

O_5^+ , O_5^-



70503.8739
Ch, Ph, Gph, TC,

05⁺
40322
MGU

(отражен в каталоге)
при гравировке. 050114

1977

*4-18229

Weiss Morris J., Berkowitz J., Appel-
man E.H.

Photoionization of ozone: formation of O_4^+
and O_5^+ .

*4-18229

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 5, 2049-2053

(англ.)

(всч. O_4^+ ; III)

0869 лнк

834 842 00

ВИНИТИ

O₅⁻

равнов.
кислород.

онлайн 6325

1978

Murrell J. N.

Chem. Phys. Lett.,
1978, 55(1), 1-5

Potential energy
surfaces...



O_5^{2-}

1979

kb. mex.
factors

93: S0604h A new chemical species: oxygenate ion O_5^{2-} ?
Julg, Andre; Ozias, Yves (Lab. Chim. Theor., Univ. Provence,
13331 Marseille, 3 Fr.). *Rev. Chim. Miner.* 1979, 16(6), 543-7
(Fr). The hypothetical sulfate-like oxygenate, O_5^{2-} ion was
studied by means of the mol. SCF method. The O-O bond
length is estd. to 1.3-1.4 Å. The net charge on the peripheral O
atoms is -0.48. The ion is stable compared to the system $O_3 +$
 O_2^{2-} . The study of the adsorption of O_3 mol. on a (100) face of a
 BaO_2 crystal suggests a possibility of the prepn. of O_5^{2-} ion.

S. Aditya

CA 1980 93 28

O₅⁻

[Om. 12851]

1981

96: 94483s Penta-oxygen monoanions in a low pressure glow discharge of oxygen. Kumar, S. V. Krishna; Venkatasubramanian, V. S.; Rau, R. S. N. (Dep. Phys., Indian Inst. Sci., Bangalore, 560 012 India). *J. Phys. D* 1981, 14(9), L133-L135 (Eng). O₅⁻ ions were detected and measured in the pos. column of a glow discharge in O between 0.04 and 0.17 torr. The reaction $O_3^- + 2 O_2 \rightarrow O_5^- + O_2$ is supported by mass spectrometric measurements.

Синтез
иона

c. A. 1982, 96, N12

O_5^+

1981

Linn S. H., et al.

(энергия
повышения)

J. Chem. Phys., 1981,
74, N6, 3348 - 3352.

(сер. $(O_2)^+$, III)

05

1991

1 B1061. Поверхности потенциальной энергии озона. 1. Potential energy surfaces of ozone. 1 / S. S. Xanthopoulos, G. J. Aichity, S. T. Elbert, K. Ruedenberg // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 12, Pt 1.— С. 8054—8069. — Англ.

М.А.

Рассчитаны потенциальные ПВ нескольких низших синглетных состояний молекулы O_3 . Расчеты проведены многоконфигурац. методом ССП в полном активном пространстве с включением в активное пространство всех валентных орбиталей. Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций $(9s5p1d)/[3s2p1d]$. Рассмотрено сечение потенциальной ПВ основного электронного состояния, содержащее минимумы для циклич. и открытой структур и путь р-ции раскрытия цикла, включая переходное состояние. Показано, что переходное состояние имеет симметрию C_{2v} и лежит почти на столько же выше по энергии, чем циклич. структура 22 ккал/моль), на сколько открытая структура лежит ниже циклической (30,2 ккал/моль). Очень близко к переход-

X. 1992, n1

ному состоянию найдено конич. пересечение основного состояния и низшего возбужденного состояния той же симметрии; конич. пересечение основного состояния в точном неэмпирич. расчете обнаружено впервые. Потенциальная ПВ возбужденного состояния имеет минимум вблизи переходного состояния основного электронного состояния. Рассмотрено также сечение потенциальной ПВ, отвечающее диссоциации O_3 на $O_2 + O$.

