNON
"J.Chem.Phys.", 1974, 60, N4, 1275-1287

41101.6607

TC, MGU, Ch

OH

нотену-кр.
96615 02

(Ридберг. сост.)

1974

2652

Lefebvre-Brion H. On the calculation
of Rydberg states of some diatomic
molecules. "J. Mol. Struct.", 1973, 19,
N 1, 103-107
(англ.)

0225 пик

198 199

ВИНИТИ

HO

1974

Lovas F.J., et al.
J. Phys. and Chem. Ref. Data,
1974, 3, 609-769.

M.B.

(em. BaO; III)

41226.9085
Ph, Ch, TC

OH 50701 03

1974

* 4-7710

Mann B., Neikes T., Schmidt E., Luck
W.A.P. Matrix-Isolationsspektroskopie
an H_2O und D_2O im Infrarot- und fernem
Infrarotgebiet. "Ber. Bunsenges. phys.
Chem.", 1974, 78, N 11, 1236-1241

(нем., рез. англ.) 0261 дин

248 248 = 2 53 2 63 ВИНТИ

ОН

XI-4359

1974

4 Д173. Исследования эффектов электронной корреляции методами ПНО-КВ и ПСЭП. Ч. II. Потенциальные кривые и функции дипольного момента радикала ОН. Meyer Wilfried. PNO-CI and CEPA studies of electron correlation effects. II. Potential curves and dipole moment functions of the OH radical. «Theor. chim. acta», 1974, 35, № 4, 277—292 (англ.)

(М.П.; В.И.; Д.С.) Проведены неэмпирич. расчеты потенц. кривых (ПК) и ф-ций дипольного момента (ДМ) низших электронных состояний радикала ОН. Использовались вариационный метод с учетом взаимодействия конфигураций (КВ), построенных из псевдонатуральных орбиталей (ПНО) (РЖФиз, 1972, 6Д160), и приближение связанных электронных пар. (ПСЭП) (РЖФиз, 1973, 7Д157).

См. продолж. →

Ф. 1975. № 4

Спектроскопия.

постоянные и частоты колебаний хорошо согласуются с экспериментом для основного состояния $^2\Pi$ и несколько хуже для возбужденных состояний $^2\Sigma+OH$, $^3\Sigma-OH^+$. Проанализированы корреляционные вклады в ионизационный потенциал (ИП), энергию перехода $^2\Pi \leftrightarrow ^2\Sigma^+$ и величину электронного сродства и улучшена оценка энергии диссоциации и ИП. Рассмотрено пересечение ПК отталкивательных состояний $^4\Sigma$, $^4\Pi$ с ПК $^2\Sigma^+$, согласие с экспериментом неудовлетворительное. Ход кривой ДМ и равновесное значение для $^2\Pi$ хорошо согласуются с экспериментом. Делается вывод, что ПСЭП превосходит любой вариац. метод с КВ, учитывающим только дваждызамещенные конфигурации.

М. С. Борисов

OH

XI-4359

1974

9 Б20. Изучение эффектов электронной корреляции методом ПНО КВ ПСЭП. Meyer Wilfried. PNO—CI and CEPA studies of electron correlation effects. II. Potential curves and dipole moment functions of the OH radical. «Theor. chim. acta», 1974, 35, № 4, 277—292 (англ.)

 μ, n, ϵ_i

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с использованием псевдонатуральных орбиталей (ПНО) в приближении связанных электронных пар [(ПСЭП), см. пред. сообщ. РЖХим, 1973, 15Б42] проведен неэмпирич. расчет

⊕

⊗

OH⁺(ε_i)

x. 1975. N9

потенциальных кривых низколежащих электронных состояний радикала OH . Использован базис гауссовых функций $11s, 6p, 2d$ и $1f$ на атоме O и $5s, 2p$ и $1d_{\sigma}$ на атоме H . Волновая функция основного состояния $^2\Pi$ включала 208 конфигураций, дающих вклад не меньше, чем 10^{-4} ат. ед. и построенных из 251-ПНО. Для основного состояния найдены след. значения молек. постоянных, $R_e = 0,972$ (0,971) $\text{\AA}$, $\omega_e = 3742$ (3739) cm^{-1} , $D_e = 4,35$ (4,63) эв, $\mu = 1,686$ (1,66) D . В скобках даны эксперим. значения. В том же базисе рассчитаны первое возбужденное состояние OH с симметрией $^2\Sigma^+ [T_{2\Pi - ^2\Sigma^+} = 32690$ (32440) $\text{cm}^{-1}]$ и основное состояние $^3\Sigma^-$ катиона OH^+ . Рассмотрена возможность преддиссоциации OH из-за пересечения потенциальной кривой $^2\Sigma^+$ с отталкивательной кривой $^4\Sigma^-$; рассчитанное положение точки пересечения не совпадает с положением, найденным по данным об интенсивностях. По кривым дипольного момента основного состояния рассчитаны вероятности нек-рых ИК-переходов.

В. Я. Симкин

OH

Morimoto M.

1974

и. в. снхср

Tenmon Geppo

1974, 67 (10) 301-5 (Sep.)

⊖ (сир. HCN; III)

41119.1856

TC, Ph, Ch

OH

X-4493

29864 02

1974

2777

Murrell John N., Sorbie Kenneth S. New
analytic form for the potential energy
curves of stable diatomic states.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,
Part 2, 70, N 9, 1552-1556

(АНГЛ.)

(см. HF; III)

0236 ДИК

216 219 2 28

ВИНИТИ

71-5295

1974

OH

checkmp

162386a Numerical calculations of uv emission and absorption spectra of hydroxyl radicals. Neer, Michael E. (Technol. Inc., Dayton, Ohio). U. S. N. T. T. S., AD Rep. 1974, No. 786021/6GA, 147 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Gout. Rep. Announc.* (U. S.) 1974, 74(24), 71. The report presents the details and uses of computer program designed to predict the uv emission and absorption spectra of OH assoc. with combustor flowfields. The intended purpose of the computer program is to facilitate the development of spectroscopic diagnostic techniques for specific application to supersonic mixing and combustion. The math. models used to represent the emitting and absorbing gas are given. Geometry and app. considerations are discussed, as well as calibration procedures. The computation scheme is outlined including the basic modes of operation, and the manner in which input data are submitted is explained. The various uses of the computer program are demonstrated and comparisons are made with exptl. spectra. Two graphical inversion techniques are also presented, 1 of which can be used to obtain radial profiles of temp. and OH no. d. from an axisym. combustor flowfield. A listing of the computer program and a partial printout are included.

C.A. 1975, 22 N24

1974

ОН

Отчет по научно-иссл. работе
ИВТАН, отдел №8.

и.п.

„Термодинамический св. ва
зота, водорода и их соедине-
ний“

ОН

*4-7279

1974

6 B247. Взаимодействия между нижними валентными состояниями радикала ОН. Smith Wm. Hayden, Elmergreen Bruce G., Brooks Neil H. Interactions among the lower valence states of the OH radical. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 7, 2793—2799 (англ.)

Спектр

Чтобы выяснить происхождение наблюдаемой экспериментально преддиссоциации в состоянии $A^2\Sigma^+OH$, рассчитано перекрывание колебательных волновых функций связывающего уровня в состоянии $A^2\Sigma^+$ с колебательным континуумом состояний ОН, возникающих из основного электронного состояния разделенных атомов. Сильная зависимость от вращательного квантового числа обнаружена для перекрывания состояний $a^4\Sigma^-$ и $X^2\Pi$ с состоянием $A^2\Sigma^+$. След. отсюда значения ширины преддиссоциирующих уровней сравниваются с эксперим. данными. Хорошее согласие достигается, если предположить, что безызлучательные переходы из состояния $A^2\Sigma^+$, уменьшающие его заселенность, происходят, гл. обр., в состояние $a^4\Sigma^-$. Сравнивается с лит. данными зависимость момента перехода от межъядерного расстояния. Отмечается связь проведенного анализа с проблемой образования ОН из двух атомов.

Резюме

x. 1975. №6

ОН

ХУ-7279

1974

4 Д454. Взаимодействие между нижними валентными состояниями радикала ОН. Smith Wm. Hayden, Elmergreen Bruce G., Brooks Neil H. Interactions among the lower valence states of the OH radical. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 7, 2793—2799 (англ.)

предиссоц.

С целью выяснения причины предиссоциации нижних колебательных уровней состояния $A^2\Sigma^+$ радикала ОН рассчитано перекрывание колебательных волн функций связанных уровней с колебательными континуумами состояний, образованных из норм. атомов. Рассчитанные ширины предиссоциации согласуются с эксперим. значениями, если предположить, что состояние $a^4\Sigma^-$ доминирует в безызлучательной депопуляции $A^2\Sigma^+$. Получена зависимость величины момента перехода от межъядерного расстояния. Библ. 33.
И. Дворников.

ф. 1975. ХУ

44-7279

1974

OH

✓ 179239g Interactions among the lower valence states of the hydroxyl radical. Smith, William Hayden; Blumberg, Bruce G.; Brooks, Neil H. (Princeton Univ. Obs., Princeton, N.J.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(7), 2793-9 (Eng). In order to define the origins of exptl. obsd. predissocns. within the $A^2\Sigma^+$ state of OH, overlaps were computed of the bound level vibrational wave functions in the $A^2\Sigma^+$ state with the vibrational continua of states of OH arising from the ground electronic state sep'd. atoms. Rapid variation of overlap with rotational quantum no. occurs for the $a^4\Sigma^-$ and X^2H_1 states with the $A^2\Sigma^+$ state. The resulting predissocn. widths are compared with the exptl. data and reproduced it by assuming that the $a^4\Sigma^-$ state dominates in radiationless depopulation of the OH $A^2\Sigma^+$ state. The dependence of the transition moment upon internuclear distance is derived, and compared with previous results. Implications of this anal. in terms of the 2 body formation of OH are indicated.

W. H. Brooks

C.A. 1974. 8/1 v 26

#4-7700

1974

ОН

(потенц.
Кривая, М)

8534-IX

4 Д258. Исследование потенциальной кривой и дипольного момента основного состояния ОН методом оптимизированных валентных конфигураций. Stevens Walter J., Das G., Wahl Arnold C., Krauss Morris, Neumann David. Study of the ground state potential curve and dipole moment of OH by the method of optimized valence configurations. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 9, 3686—3699 (англ.)

Методом оптимизированных валентных конфигураций (ОВК) рассчитаны потенциальная кривая и кривая дипольного момента (ДМ) состояния $X^2\Pi$ радикала ОН. Теоретич. значение энергии диссоциации 4,53 эв близко к эксперим. 4,63 эв. Для ДМ при эксперим. длине связи получено 1,674 ед. Дебая (наиболее надежное эксперим. значение $1,66 \pm 0,01$ ед. Дебая). Подробно обсуждается метод ОВК как специфич. применение самосогласованной многоконфигурац. теории.

М. С. Борисов

ф. 1975. IV

XI-4358

1974

OH

nonemg.
Kpudat

6173H Ground state potential curve and dipole moment of hydroxyl by the method of optimized valence configurations. Stevens, Walter J.; Das, G.; Wahl, Arnold C.; Krauss, Morris; Neumann, David (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(9), 3686-99 (Eng). Accurate theor. potential-energy and dipole-moment curves are presented for the $X^2\Pi_1$ state of the hydroxyl radical. The theor. detd. dissoen. energy is 4.53 eV compared to the exptl. value of 4.63 eV. The computed dipole moment at the exptl. equil. internuclear sepn. is 1.674 D, which is in excellent agreement with the most reliable exptl. value of 1.66 ± 0.01 D. A detailed, general prescription for constructing optimized valence-configuration wave functions for diat. hydrides is presented with OH as a specific example.

C.A 1975 82 N10

41014.8733
Ch, Ph, TC

ОН

40892

02.

1974

ХЧ-6831

Trainor Daniel W., von Rosenberg C.W.,
Jr.

Flash photolysis study of the gas phase
recombination of hydroxyl radicals.

"J.Chem.Phys.", 1974, 61, N 3, 1010-1015

(англ.)

0211 пик

181 181

203

ВИНИТИ

ОН

4-5979

1974

определ.
распред.
заселен-
ности.

12 Д708. Определение распределения заселенности в основном состоянии ОН с помощью перестраиваемого по частоте УФ-лазера. Wang Charles C., Davis L. I., Jr. Ground-state population distribution of OH determined with a tunable uv laser. «Appl. Phys. Lett.», 1974, 25, № 1, 34—35 (англ.)

В пламени методом лазерной флуоресценции измерено распределение заселенности в основном электронном состоянии ОН. Использован перестраиваемый по частоте УФ-лазер, настроенный на длины волн, соответствующие переходу $^2\Pi(v=0) \rightarrow ^2\Sigma^+(v=1)$ радикала ОН. Для различных т-р получены экспоненц. ф-ции распределения заселенности. Отмечено, что данная методика, обеспечивающая пространственное, временное и спектральное разрешение, может быть успешно применена для изучения динамики неравновесных процессов в условиях взрыва.

Т. Н. Т.

фр. 1974 N 12

OH

1975

Accioley C.S.R., et al.

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

(кб. илх.
матем
эн. химии)

effuck 3789

(all BH) III

param u.n. (CH, NH⁺, OH, FH⁺, CF, 11975
NO, O₂⁺, BeH, BH⁺, BeF, BO, CN, CO⁺,
N₂⁺, C₂, BH, NH, OH⁺, C₂) IX-5750

Abegg P.W.,

mol. phys, 1975, 30, v2, 575-596 (corr.)

Ab initio calculation of spin-orbit
coupling constants for gaussian
orbital and gaussian-type wave func-
tion.

Publ. Chem, 1976, 3542

10 (Cell. CH; III) 20

50721.4245

TC, Ch, Ph

29864

OH

1975

* 8-9475

Blustin Peter H. Linnett John W.
Applications of a simple molecular wave-
function. Part 7. FSGO open-shell calcu-
lations on first-row polyatomic hyd-
rides and hydride ions. "J.Chem.Soc.
Faraday Trans.", 1975, 71, N 5, Part 2,
1058-1070 (англ.)

0413 mm

379 382

405

ВИНИТИ

$\text{CH}, \text{CF}, \text{NO}, \text{O}_2^+, \text{CCN}, \text{CNC}, -$ X144281975
 $\text{C}_2^+, \text{F}_2^+, \text{HF}^+, \text{OH}, \text{CO}_2^+, \text{BO}_2, \text{N}_3,$ 11, 13, 14, 15
 $\text{N}_2\text{O}^+, \text{NCO}$ (кв. мех. параметр)
 Caisky P., Kuhn J., Zahradnik

R., J. Mol. Spectrosc., 1975, 55 (1-3)

120-30
 Semiempirical all-valence-
 electron MO calculations
 (Caisky P., Kuhn J., Zahradnik)
 C.A. 1975.82w26.1773632 10. (4) 20

ОН (До, 2, 4 см. поет, кв. мех. 1975
расчет)

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

с.А. 1976. 84. N12

80007e (неб отп)

50509.4741

Ch, Ph, TC, MGU

флуорес. спектр

96201

1975

OH ($\tilde{A}^2\Sigma^+$)

4066

Chamberlain G.A., Simons J.P. Polarised photofluorescence excitation spectroscopy: a new technique for the study of molecular photodissociation. Photolysis of H_2O in the vacuum ultraviolet. "Chem. Phys. Lett.", 1975, 32, N2, 355-358

(англ.)

0382 пик

351 351

в (англ. H_2O ; III)

ВИНИТИ

X 4-9525

1975

ОН

11 Д148. Относительные вероятности переходов и электронный момент перехода для системы А—Х радикала ОН. Crosley David R., Lengel Russell K. Relative transition probabilities and the electronic transition moment in the A—X system of OH. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1975, 15, № 7—8, 579—591 (англ.)

интенси-
 вность
 (f_{mn})

Измерены относит. интенсивности отдельных вращательных линий полос с $v' = 0, 1$ и 2 системы электронного перехода А—Х радикала ОН в спектре резонансной флуоресценции, селективно возбужденной перестраиваемым лазером на красителе. Полученные значения интенсивностей полос согласуются с вычисленными по известным факторам Франка—Кондона, а полученное значение полного дипольного момента P зависит от межъядерного расстояния линейно $M \cdot P$ Алчев

(41) ☒

ф. 1975 п 11

ОН

N - 4562

1975

12 Д375. Микроволновый спектр гидроксильного радикала в состояниях $^2P_{3/2}$ и $^2P_{1/2}$ с $J \geq 7/2$. Destombes Jean-Luc, Journel Gérard, Marlière Claire, Rohart François. Spectre micro-onde du radical hydroxyl dans les états $^2P_{3/2}$ et $^2P_{1/2}$ pour $J \geq 7/2$. «С. г. Acad. sci.», 1975, 280, № 25, В809—В811 (франц.; рез. англ.)

М.П. В диапазоне 7—71 Гц измерен микроволн. спектр радикала ОН. Идентифицированы линии 21 перехода с $J=7/2 \div 15/2$ состояния $^2P_{3/2}$ и 4-х переходов с $J=11/2$ и $13/2$ состояния $^2P_{1/2}$. Анализ спектра выполнен с учетом тонких и сверхтонких магн. взаимодействий и определены значения молекулярных констант, которые мало отличаются от литературных данных. М. Р. Алиев

ф. 1975 № 12

1975

ОН

3 Б327. Измерение сверхтонкого расщепления в спектре ОН радикала методом радиочастотного микроволнового двойного резонанса. Destombes J. L., Marlière C. Measurement of hyperfine splitting in the OH radical by a radio-frequency microwave double resonance method. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 34, № 3, 532—536 (англ.)

(vi)

Методом РЧ—МВ-двойного резонанса измерена магнитная сверхтонкая структура Λ удвоения ОН радикала в $^2\Pi_{3/2}$ -состоянии для $F=9/2$ и $F=7/2$. Определены частоты переходов при $F=9/2$ для двух РЧ и четырех МВ переходов и при $F=7/2$ для одного РЧ и двух МВ и еще двух МВ с помощью правила сумм. Измеренные частоты согласуются с измерениями и расчетами др. авторов. Экспериментально изучена зависимость формы сигнала от настройки на частоту и насыщения РЧ перехода. Полученные зависимости хорошо описываются теорией двойного резонанса. С. Н. Мурзин

X. 1976 N 3

ОН
24 В240. микроволновый спектр радикала гидроксила в $^2P_{3/2}$ и $^2P_{1/2}$ состояниях для $J \geq 7/2$. Destombes Jean—Luc, Journal Gérard, Marlière Claire, Rohart François. Spectre micro-onde du radical hydroxyl dans les états. $^2P_{3/2}$ et $^2P_{1/2}$ pour $j \geq 7/2$. «C. r. Acad. sci.», 1975, 280, № 25, В809—В811 (франц.; рез. англ.)

(м.п.) 4562
Измерен МВ спектр радикала гидроксила ОН в $^2P_{3/2}$ состоянии для $J=7/2, 9/2, 11/2, 13/2, 15/2$ и в $^2P_{1/2}$ состоянии для $J=11/2, 13/2$ в области частот от 8 до 71 ГГц и радиочастотный спектр в $^2P_{3/2}$ состоянии для $J=7/2, 9/2$ в области частот от 7 до 22 МГц. Из анализа спектра определены 5 постоянных тонкой структуры, 4 постоянных сверхтонкой структуры и 3 постоянных центробежного искажения. С помощью корреляц. матрицы установлено, что одна из постоянных центробежного искажения D сильно коррелирует с постоянной тонкой структуры. Т. обр., в расчетах достаточно использовать 2 постоянных центробежного искажения D и δ . Приведенные молек. постоянные позволяют рассчитать частоты МВ переходов с точностью около 250 кгц. Полученные результаты согласуются с данными других авторов.

С. Н. Мурзин

1975

x/1975 N24

* 48-8263

1975

HO.

Dewar M. J. S et al.

(7)

Theor. chim. acta " 1975, 36,
237-39.

Vertical ionization potentials...

(ver. CH₃ ; III)

60129.8474

Ch, Ph, TC

40892

OH (смерщ)

1975

3730

German K.R.

Radiative and predissociative lifetimes
of the $V'=0,1$ and 2 levels of the $A^2\Sigma^+$
state of OH and OD.

"J.Chem.Phys...", 1975, 63, N 12, 5252-5255

055 (англ.)

523 528

542

ВИНИТИ

60129.7322
Ph, Ch, TC

40604
ОН энергия связи
(ис. мех. связей)

1975
2744

К р. N 60129.7289

Hall G.G.

Charges and bond energies in the analysis
of quantum chemistry calculations.

"Int. J. Quantum Chem. Symp.", 1975, N 9,
279-284
(англ.)

525 528

0550 ГМК

ВИНИТИ

1975

ОН

21 Б151. Гашение флуоресценции и колебательная релаксация уровня ($A^2\Sigma^+$, $v=1$) ОН. Hogan P., Davis D. D. Electronic quenching and vibrational relaxation of the $OH(A^2\Sigma^+, v'=1)$ state. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 11, 4574—4576 (англ.)

Измерены времена тушения флуоресценции (T) и колебат. релаксации τ состояния ($A^2\Sigma^+$, $v=1$) молекулы ОН в смеси с Ar, N₂, He, H₂. Обнаружено, что время гашения не зависит от кратности возбужденного уровня. Величину τ уровня $v=1$ определяли из времен затухания флуоресценции при узкополосном и широкополосном возбуждении. Обнаружено, что $3\tau_{Ar}$ и $\sim T$ и $T \sim 5\tau_{N_2}$. τ уровня $v=1$ не сильно отличается от τ $v=0$, что согласуется с имеющимися в лит. данными.

Б. Г. Антипов

флуоресц.

x 1975 n 21

OH-

(min)

XI-4512

1975

OH(nomen.
красиве)

87519m Calculation of hydroxide molecular state. Hydroxyl formation during collisions of oxygen(-) and hydrogen atom. Huron, B.; Tran Minh, Fr. (DEPEG, Obs. Meudon, Meudon, Fr.). *Astron. Astrophys.* 1975, 38(1), 165-7 (Fr). In adiabatic collision between H atom and O⁻ in their ground state 2S and 2P , the mol. states $^1\Pi$, $^1\Sigma$, $^3\Pi$, $^3\Sigma^+$ of OH⁻ can be formed. By taking into account the splitting of O⁻ state in $^2P_{1/2}$ and $^2P_{3/2}$, it is found that the mol. states $^1\Pi$, $^1\Sigma$ and 5 substates out of 6 of the $^3\Pi$ state are correlated with the lowest O⁻ state $^2P_{3/2}$. The potentials curves of the OH⁻ mol. states were calcd. by using the CIPSI method (Huron, B., et al. 1974), these curves show, (for the states $^1\Pi$ and $^3\Pi$) a min. for a internuclear distance close to equil. distance of $^1\Sigma^+$ state. The electronic transition energy calcd. for $^1\Pi - X^1\Sigma^+$ is $19,430 \text{ cm}^{-1}$. The electronic transition moment of $^1\Pi - X^1\Sigma^+$ is calcd. as a function of the internuclear distance. By using the value of the measured electronic affinity of O and OH, the Rydberg-Klein-Rees potential curve of $X^2\Pi$ state of OH, is compared with the calcd. potential curves, this one crosses the $^1\Pi$ and $^3\Pi$ states on each side of their min., these crossing confirm that $^1\Pi$ and $^3\Pi$ are autodetachment states. All these results show that the reaction $\text{O}^- + \text{H} \rightarrow \text{OH} + e^-$ must be considered again for the OH formation in interstellar matter.

T2/p Redig. 11.0

(41)

C.A. 1975
83 n 10

OH

расчет
молекулы

Jordan R.D.

1975

"Chem Phys Lett" 1975,
33, N2, 340-343 (англ).

(см HF, III)

H-O

num. 4824

1975

Kerr J. H., et al

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

(Do)

ОН

1975

20 Б160. Зависимость колебательной релаксации ОН $A^2\Sigma^+$ от вращательного состояния. Lengel Russell K., Crosley David R. Rotational dependence of vibrational relaxation in $A^2\Sigma^+$ ОН. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 261—264 (англ.)

По зависимости интенсивности отдельных электронно-колебательно-вращательных линий спектра флуоресценции радикала ОН, селективно возбужденного лазером на красителе в состоянии $A^2\Sigma^+$ с $v'=1$ и $N^1=0, 3$ и 5 (радикалы ОН получали по р-ции между H_2O и NO_2 , иницированной микроволн. разрядом). Показано, что при добавлении газов He, Ar, H_2 , D_2 или N_2 к смеси H_2O+NO_2 в спектре флуоресценции появляются новые линии, соотв-щие переходам из состояний, заселенных за счет столкновений радикалов ОН с молекулами посторонних газов, а скорость колебательной релаксации $v^1=1 \rightarrow 0$ почти в 2 раза уменьшается с ростом N^1 от 0 до 5.

М. Р. Алиев

Колебательная
релаксация

2. 1975 № 20

1975

XUS-11223

OH

84: 67265t A study of pressure broadening in the Λ -doubling microwave spectrum of a Hund's coupling case(b) molecule. Lurie, B. N.; Anderson, J. M. (Dep. Chem., Bryn Mawr Coll., Bryn Mawr, Pa.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 36(5), 614-17 (Eng). The collisional transfer matrix for the Λ -doubling microwave transitions of a Hund's coupling case (b) mol. with spin of $1/2$ is constructed. Collision cross sections, absorption line shapes, and spectral line widths are calcd. for OH in the $^2\Pi$ electronic state.

popula
evening
recent

C.A. 1976, 84 N10

ОН

1975

11 В112. Изучение сверхтонкой структуры Λ -дублета молекул OH , OD , SH , SD методом электрического резонанса в молекулярных пучках: Meerts W. L., Dumanus A. A molecular beam electric resonance study of the hyperfine Λ doublet spectrum of OH , OD , SH , and SD . «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 19, 2123—2141 (англ.; рез. франц.)

сверхтонкая структура

1976
№ 11

Метод электр. резонанса в молек. пучках использован для определения частот переходов между компонентами $\text{CTS } \Lambda$ -дублета свободных радикалов OH , OD , SH , SD , находящихся в $^2\Pi$ -состоянии. Полученные спектры интерпретированы в терминах теории возмущений при наличии вырождения. В кач-ве гамильтониана нулевого приближения использован нерелятивистский электронный гамильтониан молекул в приближении Борна — Оппенгеймера, в кач-ве возмущения — спин-орбитальное взаимодействие, вращательный и гироскопич. члены, приводящие во 2-м порядке теории возмущений к Λ -удвоению, сверхтонкое взаимодействие, взаимодействие дипольного момента молекулы с электр. полем. Идентификация измеренного спектра с рассчитанным путем диагонализации четырехкратной матрицы энергии позволило определить постоянные TC и CTS , дипольные моменты молекул. Полученные результаты хорошо согласуются с опытными данными. И. В. Лебедь

XU-11190

1975

OH

OD

SH

SD

(min.)

84: 37109c Molecular beam electric resonance study of the hyperfine Λ doubling spectrum of hydroxyl, hydroxyl-d₁, sulfhydryl, and sulfhydryl-d₁. Meerts, W. L.; Dymanus, A. (Fys. Lab., Kathol. Univ., Nijmegen, Neth.). *Can. J. Phys.* 1975, 53(19), 2123-41 (Eng). The mol. beam elec. resonance method was employed to obtain a complete set of hyperfine Λ doubling transitions of the free radicals OH, OD, SH, and SD. The obsd. spectra could be explained very well by the degenerate perturbation theory adapted to the $^2\Pi$ state. The exptl. results include fine and hyperfine coupling consts., the elec. dipole moments could be explained very well by the degenerate perturbation theory adapted to the $^2\Pi$ state. The consts. agree well with ab initio calcs.


 (+1) *less. rep*
C.A. 1976. 84, NB

1975

5 Д533. Изучение спектра сверхтонкого Λ -удвоения OH, OD, SH и SD с помощью метода электрического резонанса на молекулярных пучках. Meerts W. L., Dumanus A. A molecular beam electric resonance study of the hyperfine Λ doubling spectrum of OH, OD, SH, and SD. «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 19, 2123—2141 (англ.; рез. франц.)

Метод электрич. резонанса на молекулярных пучках использован для исследования спектра сверхтонкого Λ -удвоения свободных радикалов OH, OD, SH и SD. Показано, что теория возмущений 3-го порядка для вырожденного состояния позволяет рассчитывать спектры, хорошо согласующиеся с эксперим. результатами для OD, SH и SD. Для OH различие между рассчитанными и эксперим. переходами превышает эксперим. ошибки. Указывается, что константы сверхтонкой структуры, электрические дипольные моменты, полученные из эксперим. данных, хорошо согласуются с результатами неэмпирич. расчетов. Библ. 45. А. П. Калинин

спектр
 Λ -удв.еи.

ф. 1976, N 5 (+1) ☒

1975

OM

Meyer W. et al

(M. N.)
расчет

J. Chem. Phys., 1975, 63,

N6, 2356-2375

X. 1976. N3

CU LiH : III
1 -

OH

1975

м.п.; Ае; Т
кв. мех
расчет

131177d PNO [pseudonatural orbitals]-CI and CEPA [coupled electron pair approximation] studies of electron correlation effects. II. Potential curves and dipole moment functions of the hydroxyl radical. Meyer, Wilfried (Inst. Phys. Chem., Univ. Mainz, Mainz, Ger.). *Theor. Chim. Acta* 1974, 35(4), 277-92 (Eng). Ab initio calcns. of the potential curves of the low-lying electronic states of OH were performed by a PNO-CI wave function and the CEPA. The ground state potential curve obtained deviates from the Rydberg-Klein-Rees curve by $<200 \text{ cm}^{-1}$ in the region $0.7\text{--}1.6 \text{ \AA}$. The ground state consts. were calcd. to be $r_e = 0.972 \text{ \AA}$, $B_e = 18.85 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha_e = 0.727 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e = 3742 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 85.3 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_0 = 1.686 \text{ D}$, $D_e = 4.35 \text{ eV}$, ionization potential 12.78 eV , electron affinity 1.51 eV , and $\nu_{00} (^2\Pi \leftrightarrow ^2\Sigma^+) = 32,690 \text{ cm}^{-1}$. The correlation contributions to ionization, excitation, and electron attachment were analyzed. Dipole moment expectation values and some ir transition probabilities were calcd.

C.A. 1975: 82 N20

51103.5269

Ph, Ch, TC, MGU

96201

OH ($^2\Pi_g, v \leq 9$)

1975

X4-10548

Nansen D. Alan, Pitts J. N., Jr. Chemiluminescent emissions from the gas phase reactions of ozone with acetylene and allene.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 35, N4, 569-573
(англ.)

465

465

471

0479

СМЕРВИНИТИ

ОН

7 Д284. Рекомбинация частиц в результате процесса, обратного преддиссоциации молекул (ударно-радиационная рекомбинация). Полак Л. С., Словецкий Д. И. «Теор. и эксперим. химия», 1975, 11, № 1, 16—25

1975

преддиссоц.
молекулы

Получены ф-лы для расчета коэф. скорости ударно-радиационной рекомбинации тяжелых частиц и сопровождающей ее хемилюминесценции. Ф-лы получены с учетом спонтанных и индуцированных столкновениями переходов. Результаты расчета коэф. скорости радиационной рекомбинации атомов удовлетворительно согласуются с эксперим. данными. Коэф. скорости хемилюминесценции в различных случаях по-разному зависит от давления, что дает возможность исследовать характер преддиссоциационного перехода и определить вероятность преддиссоциации. Применение метода продемонстрировано на примере преддиссоциации радикала $\text{OH}(\text{A}^2\text{E}^+)$.
Табл. 2. Библ. 14.

Автореферат

ф 1975 N7

ОН

1975

Роль Л. А.

энергия
корреляции

"Mol Phys" 1975 29,
N 2, 599-611 (англ)

(см H₂; III)

ОН

отпуск А-2948 1975

Рагизов А.А.

(м.п.; До
З, с.м.п.ст.)

В сб. "Мини-рассказы"
1975, вып. 2, 3-61
и, Амурская.

51124.6733

96200

1975

Ch, Ph, TC, MGU

OH ($A^2 \Sigma^+$)

#4-10628

Tsurubuchi Seiji. Correlation diagrams
for electronic states of H_2O and frag-
ment species. "Chem. Phys.", 1975, 10,
N 2-3, 335-344
(англ.)

0507 КИИ

478 479

15 9 8

ВИНИТИ

amman 3408

1975

OH

105769z Sensitization of the hydroxyl($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_i$) emission by mercury(6^3P_0) metastables. Vikis, A. C. (Dep.

Chem., Univ. Toronto, Toronto, Ont.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 33(3), 506-11 (Eng). The electronic energy transfer process $Hg(6^3P_0) + OH(X^2\Pi_i, v=0, K) \rightarrow Hg(6^1S_0) + OH(A^2\Sigma^+, v, K)$ was studied by the sensitized fluorescence method. A rather broad spectrum of rotational population, N_{vK} , was obtained under conditions of minimum relaxation, which illustrates the nonresonant and nonoptical nature of this energy transfer process. The fractions of the exoergicity, above electronic excitation of $OH(A^2\Sigma^+, v=0, K=0)$, going into vibrational, rotational and translational excitation are 0.11, 0.31, and 0.58, resp. A statistical mode of energy partitioning, such as would result from long-lived complex formation, seems to account well for these observations.

$(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_i)$

C. A. 1975. 83. N 12

ОН

узкополосном возбуждении
 2 Д809. Сенсибилизированное возбуждение излучения ОН ($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_j$) метастабильными атомами $Hg(6^3P_0)$. Vikis A. C. Sensitization of the $OH(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_j)$ emission by $Hg(6^3P_0)$ metastables. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 33, № 3, 506—511 (англ.)

Исследован процесс переноса электронной энергии возбуждения при взаимодействии метастабильных атомов ртути $Hg(6^3P_0)$ с радикалами $OH(X^2\Pi_j)$ с образованием радикалов $OH(A^2\Sigma^+)$ (I) при облучении потока газовой смеси $Hg(6^1S_0) + H_2O + M$ ($M = He, N_2; t = 75^\circ C$). Проведен анализ спектра флуоресценции радикалов I в условиях малой скорости ударной релаксации их энергии возбуждения. Получены кривые распределения населенности вращательных уровней колебательных состояний I: $v' = 0, 1$, а также данные о сечениях релаксации колебательной и вращательной энергии возбуждения радикала I, $\sigma_{колеб} \ll \sigma_{вращ} < 1 \text{ \AA}^2(He), 2 \text{ \AA}^2(N_2)$. Показано, что образование I протекает при участии долгоживущего комплекса $(HgOH)^*$, причем доли энергии возбуждения $Hg(6^3P_0)$, переходящие в колебательную, вращательную и кинетич. энергии радикала $OH(A^2\Sigma^+)$ соотносятся как 0,11; 0,31 и 0,58. А. М. П.

спектр флуоресценции

Ф 1976 № 2

1975

3408

оттис

50318.7207
Ch, Ph, TC

OH 40892

1975
45-8309

Wang Charles C., Davis L.I., Jr.

Two-photon dissociation of water: a
new OH source for spectroscopic studies.

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 1, 53-55

(АНГЛ.)

0323 пик

292 297

ВИНИТИ

OH

1975

Winter Nicholas

Электронное
соединение

"Chem Phys Lett" 1975, 33,
N1, 25-29 (all)

(см HCO₃; III)

*4-10018

1975

ОН

2 Д430. Измерение распределения населенности по вращательным уровням $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ в экспериментах с пересекающимися пучками и фотодиссоциацией H_2O под действием излучения линии $\text{H}\alpha$ серии Лаймана. Yamashita Iwao. Crossed-beam experiment on rotational population distribution of $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ split from H_2O by Lyman alpha photon impact. «J. Phys. Soc. Jap.», 1975, 39, № 1, 205—212 (англ.)

В экспериментах со скрещенными молекулярным и световым пучками измерено начальное распределение населенности по колебательным уровням радикалов $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$, образующихся при фотодиссоциации H_2O излучением линии $\text{H}\alpha$ серии Лаймана (1216 Å). В качестве интенсивного монохроматич. источника света использован плазменный факел, образующийся при добавлении H_2 в поток Ag плазмы, истекающей со сверхзвуковой скоростью сквозь сопло Лаваля в вакуумную камеру. Приведено подробное описание конструкции и пара-

9/976 N2

метров установки. Распределение населенности характеризуется узкой асимметричной кривой с максимумом для значений вращательных квантовых чисел $K = 17 \div 22$ и незначительной населенностью нижних уровней. Эти данные сопоставлены с результатами аналогичных измерений в методе газовой мишени. Отмечено, что последние существенным образом зависят от условий проведения эксперимента и отличаются от полученных в данной работе. Предположено, что эти различия являются следствием вторичных процессов образования $\text{OH} (A^2\Sigma^+)$ при взаимодействии таких долгоживущих продуктов фоторазложения воды как $\text{OH} (X^2\Pi)$, $\text{O} (^1D)$ и $\text{H} (^2S)$ при их движении в газовой мишени. Библ. 25. С. Л.

$\text{Li}_2, \text{C}_2, \text{BH}, \text{BH}^+, \text{CH}, \text{CH}^+, \text{NH}, \text{OH}, \text{OH}^+$

1976

FH, FH^+ (ан. ном; паэіііі)
[BX-85]

Arce F., Casado Y., Rios M.A.; Tato V.

An. Quim. 1976, 72(6), 505-8.

Theoretical study of force constants.
III. Interatomic forces in diatomic
molecules. (Сел. Li_2 ; III)

C.A. 1976, 85, v22, 168984C

10



OH

* 4 . 13177

1976

(Do, reb.
Mex. part)

) S4: 185093h A nearly exact MCSCF + CI calculation of the dissociation energy of hydroxyl. Arnold, J. O.; Whiting, E. E.; Sharbaugh, L. F. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(8), 3251-3 (Eng). The dissoen. energy and dipole moment of the ground state of OH was obtained with a newly developed multiconfiguration, self-consistent field plus configuration interaction CDC 7600 computer program. The computed value of the dissoen. energy is 4.62 eV, which is within the uncertainty limits for the exptl. value of 4.63 ± 0.01 eV. The computed value of the dipole moment is 1.645 D, which is very close to the exptl. result of 1.66 ± 0.01 D. The results are also compared to the data obtained from similar calens. with the BISON-MC computer program.

C.A. 1976, 84, N26

ОН

XIS-13177

1976

9 Д115. Почти точный расчет энергии диссоциации ОН методом МК ССП с учетом конфигурационного взаимодействия. Arnold J. O., Whiting E. E., Sharbaugh L. F. A nearly exact MCSCF+Cl calculation of the dissociation energy of OH. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 8, 3251—3253 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в многоконфигурационном (МК) приближении (17-конфигурационная волн. ф-ция) проведен расчет ОН. При эксперим. длине связи 1,8342 ат. ед. энергия диссоциации оценена в 4,56 эв (эксперим. значение $4,63 \pm 0,01$). Последующий расчет методом конфигурационного взаимодействия с учетом всех одно- и двукратно возбужденных конфигураций (всего 61) привел к энергии диссоциации 4,62 эв, что согласуется с эксперим. значением с точностью до

(20)

расчет

92/1976 №9

ошибок эксперимента. Для дипольного ...
лучено значение $1,645$ ед. Дебая (эксперим. величина
 $1,66 \pm 0,01$). Подробно обсуждено асимптотич. поведе-
ние энергии диссоциации как ф-ции числа учитываемых
взаимодействующих конфигураций. Полученные резуль-
таты сопоставлены с данными расчетов методом опти-
мизированных валентных конфигураций и по схеме
BISON в многоконфигурационном приближении. Сде-
лан вывод, что современные методы расчета двухатом-
ных молекул позволяют получать столь же надежные
результаты, что и тонкие трудоемкие лабораторные
эксперименты.

В. Л. Лебедев

ОН

1976

45-13177

(Do.)

18 Б29. Почти точный расчет энергии диссоциации
ОН методом МКССП+КВ. Arnold J. O., Whit-
ting E. E., Sharbaugh L. F. A nearly exact
MCSCF+CI calculation of the dissociation energy of OH.
«J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 8, 3251—3253 (англ.)

Проведен расчет электронной энергии и дипольного
момента молекулы ОН в основном электронном состо-

с. 1976, 18

янии при межъядерных расстояниях 1,8342; 4,0 и 10,0 ат. ед. Первый этап расчета выполнен в приближении многоконфигурац. метода ССП (МКССП) с включением 17 конфигураций; второй этап — в рамках метода конфигурац. взаимодействия (КВ) с волновой функцией, представленной 61 конфигурацией, каждая из к-рых построена на орбиталях метода МК ССП. Исходный базис АО состоял из расширенного набора слейтеровских функций s -, p -, d - и f -типа. Полученное в результате значение энергии диссоциации $4,62$ эв совпадает с эксперим. значением $4,63 \pm 0,01$ эв в пределах ошибки эксперимента; значение дипольного момента $1,645 D$ также близко к эксперим. значению $1,66 \pm 0,01 D$.

А. Дементьев.

OH

* U-15578

1976

(J)

Bischof P.

J. Amer. Chem Soc
1976, 98, 122, 6844-49

OH

1946

Broyer, M., et al

Adv. Atom. and Mol. Phys.
Vol. 12. New York e.a., 1976,
165-213

сбор:
оптарева
научна

Ae⁻ (Li, Na, Cl, F, OH) of. 5107 1977

Cederbaum L.S., Schönhammer K,
von Niessen W., BX-563

Phys. Rev. A: Gen. Phys., 1977, 15, 45,

833-842 (corr.).

Electron affinities by a variation-
perturbation approach.

(cal. Li, III)
July, 1977, 92/24 10 (92) 8.

ОН

1976

1 Д470. Уширение микроволновых линий свободно-
го радикала гидроксила при давлении. Bustreel R.,
Destombes J. L., Marlière C. Pressure broad-
ening of the hydroxyl free radical microwave lines.
«Chem. Phys. Lett.», 1976, 42, № 1, 154—157 (англ.)

Исследовано уширение при давлении переходов
 $^2\Pi_{3/2}$, $J=9/2$ Λ -удвоения радикала ОН. Найдены пара-
метры ширины линий при столкновении с молекулами
 NO_2 и H_2O $a_{\text{ОН}, \text{NO}_2} = 3,1 \pm 0,4$ и $a_{\text{ОН}, \text{H}_2\text{O}} = 9,2 \pm 0,6$ Мгц.

Библ. 26.

ушире-
ние

р 1977 №1

ОН

1976

3 Б239. Уширение вследствие давления микроволновых линий свободного радикала гидроксила. Busteel R., Destombes J. L., Marlière C. Pressure broadening of the hydroxyl free radical microwave lines. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 42, № 1, 154—157 (англ.)

Измерено уширение вследствие давл. двух МВ-линий $^2P_{3/2}$, $J=9/2$, $F=4 \rightarrow 4$ и $F=5 \rightarrow 5$ радикала ОН в присутствии примесных газов NO_2 и H_2O . Использовался высокочувствительный МВ-спектрометр с модуляцией СВЧ-излучения источника. Для параметров уширения в присутствии примесных газов NO_2 и H_2O , соотв. получены значения: $3,1 \pm 0,4$ и $9,2 \pm 0,6$ МГц/мм. В используемом диапазоне давлений 15—60 мм конц-ия ОН радикала в присутствии примесных газов оставалась приблизительно постоянной. Оценка на основе полученных данных приводит к результатам, к-рые согласуются с лит. данными. Полученные результаты могут быть использованы при интерпретации межзвездных молек. спектров.

С. Н. Мурзин

уширение
линий

X. 1974. №3

DH

(Em. 37808)

1976

laser
irradiation.

Clyne M.A.A., Mc Dermid I.S.
and (in part) A.H. Gier-
san,

~~Wynne~~ J. Photochem., 1976, 5,

201-215-

The spectroscopic detection

of Molecular
a Scanning
Dye Laser.

Species Using
Narrow-Band

оттиск 4475

1976

ОН

№ 20 Б950. Столкновения и сечения тушения состояния $A^2\Sigma^+$ OH и OD. German K. R. Collision and quenching cross sections in the $A^2\Sigma^+$ state of OH and OD. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 10, 4065—4068 (англ.)

($A^2\Sigma^+$)

Радикалы OH, возникающие в р-ции $H+NO_2 \rightarrow OH + NO$, возбуждались лазером в одно из колебательных состояний терма $A^2\Sigma^+$, и по перераспределению интенсивности флуоресценции определялись сечения тушения этих состояний, а также сечения колебательной релаксации. Для буферных газов H_2 , N_2 , и O_2 сечения тушения составляют для $v=0$ соотв. ~ 7 , 3,5 и $12 A^2$ и несколько увеличиваются при переходе к возбужденным колебательным уровням. Отмечается также, что сечения колебательных переходов с $\Delta v=2$ оказываются меньше сечений с $\Delta v=1$. В последнем случае абс. величины сечений варьируют в интервале $3-15 A^2$.

ж. 1976 №20

70118.6665

TC, Ch, Ph

96201

1976

OH (сверх
мелкий)

№ 16312

Gérard M., Govers T.R., Runst-
raat C.A. van de, Marx R. Vibrational
branching ratios for the $a^3 \Pi_i \rightarrow X^3 \Sigma^-$
system of OH^+ and OD^+ . "Chem. Phys.
Lett.", 1976, 44, N 1, 154-158 (англ.)

07.92 ББК

755 756 7 8 4

ВИНИТИ

ОН

Xis - 13903

1976

ОН⁺

10 Д722. УФ-излучение в реакции $O^+ - H_2$. H a r -
 ris H. H., Leventhal J. J. Ultraviolet emis-
 sion in $O^+ - H_2$ reactive scattering. «J. Chem. Phys.»,
 1976, 64, № 8, 3185—3191 (англ.)

Исследована люминесценция, обусловленная столкно-
 вением O^+ с H_2 при относит. энергиях 1,5—35 эв.
 Обнаружены переходы $A \rightarrow X$ молекул ОН и ОН⁺.
 Показано, что в области малых относит. энергий за
 образование возбужденных продуктов ответственны
 метастабильные состояния иона O^+ . Основное состояние
 иона O^+ возможно вносит вклад в образование ОН⁺
 ($A^2\Pi$) в области энергий, достаточных для преодоления
 потенц. барьера, который, вероятно, существует в до-
 полнение к обычной термохимич. энергии процесса.
 Основное состояние иона O^+ не вносит заметного
 вклада в образование ОН ($A^2\Sigma^+$). Сделанные выводы
 согласуются с природой потенц. поверхностей иона
 H_2O^+ . Библ. 32.

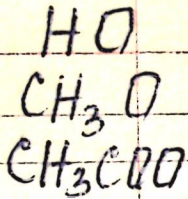
переход

 $A \rightarrow X$

ф 1976 №10

(+1) X

1976



И.К. спектры
 радикалов.

(42) ☒

Ф 1976 № 9

9 Д326. Спектры ИК-поглощения органических пероксидных радикалов в ближней ИК-области. Hunziker H. E., Wendt H. R. Electronic absorption spectra of organic peroxy radicals in the near infrared. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 8, 3488—3490 (англ.)
 Получены ИК-спектры (1—2 мк) пероксидных радикалов типа HO (I) ($\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{CH}_3\text{CH}_2, \text{CH}_3\text{CHCH}_3, \text{CH}_3\text{CO}$) и их $^{18}\text{O}_2$ -изотопзамещенных. Зарегистрированы прогрессии ИК-полос I, приписанные вал. кол. ν_1 связи $\text{O}-\text{O}$. Показано, что замещение H в HO_2 алкильной группой сдвигает $\nu_s'=0$ полосу в коротковолн. сторону, тогда как при введении ацетильной группы отмечено значительное смещение $\nu_s'=0$ полосы в длинноволн. сторону. В ИК-спектрах $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2$ и CH_3COO_2 обнаружены полосы, образующие прогрессию с интервалом 530 см^{-1} , сопоставленные деформационным колебаниям этих молекул. Предположено, что ИК-полосы, наблюдаемые с коротковолн. стороны полос ν_1 в спектрах $\text{CH}_3\text{O}_2(\text{CD}_3\text{O}_2)$ и отстоящие от ν_1 на 105, 120 и 148 см^{-1} (75 и 90 см^{-1}), являются горячими полосами крутильных колебаний вокруг связи $\text{C}-\text{O}$. Библ. 10.
 И. В. А.

42 (смету
ОН грегоресу) 1976
*4-14128

Intensity and pressure dependence of re-
sonance fluorescence of OH induced by a
tunable uv laser.

"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1976, 13, N. 6,
2145-2152. (ENRZ.)

546 555

670

0073 ЗАБЫТИЕ

ОН

1976

Замечание
к статье

21 Б135. Замечание к статье Р. Хогана и Д. Д. Дэ-
виса «Тушение электронного возбуждения и колеба-
тельная релаксация состояния ($A^2\Sigma^+$, $v=1$) радикала
ОН». — Ответ авторов. Lengel Russell K., Cros-
ley David R. Comment on «Electronic quenching
and vibrational relaxation of the OH ($A^2\Sigma^+$, $v=1$) sta-
te» by P. Hogan and D. D. Davis. — Authors' reply.
«J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 9, 3900—3901 (англ.)
К РЖХим, 1975, 21Б151.

X 1976 N 21

ОН

XU - 11875

1976

14 Б27. Расчет моментов колебательно-вращательных переходов: матричный метод. Lin Che-Shung. Calculation of the vibration-rotational transition moments: matrix method. «Theor. chim. acta», 1976, 41, № 1, 71—77 (англ.)

Неэмпирический метод расчета колебательных волновых функций и моментов колебательно-вращательных переходов применен к изучению $A^2\Sigma^+$ -состояния радикала ОН. Метод использует разложение колебательной функции в ряд по функциям гармонич. осциллятора, а матричные элементы оператора потенциальной энергии рассчитываются с помощью предложенной ранее схемы Харриса и др. (J. Chem. Phys., 1965, 43, 1515), к-рая позволяет задавать потенциальную функцию в любой удобной форме. В расчете использовано 60 базисных функций и аппроксимация неэмпирич. потен-

Кв. мех.
расчет.

X 1976 N14

циальной кривой полиномом третьей степени. Показано, что рассчитанные величины моментов переходов вполне удовлетворительно согласуются с результатами, полученными методом численного интегрирования, и, кроме того, слабо зависят от нелинейных параметров в пробных волновых функциях, что позволяет отказаться от оптимизации нелинейных параметров и значительно упростить вычислительную процедуру.

Б. И. Жилинский

ОН

* 45-11875

1976

8 Д213. Вычисление вероятностей колебательно-вращательных переходов. Матричный метод. Lin Che-Shung. Calculation of the vibration-rotational transition moments: matrix method. «Theor. chim. acta», 1976, 41, № 1, 71—77 (англ.)

При обычном способе расчета вероятностей колебательно-вращательных переходов (ВП) радиальное ур-ние для ядерного движения решается методом численного интегрирования (ЧИ) и по полученным волн. ф-циям вычисляется ВП. Недостаток метода — в чрезвычайной громоздкости получаемой колебательно-вращательной волн. ф-ции. При матричном методе решения волн. ур-ния используется вариационный принцип и разложение волн. ф-ции по базисному набору ортонормированных аналитических волн. ф-ций. Матричный метод применен к вычислению волн. ф-ций, колебательно-

A² E⁻f_{mi}I ⊕ f_{mi}

Ф. 1976. № 8

вращательных уровней и ВП для основного состояния $A^2\Sigma^-$ радикала OH . Вычисленный колебательный квант сравнивался с результатами ЧИ и эксперим. данными. В первом случае расхождение не превышает 0,4%, во втором случае — увеличивается с ростом числа колебательных уровней, достигая 1,3%. Расхождение с эксперим. данными объясняется погрешностью использованной в расчете теоретической потенциальной кривой, которая содержит 9 колебательных уровней вместо 10, обнаруженных в эксперименте. Лучшее согласие, $\sim 0,06\%$, теоретич. результатов и эксперим. данных получено для кванта вращательных уровней. Для всех 9 колебательных уровней вычислены усредненные колебательные дипольные моменты и ВП. Установлена слабая зависимость обеих характеристик от нелинейного параметра базисных волн. ф-ций ($\sim 0,3\%$ для дипольного момента и $\sim 1\%$ для ВП) при изменении числа уровней от 0 до 8.

А. М. Полянский

ОН

ЖУ-16321

1976

9 Б204. Спектр испускания ОН в кислородно-ацетиленовом пламени в области 3,7—0,9 мкм, измеренный с высоким разрешением. Maillard J. P., Chauville J., Mantz A. W. High-resolution emission spectrum of OH in an oxyacetylene flame from 3,7 to 0,9 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 1, 120—141 (англ.)

Исследован колебательно-вращательный спектр испускания молекулы ОН в кислородно-ацетиленовом пламени с использованием фурье-спектрометра с высоким разрешением в области 2700—11 000 cm^{-1} . Приведены волновые числа более чем 1100 измеренных линий, для идентификации и отнесения к-рых применялся модифицированный метод Лумиса — Вуда. Отмечается, что наложение полос воды в ряде случаев затрудняло проведение анализа. Оценена точность измерения вращательных линий в различных спектральных областях. Проанализирована вращательная структура полос 1—0, 2—1, 2—0, 3—1, 4—2, 5—3, 3—0, 4—1, 5—2, причем для секвенции $\Delta V=3$ положение вращательных линий изме-

м.м.

СЖУ-16321

Ж. 1977 № 9

рено впервые. По методу наименьших квадратов рассчитаны положения нулевых линий для 9 наблюдаемых полос, а также молек. постоянные для основного состояния ($^2\Pi$), включая постоянные спин-орбитального взаимодействия и параметры Λ -удвоения. На основании полученных результатов предсказано положение ряда полос, не наблюдаемых в спектре. Отмечается, что более высокая точность измерения вращательных линий и развита вращательная структура ($I > 20$ для нек-рых P -ветвей) позволяют определить молек. постоянные более точно.

С. Б. Осин



ОН

ХУ-16321

1976

4 Д461. Эмиссионный спектр с высоким разрешением ОН в кислородно-ацетиленовом пламени в области $3,7-0,9$ мк. Maillard J. P., Chauville J., Mantz A. W. High-resolution emission spectrum of OH in an oxyacetylene flame from 3.7 to 0.9 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 1, 120—141 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра с высоким разрешением в области $2700-11000$ cm^{-1} исследован колебательно-вращательный спектр ОН, испускаемый ацетилено-кислородным пламенем. В спектре наблюдались также линии, связанные с поглощением и испусканием паров воды, смешанной с ОН в источнике. Приведено положение линий с высокой величиной J (более 20 для некоторых P -ветвей) полос $1-0$ и $2-1$ для последовательности $\Delta v=1$; $2-0$, $3-1$, $4-2$ и $5-3$ для $\Delta v=2$ и $3-0$, $4-1$ и $5-2$ с $\Delta v=3$. Подчеркивается, что полосы последовательности $\Delta v=3$ приводятся впервые. Приведены константы для основного состояния ОН. С помощью этих констант вычислены положения не наблюдавшихся полос ОН (для задач звездных и атмосферных исследований).

Колеб.-
вращат.
спектр

Ф. 1977
N 4

5265-11

4-16321

1976

OH

85: 151345x High-resolution emission spectrum of hydroxyl in an oxyacetylene flame from 3.7 to 0.9 μm . Maillard, J. P.; Chauville, J.; Mantz, A. W. (Lab. Telesc. Infrarouge, Obs. Meudon, Meudon, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 63(1), 120-41 (Eng). The vibration-rotation OH spectrum emitted by an $\text{C}_2\text{H}_2\text{-O}_2$ flame was measured between 2700 and 11000 cm^{-1} with a high-resolution Fourier Spectrometer. The main interferences in the spectra are due to H_2O vapor absorption and emission which are mixed with O in the source. Nevertheless, line positions to high J values (more than 20 for some P branches) of the 1-0 and 2-1 bands of the $\Delta v = 1$ sequence, 2-0, 3-1, 4-2, and 5-3 of $\Delta v = 2$ and 3-0, 4-1, and 5-2 of the $\Delta v = 3$ sequence are reported. Bands of the $\Delta v = 3$ sequence are reported for the 1st time. Ground-state mol. consts. of OH were derived from a least-squares fit of the data, weighted according to their estd. uncertainties. Uncertainties in the new set of mol. consts. are considerably improved relative to the previously available consts. Predicted positions of some unobsd. bands of OH were calcd.

from these new consts. for the purpose of aiding stellar and atm. studies.

C.A. 1976: 85 N20 (41) Maillard, $\text{C}_2\text{H}_2\text{-O}_2$

M. H.

27-5423

ОН - концентрация
в реакторе

И.Ф.

22 Б1212. Концентрация гидроксильных радикалов и атомарного кислорода при горении с высокоинтенсивной турбулентностью. Malte P. C., Schmidt S. C., Pratt D. T. Hydroxyl radical and atomic oxygen concentrations in high-intensity turbulent combustion. «16th Symp. (Int.) Combust., Cambridge, Mass. 1976». Pittsburgh, Pa, 1976, 145—153. Discuss. 153—155 (англ.)

Спектроскопически измерены конц-ии радикалов ОН и атомов О, а также т-ры в гомог. реакторе, в к-ром

сжигался CH_4 в воздухе при давл. 0,92 атм. Коэф. избытка топлива изменялся от 0,57 до 1,33, а отношение массовой скорости потока к объему реактора от $1,89 \cdot 10^{-2}$ до $4,03 \cdot 10^{-2}$ г/см³·сек. Установлено, что вращательная т-ра ОН приблизительно на 7% выше, чем измеренная термопарой. Конц-ия ОН увеличивается с увеличением отношения расхода газа к объему реактора, она максимальна при значении отношения расходов топлива к воздуха $\sim 0,85$. В этой же области находится максимум конц-ии атомов О.

Из резюме

2.1973/22

61206.4322

Ch, TC

40892

OH

(2-14.11.0)

1976

*4-15618

Maréchal Y. Comment on "Structure of the OH stretching vibrational band of formic acid" by Hans Wolff, Bernd Nikolaus, and Erika Wolff. - Authors' reply. "J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 8, 3393-3396 (англ.)

0260 пмк

739 746

ВИНИТИ

О-М

1976

Мастерюков В.С. и др

Ж. сирок. Худ. 1976,
17, N1, 172-4

(амм. вел.)
r

(сд Вел-М) III

OM

1976

McCulloch K.E.

Int. J. Mass. Spectrom.

Ion. Phys. 1976, 21 (3-4),
333-42.

($\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2^+$; III)

ОН

 $(A^2\Sigma^+)$

1976

19 Б86. Вращательное возбуждение и распределение заселенностей радикалов $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$, образующихся при электронном ударе из молекул воды. Möhlmann G. R., Beenakker C. I. M. The rotational excitation and population distribution of $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ produced by electron impact on water. «Chem. Phys.», 1976, 13, № 4, 375—385 (англ.)

спектр
испуск

Измерен спектр испускания (СИ) радикала OH (полоса 3064 Å, соотв-щая переходу $A^2\Sigma^+, v'=0, N' \rightarrow X^2\Pi, v''=0, N''$), образующегося из молекул H_2O при ударе моноэнергетич. электронами с энергией $E=0-1000$ эв. Из СИ определены распределения по заселенностям вращательных уровней $f(N')$, а также распределения по вращательным возбуждениям $j(N', N'')$. Установлено, что в области $E=0-100$ эв наблюдается различная зависимость $f(N')$, и $j(N', N'')$ от E при больших N' и малых N'' , что позволило разделить вклады триплетных и синглетных возбуждений H_2O в образовании

Р.Ж.Х., 1976, 19

$\text{OH}(A^2\Sigma^+)$. Показано, что $f(N')$ и $j(N', N'')$, могут
 быть представлены в виде суперпозиции трех больц-
 мановских распределений, два из к-рых описывают
 вклад синглетных, а третье — триплетных состояний
 H_2O с параметрами соотв. $T_1=13\,800$, $T_2=2900$ и $T_3=$
 $=400^\circ\text{K}$ для $f(N')$ и $T_1=30\,000$, $T_2=3300$ и $T_3=4800$
 для $J(N', N'')$. Предложены два механизма, объясняю-
 щие возникновение «аномального» (T_1) и «нормально-
 го» (T_2) вращательного возбуждений $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$, обра-
 зующегося из синглетных состояний H_2O , один из к-рых
 предполагает образование атома Н в основном со-
 стоянии, а др. в возбужденном.

Е. Николаев

61229.7324
Ch, TC, MGU

014

41197

*

1476

4-15938

Nielsen S.O., Michael B.D.,
Hart E.J.
Ultraviolet absorption spectra of
eq-H, OH, D, and OD from pulse radiolysis
of aqueous solutions.

"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 22, 2482-2488
(англ.)

07.80 пик.

735 739

ВИНИТИ

QH

84-16322

1976

fact
reaction
mechanism,
Do

Pople J. A. et al.
Int. J. Quantum
Chem. Sympos.
1976, vol. 1-19.

ОН

оттиск 4743

1976

Pople John A.

" Bull. Soc. chim belg "

1976, 85, n6, 347-361 (avis)

структ.
парам.

OH

1976

Radom L.

Aust. J. Chem., 1976, 29(8),
1635-40.

(расчет
структ.)

(see NH_2^-) III

ОН

8 Д192. Показатель влияния колебательно-вращательного взаимодействия на интенсивности в электронных спектрах двухатомных молекул. Siddagame Gowda L., Sreedhara Murthy N. An index of the influence of vibration-rotation interaction on intensities in electronic spectra of diatomic molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1976, 14, № 3, 238—239 (англ.)

Эффективный потенциал двухатомной молекулы имеет минимум при межатомном расстоянии

$$r_0 = r_e [1 + 4B_e^2 J(J+1) / \omega_e^2].$$

По этой ф-ле, при различных значениях J рассчитаны значения r_0 в основных и возбужденных электронных состояниях молекул ОН, N_2^+ , CN, MgH, AlH, CP, CH, C_2 и CrO. Вычислены также изменения Δr_0 , Δr_e при электронном возбуждении, разности $(\Delta r_0 - \Delta r_e)$, рассматриваемые как показатели влияния колебательно-вращательного взаимодействия на интенсивности, и факторы Франка—Кондона. Примерами высоких значений показателя влияния служат полосы $A-X$, $A-X$ и $B-A$ в спектрах AlH, MgH и CP.

М. А. Ковнер

1976

16741-54

расчет
 r_0
 Колеб.-вращ.
 -вращ.
 взаимодей.

ф. 1977. № 8

ОН

1976.

93 Д732. Определение с помощью индуцированной лазером флуоресценции распределения по внутренним состояниям радикалов ОН, образующихся в пересекающихся пучках $H+NO_2$. Silver Joel A.; Dimpfl William L., Brophy John H., Kinsey James L. Laser-induced fluorescence determination of internal-state distribution of OH produced by $H+NO_2$ in crossed molecular beams. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 5, 1811—1822 (англ.)

заселен.
вращ.
уровней

Относительные заселенности вращательных уровней колебательных состояний $v=0$ и $v=1$ радикалов ОН, образующихся в реакции $H+NO_2 \rightarrow OH+NO$, измерены методом лазерно-индуцированной флуоресценции. Обнаружена высокая степень вращательного возбуждения. Установлено, что заселенность состояния $v=1$ в $1,3 \pm 0,3$ раза больше по сравнению с заселенностью состояния $v=0$. Результаты проанализированы в рамках теоретико-информационного подхода. Библ. 54.

ф. 1977 №3

1976

ОН

инверс.
заселен

10 Д343. Наблюдение инверсной заселенности между Λ -дублетными состояниями ОН. Ter Meulen J. J., Meerts W. L., van Mierlo G. W. M., Dymannus A. Observations of population inversion between the Λ -doublet states of ОН. «Phys. Rev. Lett.», 1976, 36, № 17, 1031—1034 (англ.)

Наблюдено распределение инверсной заселенности энергетич. уровней между Λ -дублетными состояниями для ОН-радикалов, полученных в реакции $\text{H} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{NO}$. Порядок наблюдаемой инверсии 4—6% для состояний $^2\Pi_{3/2}$, $J=3/2$, $5/2$, $7/2$ и $^2\Pi_{1/2}$, $J=1/2$, а также менее 1% для состояний $^2\Pi_{1/2}$, $J=3/2$, $5/2$, $7/2$ и $9/2$.

ф. 1976. №10

OH

1976

уве́рен
за́верен

metastable atoms to the opt. pump
/ S4: 187099p Observations of population inversion between the Λ -doublet states of hydroxyl. Ter Meulen, J. J.; Meerts, W. L.; Van Mierlo, G. W. M.; Dymanus, A. (Fys. Lab., Katholieke Univ., Nijmegen, Neth.). *Phys. Rev. Lett.* 1976, 36(17), 1031-4 (Eng). Inverted population distribution between Λ -doublet states of OH produced in the reaction $H + NO_2 \rightarrow OH + NO$ was obsd. in a beam maser and in a mol.-beam elec.-resonance spectrometer. The obsd. inversions are of the order of 4-6% for the $^2\Pi_{3/2}$, $J = 3/2, 5/2, 7/2$, and the $^2\Pi_{1/2}$, $J = 1/2$ states, and less than 1% for the $^2\Pi_{1/2}$, $J = 3/2, 5/2, 7/2$, and $9/2$ states.

C.A. 1976, 84 N26

60810.1909

Ph, TC, A

OH (Франция)
63439

1976

4559

к р. N 60810.1875

Townes C. H. Interstellar molecules.

"Mém. Soc. roy. sci. Liège", 1976, 9,

453-474. Discuss., 475

(англ.)

0680 лнк

640 662

6.72

ВИНИТИ

1976

$\delta(OH)$ Travert J., Lavalley J.C.

Колл.
спектр.
Spectrochim. acta,
1976, A 32, N 3, 637-649.

● (coll CCl_3CH_2OH)
III

ОН

#4 - 17247

1976

SH

17 Д230. Теория эффекта Зеемана высокой точности для двухатомных молекул. Veseth L. Theory of high-precision Zeeman effect in diatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 2, 180—192 (англ.)

Предлагается уточненная теория эффекта Зеемана для двухатомных молекул, основанная на численной диагонализации спин-гамильтониана молекулы. Детальные ф-лы для матричных элементов даны в случае молекулы с одним магн. ядром. Численные расчеты с учетом эффектов тонкой и сверхтонкой структуры и внешнего магн. поля выполнены для $^2\Pi$ -состояний молекул ОН и SH. Из анализа эксперим. данных об эффекте Зеемана для этих молекул найдены значения $(g_l + g_s/2)$, равные соответственно 2,00092 (3) и 2,000889 (4), в то время как рассчитанные автором теоретич. значения равны 2,00087. (для ОН) и 2,000951 (для SH). Т. К. Ребане

тонкая
и сверхтон.
структ.

(41)



Ф. 1977. №7

ОН

1976

5 Д964. Исследование люминесценции радикала ОН ($A^2\Sigma^+$) при фотолизе паров воды вакуумным УФ-излучением. Виноградов И. П., Вилесов Ф. И. «Оптика и спектроскопия», 1976, 40, № 1, 58—62

В спектральной области 1370—850 Å определены абс. значения квантового выхода люминесценции возбужденного гидроксильного радикала, образующегося при фотолизе паров воды. Установлено, что константа скорости тушения люминесценции радикала ОН не зависит от энергии возбуждающего фотона и равна $(7 \pm 1) \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \cdot \text{сек}^{-1} \cdot \text{молекул}^{-1}$. Получены спектры люминесценции гидроксильного радикала. Установлено увеличение вращательного возбуждения ОН радикала при уменьшении длины волны возбуждающего излучения.

Автореферат

$A^2\Sigma^+$

ф. 1976 N 5

ОН

1976

11 Б1444. Исследование люминесценции радикала $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ при фотолизе паров воды вакуумным УФ-излучением. Виноградов И. П., Вилесов Ф. И. «Оптика и спектроскопия», 1976, 40, № 1, 58—62

Спектры
люминесценции

В спектральной области 1370—850 А определены абс. значения квантового выхода люминесценции возбужденного гидроксильного радикала, образующегося при фотолизе паров воды. Установлено, что константа скорости тушения люминесценции радикала ОН не зависит от энергии возбуждающего фотона и равна $(7 \pm 1) \cdot 10^{-10}$ см³/сек. Получены спектры люминесценции гидроксильного радикала. Установлено увеличение вращательного возбуждения ОН-радикала при уменьшении длины волны возбуждающего излучения. Резюме

2 1976 N 11

1976

OH
($A^2\Sigma^+$)

Ямасита Убао.
Trans: Assoc. Mech.
Technol., 1976, 28, N1, 16-24.

молекулы борн.

(all H_2O) / III

ОН

Ошмиск 5674.

1977

ТОД532. Экспериментальное исследование насыщения микроволнового поглощения радикала ОН. Ba-
stard Daniel, Bretenoux Alain, Charru
André, Picherit Francois. Étude expérimentale
de la saturation de l'absorption hertzienne du radical
ОН. «С. г. Acad. sci.», 1977, 284, № 20, В445—В447
(франц.; рез. англ.)

Измерена ширина линии перехода $F=4-4(2P_{3/2}, J=7/2)$ вблизи 13 441, 417 Мгц радикала ОН при давл. от 10^{-4} — 10^{-1} мм рт. ст. При давл. 10^{-4} — 10^{-3} мм рт. ст. ширина этой линии составляет 25 кгц и не зависит от давления, а при давл. 10^{-2} — 10^{-1} мм рт. ст. ширина линии линейно возрастает от 100 до 220 кгц. По насыщению поглощения оценено поперечное сечение столкновений ОН-радикала ($\sigma \approx 0,7 \cdot 10^{-14}$ см²). М. Р. Алиев

Ф. 1977 IV 10

1977

OH

90: 61617m Calculation of vibrational energies and Franck-Condon factors for the $A^2\Sigma^+-X^2\Pi$ system of a hydroxyl molecule. Blinkova, V. G.; Popova, T. N. (USSR). Deposited Doc. 1977, VINITI 1232-77, 6 pp. (Russ). Avail. VINITI. The vibrational energies ($v \leq 13$) for 2 electronic states, $X^2\Pi$ and $A^2\Sigma^+$, of OH were calcd. by numerical integration of the radial Schroedinger equation by using 3-parameter semiempirical potentials. The Franck-Condon factors for the $A^2\Sigma^+-X^2\Pi$ system ($v' \leq 6$ and $v'' \leq 12$) were also calcd. by the numerical integration method by using Simpson's rule and wave functions obtained by a 3-parameter potential method (B. and P., 1976).

Две пере
кон. упрот
 $X^2\Pi$ и $A^2\Sigma^+$

C.A. 1979 90 N 8

ОН

1977

7 Д199 ДЕП. Расчет колебательных энергий и факторов Франка—Кондона для системы $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ молекулы ОН. Блинова В. Г., Попова Т. Н. (Редколлегия ж. «Изв. высш. учеб. заведений. Физика»). Томск, 1977. 5 с., библиогр. 3 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 31 марта 1977 г., № 1232—77 Деп.)

Выполнен расчет колебательных энергий и факторов Франка—Кондона для перехода $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ молекулы ОН. Расчет проводился численными методами по составленным авторами программам. В качестве потенц. функций использовались выбранные разработанным ранее методом (РЖФиз, 1975, 5Д216) трехпараметрические полуэмпирич. потенциалы.

Автореферат

92.1977. №7

OH

HCO (X²Π)

1977

12 Д757. Колебательно-вращательное возбуждение радикалов OH(X²Π), образующихся в реакции O+HCO→OH(v)+CO. Becker K. H., Lippmann H., Schurath U. Schwingungs-Rotations-Anregung von OH(X²Π)-Radikalen durch die Reaktion O+HCO→OH(v)+CO. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1977, 81, № 6, 567—572 (нем.; рез. англ.)

В спектре испускания радикалов OH, образующихся в реакциях атомов O(³P) с простыми органич. молекулами, в области 5000—9000 Å обнаружены полосы Мейнеля Δv=7, 6, 5 и 4. Образование колебательно-возбужденных радикалов OH объяснено реакцией O+HCO→OH(v)+CO. Показано, что в отличие от реакции H+O₃→OH+O₂, в которой образуются ра-

колебат.-
вращат.
возбужд.

р. 1977, №12

дикалы OH с колебательным возбуждением до $v=9$, реакции с $\text{O}(^3P)$ приводят к заметному заселению уровня $v=10$. В распределении заселенности вращательных уровней состояния $v=10$ наблюдаются два максимума, один из которых интерпретирован как результат рудиментарного проявления первичного распределения. На основании полученных данных определена теплота образования радикалов HCO , $\Delta H_f^\circ(298^\circ \text{K}) = -(44,8 \pm 4)$ кдж/моль, что дает для энергии диссоциации HCO значение $D(\text{H}-\text{CO}) = (57,8 \pm 4)$ кдж/моль. Библ. 27.

ОН

ВР-ХI-5746

1977

11 Б132. Применение модели «одного взаимодействия» для интерпретации колебательных спектров ОН в основном состоянии. Анализ сверхтонкой структуры λ -удвоения, чисто вращательного спектра и полосы $A^2\Sigma-X^2\Pi$ (0,0). Destombes J. L., Marliere C., Rohart F. A unique model for the interpretation of OH vibrational ground-state spectra. λ -Doubling hyperfine structure, pure rotational spectrum, and $A^2\Sigma-X^2\Pi$ (0,0) electronic band analysis. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 67, № 1—3, 93—116 (англ.)

Рассматривается частный случай квантово-мех. расчета, когда изучаемое электронное состояние сильно взаимодействует только с одним состоянием, а все остальные возмущения значительно слабее. В этом случае гильбертово пространство включает подпространства двух взаимодействующих уровней, а др. возмущения учитываются с помощью преобразования Ван-Флека.

м.п.

X. 1978 N 11

Тогда значения энергий уровней находятся непосредственной диагонализацией общего гамильтониана в соответствующих подпространствах. Предложенный метод испытывается на примере радикала OH , у которого основное состояние $X^2\Pi$ значительно возмущено взаимодействием с $A^2\Sigma^+$, а др. электронные состояния слабо влияют на основное. Проведено несколько расчетов с включением различного числа эксперим. значений энергий уровней и определены соответствующие ряды молек. постоянных, с помощью которых рассчитывались положения линий в полосе $(0,0)$ перехода $X^2\Pi-A^2\Sigma$, в чисто вращательном спектре, а также параметры сверхтонкой магнитной структуры λ -удвоения. Точность расчета оказалась достаточно высокой.

Л. В. Серебrenников

OH

М.Н.

B-9-X-5446

9.1978, N5

1977

5 Д343. Общая модель для интерпретации спектров ОН в основном колебательном состоянии. Λ -удвоение, вращательный спектр и анализ электронной полосы $A^2\Sigma-X^2\Pi$ (0, 0). Destombes J. L., Magliere C., Rohart F. A unique model for the interpretation of OH vibrational ground-state spectra. Λ -doubling hyperfine structure, pure rotational spectrum, and $A^2\Sigma-X^2\Pi$ (0, 0) electronic band analysis. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 67, № 1—3, 93—116 (англ.)

Выполнен одновременный анализ УФ-, вращательных спектров и микроволн. спектров, связанных с переходами между уровнями сверхтонкой структуры Λ -удвоения, с помощью одного и того же гамильтониана. Диагонализация гамильтониана выполнена в базисе для случая Гунда a_v . Возмущения участвующих в УФ-переходах уровней возбужденными колебательными и другими электронными уровнями учтены методом преобразования Ван-Флека. Молекулярные параметры определены нелинейным методом наименьших квадратов по частотам всех наблюдаемых линий. Приведены частоты рассчитанных по этим параметрам и измеренных в опыте линий УФ-, ИК- и микроволн. спектра. Библ. 49.

М. Тонков

1977

OH

10 Д416. К вопросу об аномалиях в линиях-спутниках в возбужденных состояниях OH. Elitzur Moche. On satellite lines anomalies in OH excited states. «Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.», 1977, 179, № 1, 143—145 (англ.)

Показано, что различные механизмы накачки могут привести к одинаковому распределению заселенности в первых двух возбужденных состояниях радикала OH. По этой причине анализ излучения не может дать однозначного ответа на вопрос о механизме возбуждения. В частности указано, что радиоизлучение, недавно наблюдавшееся Вайтоуком и Гарднером в системе G 219,3—0,7, может быть объяснено как радиационной, так и столкновительной накачкой.

ф. 1977 № 10

ОН

ВР-11-5783

1977

12 Б1287. Предиссоциация и туннельный эффект в состоянии $A^2\Sigma^+$ радикала ОН. German K. R. Predissociation and tunneling in the $A^2\Sigma^+$ state of OH. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 11, 5411—5412 (англ.)

Анализируются причины расхождений результатов двух работ по определению констант E_0 и r_r отталкивательного состояния $4\Sigma^-$ радикала ОН на основании данных по началу предиссоциации с уровней $V'=0,1$ $A^2\Sigma^-$ -состояния ОН, на к-рое состояние $4\Sigma^-$ оказывает возмущающее действие (German K. R., «J. Chem. Phys.», 1975, 63, 5252), и на основании данных по исчезновению вращат. структуры в спектре испускания ОН с уровня $V'=2$ (Palmer H. B., Naegeli D. W., «J. Molec. Spectr.», 1968, 28, 417). Здесь E_0 — энергия состояния $4\Sigma^-$ в отсутствие вращения, r_r — межъядерное расстояние, вычисленное на основании вращательной константы B . Найдено, что данные по началу предис-

x, 1978, N 12

социации дают $E_0=37\,650\text{ см}^{-1}$, $r_r=1,65\pm0,06\text{ А}$, а данные по исчезновению вращательной структуры дают $E_0=38\,450\text{ см}^{-1}$, $r_r=1,25\text{ А}$. Это расхождение объяснено различиями соотв-щих физ. процессов, в частности большей чувствительностью измерений излучательного времени жизни к эффектам туннелирования атома Н через потенциальный барьер между $^2\Sigma^+$ и $^4\Sigma^-$ -состояниями при преддиссоциации.

В. Е. Скурат

ОН

ВР-Х-5783

1947

1) 7 Д182. Преддиссоциация и туннельный переход в $A^2\Sigma^+$ -состоянии ОН. German K. R. Predissociation and tunneling in the $A^2\Sigma^+$ state of OH. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 11, 5411—5412 (англ.)

Анализируются причины расхождения величин E_0 и r , определяющих энергию отталкивательного $^4\Sigma^-$ -состояния при отсутствии вращения и межъядерного расстояния в точке пересечения потенц. кривых возбужденных состояний $A^2\Sigma^+$ и $^4\Sigma^-$ радикала ОН, полученных в результате анализа, проведенного в работе Палмера и др. (Palmer H. B. et al. «J. Mol. Spectrosc.», 1969, 28, 417)

преддиссо-
циация

ВР-1947, № 7

и в работе автора (German K. R., «J. Chem. Phys.», 1975, 63, 5252). Палмер и Нэгели рассматривали преддиссоциацию как нарушение структуры вращательного излучения, происходящего при гораздо более высоких значениях уровней N , и нашли, что $E_0 = 38\,450\text{ см}^{-1}$, $r = 1,35\text{ Å}$. Результаты автора, основанные на анализе условий начала преддиссоциации, происходящей при более низких N , приводят к $E_0 = 37\,650\text{ см}^{-1}$, $r = 1,65 \pm 0,06\text{ Å}$. Показано, что расхождение в r может быть обусловлено тем, что измерение излучательного времени чувствительно к эффекту туннельного перехода через потенц. барьер.

И. Флакс

OH

BP-XI-5783

1977

88: 67465r Predissociation and tunneling in the $A^2\Sigma^+$ state of hydroxyl. German, K. R. (Burleigh Instrum., Inc., East Rochester, N. Y.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(11), 5411-12 (Eng). A polemic concerning a paper by H. B. Palmer and D. W. Naegeli (*J. Mol. Spectros.* 1968, 28, 417).

n/pigeons.

 $A^2\Sigma$

P.A. 1978, 88, N10

1977

ОН

8 Д414. Водородная связь и перенос заряда: Взаимодействие ОН радикала с атомами инертных газов. Goodman Julie, Brus L. E. Hydrogen bonding and charge transfer: interaction of OH radical with rare gas atoms. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 11, 4858—4865 (англ.)

Исследованы спектры ОН в матрицах инертных газов. Хотя, как известно, в матрице атомов Ne радикал ОН практически свободно вращается, и не наблюдается колебательной релаксации, в кристаллах атомов более тяжелых инертных газов Ar, Kr и Xe обнаружено сильное влияние окружающих атомов на радикал (увеличение скорости релаксации в 10^3 раз в

спектр
в матрице

Ф. 1978, № 8

состоянии радикала $A^2\Sigma$). По типу спектра поглощения радикала $A^2\Sigma \leftrightarrow X^2\Pi$ установлено, что в обоих электронных конфигурациях комплекс, образуемый радикалом с ближайшим атомом матрицы, линейный. Для ОН в состоянии $A^2\Sigma$ в матрице Аг определены параметры $D_0 \simeq 675 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e \simeq 203 \text{ см}^{-1}$ и $\omega_{ex_e} \simeq 13,1$, а в матрице Кг $D \geq 1000 \text{ см}^{-1}$. Обнаружен сдвиг полосы излучения ОН($A^2\Sigma$) из основного колебательного состояния в основном при переходе от Ne к Xe с 3090 см^{-1} до 4400 см^{-1} . Обсуждается природа связи, образуемой радикалом ОН с атомами инертных газов на основе полученных спектроскопич. данных и с использованием известных исследований изоэлектронных комплексов атомов галогенов с атомами инертных газов. Рассмотрена роль эффектов переноса заряда при образовании подобных комплексов. А. И. Шушин

ОН

HCl⁺

HF⁺

(и.и.)



(+2)

2. 1977

№ 17

45-18396

1977

17 Б23. Неэмпирический расчет спин-вращательной постоянной для двухатомных молекул в $^2\Pi$ состояниях. Проверка приближения Ван Флека. Green Sheldon, Zare Richard N. Ab initio calculation of the spin-rotation constant for $^2\Pi$ diatomics. Test of the Van Vleck approximation. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 64, № 2, 217—222 (англ.)

Проведен неэмпирич. расчет спин-вращательной постоянной, γ^{π} , для основных $X^2\Pi$ -состояний ОН, HCl⁺, HF⁺ и их дейтерированных аналогов. Для расчета использованы волновые функции, полученные в рамках ограниченного метода Хартри — Фока. Показано, что расширение базиса не приводит к заметному изменению матричных элементов спин-вращательного гамильтониана. Вычисл. значения γ^{π} в 50—100 раз меньше значений, предсказываемых на основе приближения Ван Флека. Для двухатомных гидридов предложена модификация приближения Ван Флека, учитывающая наличие тяжелого и легкого ядер. Значения γ^{π} , рассчитанные по предложенной ф-ле, находятся в хорошем согласии с результатами неэмпирич. расчетов. Б. И. Жилинский

OH Herfried Griengl, 1974
 Janosehek Rudolf.

"Tetrahedron"; 1977,
33, N4, 445-448.

(An⁺)



(cer. F⁻) III

Оттиски 5513

1977

ОН
 $(OH)_2$
 $(OH)_3$

11 Д172. Систематическое изучение потенциалов ионизации и сродства к электрону, протону, водороду и гидридам для молекул OH_n и их ионов. Kari Roy E., Csizmadia Imre G. A systematic study of the ionization potentials and electron, proton, hydrogen, and hydride affinities of OH_n molecules and ions. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 14, 4539—4545 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты методом ЛКАО МО ССП молекул OH_n ($n=1, 2, 3$) и их положительных и отрицат. ионов. Для расчета использован двухэкспонентный базис из сгруппированных гауссовых ф-ций с включением поляризационных ф-ций. Вычисления проведены при различных значениях длин связей О—Н и углов НОН. На основании полученных данных определены потенциалы ионизации и сродство к электрону, протону, водороду и гидридам. Показано, что присоединение протона к отрицат. ионам или нейтральным молекулам приводит к понижению энергии, присоединение атома водорода энергетически более выгодно для систем с большим числом атомов водорода.

Б. И. Жилинский

У. Ae^- , AH^+

Ф. 1974

N 11

+2

☒

OH

OD

XI - 5520

1977.

14 Б116. Фотоэлектронные спектры радикалов OH и OD. Katsumata S., Lloyd D. R. The photoelectron spectra of the OH and OD radicals. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 3, 519—522 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры радикалов гидроксила, возбуждаемые источником He-I. Радикалы OH и OD образовывались при взаимодействии NO₂ с атомарным водородом или дейтерием (в H₂ или D₂ при МВ-разряде). Полоса при 13,01 эв, имеющая слабую колебательную компоненту, связана с образованием OH⁺ (OD⁺) в состоянии X³Σ⁻. Величина колебательного ин-

м.н

(+1) 



x. 1977. N 14

тервала ($\text{OH}^+ — 2950 \pm 50$, $\text{OD}^+ — 2260 \pm 50 \text{ см}^{-1}$) согласуется со значением полученным из спектров испускания (2956 и 2185 см^{-1}). Полоса $15,20 \text{ эв}$ отнесена к $\text{OH}^+(\text{OD}^+)$ в состоянии $^1\Delta$, существование к-рого предполагалось ранее на основании анализа возмущений в системе $A^3\Pi — X^3\Sigma^-$ в спектре испускания OD^+ . Колебательная структура состояния $^1\Delta$, а также полосы, связанные состояниями с $A^3\Pi$ и $^1\Sigma^+$, не наблюдались из-за наложения полос окиси азота и водорода (дейтерия).

В. М. Ковба

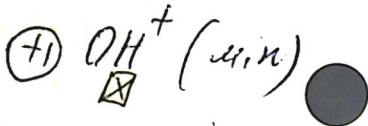
OH

XI-5520

1977

(y)

S6: 130674j The photoelectron spectra of the hydroxyl and hydroxyl-d radicals. Katsumata, S.; Lloyd, D. R. (Chem. Dep., Univ. Birmingham, Birmingham, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 45(3), 519-22 (Eng). He I photoelectron spectra of the OH radical show ionizations corresponding to the prodn. of OH^+ (OD^+) in the states $X^2\Sigma^-$ and $^1\Delta$ at ionization potentials of 13.01 eV and 15.20 eV, resp. The excitation energy of the $^1\Delta$ state is in very good agreement with that predicted by calcs. and expt.; vibrational spacings in the $X^2\Sigma^-$ state agree with emission spectroscopic data.



C.A. 1977 86.N18

OH

D-5520

1977

OD

7 Д430. Фотоэлектронные спектры радикалов OH и OD. Katsumata S., Lloyd D. R. The photoelectron spectra of the OH and OD radicals. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 45, № 3, 519—522 (англ.)

Получены HeI фотоэлектронные спектры радикалов OH и OD. Радикалы образовывались при реакции NO_2 с атомами H, генерируемыми в СВЧ-разряде в H_2 . Вертикальные потенциалы ионизации OH и OD равны (в эВ); 13,01; 15,20. Потенциалы ионизации соответствуют образованию OH^+ и OD^+ в состояниях $X^3\Sigma^-$ и $^1\Delta$. В первой фотоэлектронной полосе OH и OD идентифицирована колебательная структура с $\nu(\text{OH}) = 2950 \text{ см}^{-1}$ и $\nu(\text{OD}) = 2260 \text{ см}^{-1}$. Библиография 18. Ю. В. Чижов

фотоэлектронный
спектр

(7)



(41) м.с. : ☒

ф. 1977. № 7

ОН

1077

6 Д505. Измерение поглощения ОН с помощью непрерывного перестраиваемого лазера. Killinger D. K., Wang Charles C. Absorption measurements of OH using a cw tunable laser. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 52, № 2, 374—376 (англ.)

спектр
поглощ.

Проведены измерения спектров поглощения ОН (переход $^2\Pi \rightarrow ^2\Sigma^+$, $v=0 \rightarrow 0$, $\lambda \approx 3080 \text{ \AA}$) с помощью непрерывного перестраиваемого лазера на красителе с удвоением частоты, обеспечившего ширину линии генерации $\approx 0,072 \text{ см}^{-1}$ при выходной мощности $\approx 3 \text{ мкВт}$. Необходимая конц-ия ОН достигалась методом возбуждения высоковольтного электрич. разряда в многопроходной кювете длиной 25 см с парами H_2O при давлении $\leq 20 \text{ мм рт. ст.}$ Из анализа полученных спектров определены зависимости вращательной и трансляционной т-р ОН от мощности электрич. разряда. Миним. конц-ия ОН, регистрируемая на эксперим. установ-

Ф. 1978, № 6

ке, оценена $\approx 10^9 \text{ см}^{-3}$ при величине отношения сигнал/шум ≈ 1 . Предполагается, что использование кюветы длиной 2 м с числом проходов ≈ 100 в сочетании с методом модуляции излучения позволит поднять чувствительность установки до $\approx 10^5 \text{ см}^{-3}$. Кратко обсуждены преимущества метода лазерной спектроскопии поглощения перед методом индуцированной лазером флуоресценции для измерения концентрации ОН в атмосфере, продуктах сгорания в-в и пр. Библ. 7. С. Л.



OH

1947

Klimo William et al.

"Chem. Phys. Lett." 1947, 46,
N3, 481-484 (am.)

(u.n.)

ex. BeH - III

1974

ОН

4 Б1143. Перенос энергии в состоянии $A^2\Sigma^+$ радикала ОН. I. Перенос вращательной энергии. Lengel Russell K., Crosley David R. Energy transfer in $A^2\Sigma^+$ OH. I. Rotational. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 5, 2085—2101 (англ.)

При возбуждении индив. вращательных уровней ($N=0-6$) электронного состояния $^2\Sigma^+$ радикала ОН излучением перестраиваемого лазера на красителе наблюдали спектральное распределение люминесценции (СРЛ) на переходе $^2\Sigma^+ \rightarrow ^2\Pi$. Исследованием зависимости СРЛ от давления газов-релаксантов N_2 , H_2 , Ar определены интегральные константы скорости враща-

тельной релаксации уровней $N=0-6$ ($\sim 5 \cdot 10^{-10}$ см³/молекула·сек для N_2). Из сопоставления трансформации СРЛ с развитой моделью вращательной релаксации определены значения вероятностей для $\sim 200 N-N$ -переходов (для $N=1-15$).
Г. К. Васильев

перенос
вращат.
энергии

д. 1978, №4

QH

OmniCell 5757

1977

(Ae)

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc.,
1977, 99, (17), 5557-70.

1977

ОН

В. И. Мещеряков

6 Д559. Одновременные измерения температуры и концентрации радикалов ОН в пламени методом лазерной абсорбционной спектроскопии высокого разрешения. Lück Klaus C. Simultane Temperatur- und OH-Konzentrationsbestimmung in Flammen mit hochauflösender Laserabsorptionsspektroskopie. «Laser 77 Opto-Electron. Conf. Proc., Munich, 1977». Guildford, 1977, 158—163 (нем.)

В области 280—320 нм исследованы спектры поглощения радикалов ОН ($A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$), образующихся в метано-воздушном пламени при атмосферном давлении. Измерения проведены с помощью узкополосного ($\Delta\nu \leq 50$ МГц) перестраиваемого лазера с удвоением частоты на красителе «родамин-6Ж», накачиваемом излучением Ag^+ -лазера. Из анализа спектральных данных оценены величины кон-ин радикалов ОН и их вращательной и кинетич. т-р в различных зонах пламени.

С. Л.

сп. 1979, №6

1977

Gmmeu 5678

OH

OD

 $A^2\Sigma-X^2\Pi$

① 18

87: 159580g Electronic excitation of the radical hydroxyl= (hydroxyl-d) $A^2\Sigma^+$ formed by photolysis of water(water-d₂) at 104.8-106.7 nm and by argon photosensitization. Masanet, Jeannine; Vermeil, Catherine (Ec. Super. Phys. Chim. Ind., Paris, Fr.). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1977, 74(7-8), 795-8 (Fr). OH(OD)($A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$) emission were studied, OH(OD) being formed by photolysis of H₂O(D₂O) vapor with Ar lamp (104.8 and 106.7 nm) and by Ar photosensitization. The rotational temp. of OH($A^2\Sigma^+$) is higher in the direct photolysis expts. than in Ar photosensitization. This result is discussed in terms of resonant and nonresonant energy transfer, and in comparison with the results obtained by other authors studying the collision of H₂O and D₂O with metastable Ar atoms. The rotational temps. obtained for H₂O and D₂O are in the same range of magnitude; a unique model of energy distribution can be predicted for the photodissocn. of both mols.

C. A. 1977, 27, N20

ОН

1974

24 Б196. Интерпретация колебательного спектра льда I в области валентных колебаний ОН. McGraw Robert, Madden William G., Rice Stuart A., Sceats Mark G. An interpretation of the OH stretching region of the vibrational spectrum of ice I. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 48, № 2, 219—226 (англ.)

Предложена новая интерпретация колебательного спектра льда I, основанная на расчете нормальных колебаний системы взаимодействующих линейных осцилляторов. Подробно рассмотрено влияние межмолек. взаимодействий на вал. кол. ОН. Наличие такого рода взаимодействий объясняет ширину и большую часть основных полос в колебательном спектре поликрист. льда, за исключением полосы 3215 см^{-1} в спектре КР. Предполагается, что эта полоса появляется в результате взаимодействия вал. кол. ОН с колебаниями решетки. Рассчитаны и сравниваются с эксперим. данными частоты колебаний льда II и льда III. В. М. Ковба

Колебат.
спектр
И

Н. 1974
N24

ОН

м. в.
спектр

ф. 1977
128

8 Д515. О микроволновом спектре $X^2\Pi$ -состояния гидроксильного радикала. Meerts W. L. On the microwave spectrum of the $X^2\Pi$ state of the hydroxyl radical. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 46, № 1, 24—28 (англ.)

Проведено теоретич. рассмотрение спектра сверхтонкой структуры (Λ -удвоение) ОН с использованием разложения матричных элементов тонкой структуры в ряд по степеням $(J+1/2)$ до 5-й степени вращательного квантового числа J с учетом недиагональных элементов. Диапазон эксперим. данных дал возможность определить все параметры сверхтонкой структуры (Λ -удвоение) и проверить правильность теоретич. метода. Почти все наблюдаемые переходы микроволн. спектра молекул ОН в $X^2\Pi$ -состоянии соответствуют вычисленным в пределах эксперим. ошибок. Известные эксперим. частоты переходов ОН с J от $1/2$ до $13/2$ для $^2\Pi_{1/2}$ -состояния и от $3/2$ до $15/2$ для $^2\Pi_{3/2}$ -состояния использовались для определения постоянных взаимодействия тонкой и сверхтонкой структуры методом наименьших квадратов. Вычисленные постоянные использовались для расчетов ненаблюдаемых переходов Λ -удвоения ОН с $J \leq 17/2$ (предполагаемая точность 20—40 кгц). Представленный теоретич. метод может быть полезен для молекул, имеющих большое Λ -расщепление, и для вычисления переходов с большими J . Библ. 15.

1977

57.5.1-57

OH.

#4- 17775

1977

186: 148207u On the microwave spectrum of the $X^2\Pi$ state of the hydroxyl radical. Meerts, W. L. (Fys. Lab., Katholieke Univ. Nijmegen, Nijmegen, Neth.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 46(1), 24-8 (Eng). A refit of the obsd. hyperfine Λ -doubling spectrum of OH is presented by using an expansion of the fine structure matrix elements in a power series up to the 5th degree in the rotational quantum no. J . Almost all obsd. transitions of the microwave spectrum of the OH mol. in the $X^2\Pi$ state could be predicted within the exptl. inaccuracies. Reliable predictions for the nonobsd. transitions originating in the rotational states for $J \leq 17/2$ are also presented.

M. B. C. Meerts

C. A. 1977, 86 N20

ОН

1977

21 Б153. Определение заселенностей уровней радикала ОН методами линейчатого поглощения и излучения с учетом неразрешенной дублетной структуры. Очкин В. Н., Савинов С. Ю., Соболев Н. Н. «Ж. прикл. спектроскопии», 1977, 26, № 5, 900—905

Для дублетных спектральных линий, соответствующих переходу $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ молекулы гидроксила, рассчитаны функции поглощения, необходимые для определения оптич. плотности. Показано, что пренебрежение дублетной структурой линии приводит к занижению определяемых методом линейчатого поглощения величин заселенностей колебательно-вращательных уровней основного электронного состояния $X^{12}\Pi$. Величина допускаемой при этом погрешности зависит от отношения факторов интенсивности компонент в дублете $S'_{K'K''}/S_{K'K''}$ ($S_{K'K''}$) и $S'_{K'K''}$ — факторы интенсивности для главной и сателлитной компоненты дублета соотв. С ростом поглощения погрешность увеличивается. Показано также, что необходимо учитывать дублетную структуру линий и при определении вращательной т-ры молекул гидроксила ОН ($X^2\Pi$) методом линейчатого поглощения. Для дублетных спектральных линий получена ф-ла для учета реабсорбции излучения.

оп-ции
поглощ

X. 1977
N 21

OH

1977

распредел. по вращ. уровням

87: 110184s Rotational level distribution of hydroxyl radicals in a glow discharge. Ochkin, V. N.; Savinov, S. Yu.; Sobolev, N. N. (Fiz. Inst. im. Lebedeva, Moscow, USSR). Zh. Tekh. Fiz. 1977, 47(6), 1168-76 (Russ). The distribution of OH radicals over rotational levels of the ground ($X^2\Pi$) and excited electronic states $A^2\Sigma^+$ in a glow discharge in H_2O vapor was detd. from the line absorption and relative intensities of the rotational lines of the $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ transition. In all cases studied, the rotational level distribution in the ground state corresponded to a Boltzmann distribution, and in the $A^2\Sigma^+$ state, 2 distributions (of "cold" and "hot" OH radicals) were superimposed.

C. A. 1977. 87 N14

ОН

ВУ-Х/1-5938

1977

преддиссо-
циация

7 Д183. Преддиссоциация и туннельный переход в $A^2\Sigma^+$ -состоянии ОН. Palmer Howard B. Predissociation and tunneling in the $A^2\Sigma^+$ state of OH. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 11, 5413 (англ.)

В заметке Германа (см. реф. 7Д182) указывается на неопределенность в применении данных о прекращении излучения для построения предельной кривой диссоциации с использованием преддиссоциации $A^2\Sigma^+ - ^4\Sigma^-$ радикала ОН. Утверждается, что постепенность в прекращении излучения может быть связана не только с туннельным эффектом, но и с малой вероятностью преддиссоциации. По-видимому, в случае ОН исследование явления прекращения излучения полезно лишь на первом этапе. Указано, что для более полного понимания явления необходимо тщательное изучение потенц. кривых взаимодействия, полученных из эксперим. и теоретич. исследований времен жизни уровней энергии $A^2\Sigma^+$ -состояния.

И. Флакс

Ф. 1978, 117

OH

BP-XI-5938

1977

88: 67466s Predissociation and tunneling in the $A^2\Sigma^+$ state of hydroxyl. Palmer, Howard B. (Dep. Mater. Sci., Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(11), 5413 (Eng). A reply to the polemic by K. R. German (*ibid.* 1977, 67(11), 5411).

neguecos.

$A^2\Sigma^+$

CA 1978, 88, 110

ОН

ВФ-Х1-5938

1077

16 Б137. Преддиссоциация и туннелирование в состоянии $A^2\Sigma^+OH$. Palmer H. B. Predissociation and tunneling in the $A^2\Sigma^+$ state of OH. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 11, 5413 (англ.)

преддиссоциация

Обсуждена возможность использования эксперим. данных по обрыву испускания OH в результате преддиссоциации $A^2\Sigma^+ \rightarrow ^4\Sigma^-$ для построения предельной кривой диссоциации состояния $A^2\Sigma^+$ радикалов OH и OD. Отмечается, что для изучения взаимодействия потенциальных кривых OH больше подходят эксперим. и теор. методы определения времен жизни уровней энергии в состоянии $A^2\Sigma^+$.

В. М. Ковба

X. 1978, N16

IX-5525

1977

AA, J(LM, PM, SM, NM, RGM, ARM, PM, SR)

D_2 (Lil, + WH, On, Me, Nigh, RE, PH, + SP)

Robt B Meyer W,

J. Chem. Phys., 1977, 66, No. 13-19 (various)

III. PrO^-Cl^- and CEPA studies of electron correlation effects. IV Ionization energies of the first and second row diatomic hydrides and the spectroscopic constants of the ions.

Proc. 9213. 1973. SD149

10. (c)

70613.360

Ph, Ch, TC

OH, 76189

CH₃OH

аттест

5567

К р. № 70613.359

Rossarie Jean, Gallas Jean-Paul,
 Binet Claude, Romanet René. Effet de la
 liaison hydrogène sur les vibrations
 du groupement OH (ou OD) de quelques alco-
 ols. 3. Vibration de torsion OH. "J.
 chim. phys. et phys.-chim. biol.", 1977,
 74, № 2, 205-206 (франц., рез. англ.)

837 848 } 85

0896

ВИНИТИ

70613.359

OH 76189

1977

Ph, Ch, TC

(2: карб. в спиртах)

оттиски

5568

к р. № 70613.359

Rossarie Jean, Gallas Jean-Paul,

Binet Claude, Romanet René. Effet de la liaison hydrogène sur les vibrations du groupement OH (ou OD⁺) de quelques alcools.

2. Vibration de déformation angulaire

OH: anharmonicité mécanique.

"J. chim. phys. et phys.-chim. biol.",

1977, 74, № 2, 197-201

(франц. без англ.)

ОН

ВХЗ-1438

1977

19 Б14. Теоретическое изучение отрицательных молекулярных ионов. Simons Jack. Theoretical studies of negative molecular ions. «Annu. Rev. Phys. Chem. Vol. 28». Palo Alto, Calif., 1977, 15—45 (англ.)

Дан обзор сведений о расчетах и методах расчета отриц. молек. ионов. Дано краткое описание метода ур-ний движения, рассмотрена диаграммная техника этого метода. Проведен расчет потенц. кривых и св-в молекул OH , BeH , CN , BO , Li_2 , LiF , LiCl , LiH , NaN , BeO и их однозарядных отриц. ионов методами ССП, ур-ний движения и с помощью теоремы Купманса. Библ. 94. В. И. Пупышев

теория
исследования
и св-ва

методы

(-9)

⊠



2.1978, N 10

ОН

Физический 5643

1977

3 Б40. Релятивистские поправки к эффекту Зеемана в двухатомных молекулах. Veseth L. Relativistic corrections to the Zeeman effect in diatomic molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 66, № 2, 259—271 (англ.)

Определены молек. g -факторы для основных состояний симметрии $^2\Pi$ молекул ОН, SH, NO, NS и ClO, с одной стороны значения факторов $\overline{g_e + (g_s/2)}$, $\overline{g_R}$, g_v^* и g_A^* подобраны методом наименьших квадратов на основе анализа разнообразных спектроскопич. измерений, включая данные ЭПР. С другой стороны проведены теор. расчеты в предположении, что рассматриваемые молек. состояния описываются случаем Гундса. Использовано выражение для гамильтониана молекулы в релятивистском приближении Брейта — Паули. Электронные волновые функции заданы в приближении ЛКАО. Показано, что для расчетов релятивистских поправок можно пренебречь вкладами от двухцентровых интегралов. Для рассматриваемых молек. состояний выписаны явно электронные составляющие матричных элементов диамагнитной части гамильтониана. Со-

поправка
к фактору
Зеемана

2, 1978, №3

поставление теор. и эксперим. величин $g_b + (g_s/2)$, ответственных за основной вклад в эффект Зеемана, показывает, что между ними существует систематич. расхождение. Разница между этими значениями для молекул OH, SH и NO линейно зависит от величины A/B , где A — постоянная спин-орбитального взаимодействия, B — вращательная постоянная. Наибольшее различие, наблюдаемое для NO, составляет 20% от величины квантовой электродинамич. поправки для свободных электронов.

А. В. Немухин

ЕШН.
ОСТИ

1977

ОН

6 Б1093. Одновременное определение вращательной и поступательной температур радикала $\text{OH}(^2\Pi)$ в газовом разряде. Wang Charles C., Killinger D. K. Simultaneous Determination of Rotational and Translational Temperatures of $\text{OH}(^2\Pi)$ in a Gas Discharge. «Phys. Rev. Lett.», 1977, 39, № 15, 929—932: (англ.)

Путем измерений интенсивности и формы линий поглощения в переходах $^2\Pi(v=0) \rightarrow \Sigma^+(v=0)$ для радикалов ОН, получаемых при СВЧ-разряде в парах воды при давл. 0,2—20 мм, одновременно определены вращательная ($T_{\text{вр}}$) и поступательная т-ра ($T_{\text{пост}}$) радикала ОН. Измерения проводили методом спектрофотометрии поглощения с использованием излучения второй гармоники непрерывного перестраиваемого лазера на красителе в области 3080 А, что соответствует исследуемым переходам. Из зоны разряда пары воды со скоростью ~ 300 см/сек прокачивали через зону наблюдения, отстоящую от зоны разряда на варьируемое расстояние $l=5-30$ см. Найдено, что распределение населенностей вращательных уровней ОН в основном электронном состоянии является строго больш-

2, № 6, 1978

мановским, а $T_{вр} = 226 \pm 10^\circ \text{K}$ и не зависит от l (давл. паров воды 1,2 мм). В то же время $T_{пост}$, найденная по доплеровскому уширению линии поглощения ОН, равна $315 \pm 30^\circ \text{K}$ при $l = 22$ см, т. е. немного выше комн. т-ры (300°K), но существенно превышает $T_{вр}$. С понижением l до 5 см $T_{пост}$ возрастает до 365°K . С ростом давл. до 20 мм происходит повышение $T_{пост}$ и наблюдаются отклонения от больцмановского вращательного распределения: населенности высоких вращательных уровней завышены и близки к величинам, соот-щим $T_{пост}$. Эти данные показывают, что при диссоциации молекул воды электронным ударом радикалы ОН возникают без вращательного возбуждения. По оценке сечение переноса энергии с поступательных степеней свободы молекул среды на вращательные степени свободы $\text{OH}(^2\Pi)$ не превышает

10^{-16} см^2 . Эта величина меньше известного из лит-ры значения 10^{-15} см^2 для сечения аналогичного процесса с участием электронно-возбужденного состояния $\text{OH}(^2\Sigma^+)$, что свидетельствует о существенной роли электронного возбуждения во вращательно-поступательной релаксации радикалов ОН. В. Е. Скура.