

03 -



O₃⁻

P. Smith

1956

J. Phys. Chem. 60, 1471-2

структура

Структура O₃⁻

Рассмотрение SO₂⁺, SO₂⁻ и SO₂²⁻
привело к предположению
электронно-ионной связи
SO₂²⁻ симметричен и имеет
углы $\angle \text{ONO} = 108^\circ$ и $\Sigma \text{NO} = 1,30 \text{ A}$
Электронная структура

CA 51

4934 i

узур Beilstein glets gne O_3^- :

$$\angle O-O-O = 110 \pm 5^\circ$$

$$Z = 1,34 \pm 0,5 \text{ \AA}$$

I-282

1961

O_3 (O_2 , O_2 , O_3)

Curran H.K.

J. Chem. Phys., 1961, 35, N 5, 1849-1851
(АНУН.)

Negative ion formation in ozone.

PK, 1962, 21522

XI-4347

A. I. (He⁻, Ne⁷⁺, Ne⁸⁺, Na⁹⁺, 1963

Ar⁸⁺, Ne⁻, F²⁻, F³⁻, O³⁻, H²⁻)

Crossley R.J.S., Coulson C.A.

Proc. Phys. Soc., 1963, 81, N 2,
211-213 (Ann.)

Glockler's equation for ionization

...

ЕСТЬ ОПРИГН.

Рф., 1964, 5D11

10-12 м

O_3^-

структура

Herman K.,
Giguere P.A.

1965

XI-1790

Can. J. Chem.
43, N6, 1746

ИК - спектры озонида
алюминия и структура
озонид-иона.



(Сел. $NH_4 O_3$) III

O₃⁻

Wood R. H.,

1965

D'Orazio L. A.

Al⁻

"J. Phys. Chem.,"

1965, 69, ~8,

2562-2563

(Cu. LiO₃)I

O_3^-

Randhawa H.S. 1971
at all

corr.
cip - pa

Curr. Sci. (India) 1971,
40, 18, 187-188



(Cur. NO_2^{2-}) III

O₃⁻

1972

(Vi)

170830c Raman spectra of O₂⁻ and O₃⁻ ions in alkali metal superoxides and ozonides. Bates, J. B.; Brooker, M. H.; Boyd, G. E. (Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Chem. Phys. Lett.* 1972, 16(2), 391-5 (Eng). The Raman spectra of polycryst. NaO₂, KO₂, RbO₂, CsO₂, KO₃, and CsO₃ were measured at 75-300°K. Solid-solid phase transition effects were noted in spectra of the Na, K, and Rb, superoxides, but none was detected with CsO₂. External mode frequencies were obsd. in the 211-200, 146-122, and 89-62 cm⁻¹ regions in the low temp. spectra of KO₂ and RbO₂. The spectra of KO₃ and CsO₃ exhibited a single band at ~1010 cm⁻¹ which was assigned to the sym. stretching mode of the O₃⁻ ion.

C.A. 1972, 77, N26.

O_3^- ; O_3 (кв. мех. расчёт) ~~XI 3478~~ 1972
Heaton M.M., Pipano A., Kaufman J.J.;
Int. J. Quantum Chem. ^{XI 3314} Symp., 1972,
N6, 181-6 (англ.)

Configuration interaction
calculations on ozone and O_3^- .

10 Φ
~~for opinion~~ CA, 1973, 78, N10, 62 5364

X1-3103

1942

 O_3^-

(Vi, chem)

(94871z) Vibrational and electronic spectra of the O_3^- anion isolated in an argon matrix. Jacox, Marilyn E.; Milligan, Dolphus E. (Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 43(1), 148-67 (Eng). The O_3^- anion was stabilized in an Ar matrix at 14°K in concn. sufficient for the detection of the antisymmetric stretching fundamental, ν_3 , and of a band system between 5100 and 3700 Å. Both the reaction of O^- (produced by the interaction of photoelectrons with N_2O) with O_2 and the charge-transfer interaction between O_3 and K atoms have served as sources of O_3^- in these studies. Although the ν_3 absorption is slightly dependent upon the alkali metal used as the photoelectron source, the expts. suggest that the ν_3 absorption of O_3^- isolated in an Ar lattice should lie very close to 800 cm^{-1} . Detailed isotopic studies support the proposed vibrational assignment and demonstrate that the valence angle of ground-state O_3^- is $110^\circ \pm 5^\circ$ and that the O-O bonds are considerably weaker than those of O_3 . The nature of the obsd. electronic transition of O_3^- is discussed, and evidence is considered for the presence of a low-lying dissociative state.

C.A. 1942. 77. 14

03-

XI- 3103

1972.

7 B236. Колебательный и электронный спектры аниона O_3^- , изолированного в аргонной матрице. Jасох Marilyn E., Milligan Dolphus E. Vibrational and electronic spectra of the O_3^- anion isolated in an argon matrix. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 1, 148—167 (англ.)

Измерены спектры УФ- и ИК-поглощения аниона O_3^- , стабилизированного в матрице Ar. Образование аниона O_3^- происходило при р-ции ионов O^- с O_2 или при взаимодействии с переносом заряда между O_3 и атомами К. В УФ-спектре обнаружена система полос поглощения в области 5100—3700 Å, к-рая отнесена к поглощению аниона O_3^- . В спектре ИК-поглощения в области 800 cm^{-1} обнаружена полоса ν_3 . Достоверность этого отнесения подтверждена анализом ее изотопич. сдвига с O^{18} . Показано, что валентный угол в O_3^- равен $110 \pm 5^\circ$.

Г. Кузьянц

(геом.)
X. 1973. N 7

O_3^-

XI-3103

1972.

ЗД459. Колебательные и электронные спектры аниона O_3^- , изолированного в матрице из Ar. Jасох Mагилън E., Milligan Dolphus E. Vibrational and electronic spectra of the O_3^- anion isolated in an argon matrix. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 1, 148—167 (англ.)

(ν_i) По полосе антисимметричных валентных колебаний ν_3 в ИК-спектре ($400—2400\text{ см}^{-1}$) и системе полос $3700—5100\text{ Å}$ в электронном спектре поглощения ($1800—9750\text{ Å}$) доказано образование аниона O_3^- в матрице из Ar при 14°K . Для получения стабилизированных анионов использованы реакция O_2 с O^- , возникающими при взаимодействии фотоэлектронов с N_2O , и реакция с переносом заряда между атомами K и O_3 . Обсуждена природа

ф. 1973. № 3.

изученного электронного перехода и предположено существование низколежащего диссоциативного состояния. Интервал между полосами электронной системы (около 820 см^{-1}) соответствует колебательной частоте ν_1' . Частота полосы ν_3 составляет $789,3\text{—}815,0\text{ см}^{-1}$, несколько изменяясь в зависимости от щелочного металла, используемого как источник фотоэлектронов. Сделан вывод, что валентный угол у O_3^- в основном состоянии равен $110 \pm 5^\circ$, а связи O—O значительно менее прочны, нежели у молекулы O_3 . Библ. 47.

С. Ф. Б.

O_3^-

XI-3154

1942

O_4^-

68098h Spectrum and structure of the O_3^- and O_4^- anions isolated in an argon matrix. Jacox, M. E.; Milligan, D. E. (Nat. Bur. Stand., Washington, D.C.). *Chem. Phys. Lett.* 1972, 14(4), 518-21 (Eng). An absorption which appears near 800 cm^{-1} on reaction of O^- with O_2 in an Ar matrix has been assigned as ν_3 of O_3^- , with a valence angle of $110 \pm 5^\circ$, and an absorption near 1000 cm^{-1} can be assigned to *trans*- O_4^- .

$(Vi)^+$

(config)

C.A. 1942. 77. 10

O₃⁻

XI-3261

1972

2 Б216. Колебательные спектры озонида калия и строение аниона O₃⁻. Карелин А. И., Росоловский В. Я., Токарева С. А., Вольнов И. И. «Докл. АН СССР», 1972, 206, № 3, 641—644

Исследованы ИК-спектры поглощения (400—4000 см⁻¹) и спектры КР (200—1800 см⁻¹) озонида калия при комн. т-ре и при т-ре жидк. азота. Проведено отнесение основных частот озонид-иона: $\nu_1 = 1020$ см⁻¹, $\nu_2 = 621$ см⁻¹, $\nu_3 = 818$ см⁻¹. На основе эксперим. результатов, полученных в работе, и лит. данных для родственных соединений оценены структурные параметры озонид-иона ($r_{O-O} = 1,34$ А, $\angle OOO = 110^\circ$). Колебательные спектры O₃⁻ приближенно удовлетворяют правилам отбора для линейной молекулы, подобно спектрам нелинейных молекул NF₃, O₃, OF₂. Показано, что частоты озонид-иона удовлетворительно коррелируют с частотами молекул O₃ и OF₂. Частоты валентных колебаний, валентная силовая константа и длина связи O—O изменяются в последовательности O₃⁻, O₃ и O₂²⁻, O₂⁻, O₂, O₂⁺ сходным образом.

Автореферат

(Vi, зам)

X. 1973. №2.

O₃⁻

XI-3261

1972

(vi)

9648k Potassium ozonide vibrational spectra and structure of O₃⁻ ion. Karelin, A. I.; Rosolovskii, V. Ya.; Tokareva, S. A.; Vol'nov, I. I. (Inst. Obshch. Neorg. Khim. im. Kurnakova, Moscow, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1972, 206(3), 641-4 [Phys Chem] (Russ). Their (400-4000 cm⁻¹) and Raman (200-1800 cm⁻¹) spectra of polycryst. KO₃ were measured at 77°K and at room temp. The band at 818 and 1020 cm⁻¹ were assigned, resp. to the antisym. and sym. stretching vibrations of the O-O bonds in O₃⁻. The vibrational spectra are correlated with the structure of O₃⁻ and compared with the spectra of OF₂ and O₃.
V. Bekarek

C.A. 1973. 78. N2

$\text{NF}_3, \text{O}_3^+, \text{O}_3, \text{O}_3^-, \text{CF}_3$ (реакт. структ.;) 1972
расчет

McCain D.C., Palke W.E.

XI 2984

J. Chem. Phys., 1972, 56, N10, 4957-
- 4965 (англ.)

Calculation of hyperfine
coupling constants in inorganic
radicals.

РР72
Вестник, 1972, 21524

Учен. зап. кн. библиотеки
10. 6227 (Ф)

ВФ - 8160 - X

1973

2 Д425. Спектр резонансного комбинационного рассеяния и анализ колебаний иона озонида в соединениях

$\text{Me}+\text{O}_3^-$, изолированных в матрице твердого арг. Andrews Lester, Spiker Robert C., Jr. Resonance Raman spectrum and vibrational analysis of the ozonide ion in the argon matrix-isolated $\text{M}+\text{O}_3^-$ species. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 4, 1863—1871 (англ.)

При $T=16^\circ\text{K}$ исследованы спектры комб. рас. молекул MeO_3 ($\text{Me}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$), изолированных в матрице твердого Аг. Полученные образцы имели интенсивную оранжевую окраску, обусловленную полосами электронного поглощения молекул MeO_3 в синей и зеленой областях спектра. Для возбуждения комб. рас. использованы

ИЗМЕНИТЬ

X-3744

Ф. 1974 № 2

ЫС

(45)



линии 6471, 5682, 5309, 5145, 4965, 4880, 4765 и 4579 Å Кг⁺- и Аг⁺-лазеров. В этих условиях комб. рас. носило резонансный характер. Во всех исследованных системах наблюдалась группа линий комб. рас. в области 1010 см⁻¹, интерпретированная как тонкая структура колебания ν_1 в ионах О₃⁻. Расщепление линии ν_1 обусловлено смешанным изотопным составом кислорода. Частота колебаний ν_1 мало зависит от природы щелочного металла. Наблюдались также обертоны колебания ν_1 , вплоть до 4 ν_1 . Распределение относит. интенсивностей в серии обертонов зависит от положения возбуждающей частоты относительно полос электронного поглощения. Известные ранее значения частот ν_2 и ν_3 ионов О₃⁻, а также измеренное значение частоты ν_1 , величины изотопного сдвига при замещении ¹⁶О на ¹⁸О и константа ангармонизма для колебаний ν_1 позволили вычислить силовую постоянную связи О—О 4,18 мдин/Å, ее длину 1,38 Å, а также энергию ионизации ионов О₃⁻ 153 ккал/моль. Библ. 30. С. П.

O_3^-

XI-3637

1973

¹К7.
1 Б237. Резонансный спектр комбинационного рассеяния изолированного в матрице иона озонида в молекуле $M^+O_3^-$. Andrews Lester. Resonance Raman spectrum of the matrix isolated ozonide ion in the species $M^+O_3^-$. «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 14, 4487—4488 (англ.)

Измерены спектры КР продуктов соконденсации O_3^- и атомных щел. металлов Li, Na, K, Rb и Cs, изолированных в матрице Ar при $Ar/O_3=100$. В спектрах обнаружены интенсивные линии в области основных колебаний 1011—1018 cm^{-1} : Li — 1012, Na — 1011; K — 1004, Rb — 1026 и Cs — 1018. В работе использован изотонич. $^{18}O_3$. Соотв. данные подтверждают отнесение этих линий к колебаниям ν_1 иона O_3^- . В спектрах также найдена прогрессия обертонов ν_1 , что, вероятно, обусловлено эффектом резонансного КР.

Г. Кузьянец

спектр

комб.

рассеян.

ν_1 ;

ж. 1974 № 1

O₃⁻

1973

XI-3637

59621n Resonance Raman spectrum of the matrix isolated ozonide ion in the species metal(+) ozonide(-). Andrews, Lester (Dep. Chem., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1973, 95(14), 4487-8 (Eng). The products of matrix reactions of O₃ and alkali metal atoms on a 16°K Cu wedge were studied by using Ar and Kr plasma excitation. The Raman spectra are characterized by a fundamental at 1011-1018 cm⁻¹ below the exciting lines depending upon the alkali reagent and a regular progression of overtones using blue green excitation. Substitution of ¹⁸O₃ confirmed the assignment of these bands to ν_1 of O₃⁻. The fundamental and regular overtone progressions in ν_1 of O₃⁻ are probably due to the resonance Raman effect.

C.A. 1974, 79 N10

X1-3637

1973

O₃

12 Д555. Резонансные спектры комбинационного рассеяния иона озонида в молекулах $M+O_3^-$ изолированных в матрице. Andrews Lester. Resonance Raman spectrum of the matrix isolated ozonide ion in the species $M+O_3^-$. «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 14, 4487—4488 (англ.)

Получены спектры комб. рас. с лазерным возбуждением продуктов реакции, происходящей при одновременном осаждении атомов щелочного металла и смеси O_3 :

м.н

: Ag на подложку при $t \approx 16^\circ K$. Обнаруженные линии рассеяния в области $1004—1026 \text{ см}^{-1}$ относятся к колебанию ν_1 иона O_3^- , входящего в состав молекул $M+O_3^-$ ($M=Li, Na, K, Rb, Cs$). Для отдельных молекул зарегистрировано до трех обертонов. Аномальная интенсивность спектров объясняется резонансным характером рассеяния, т. к. возбуждающие линии (4579, 4880 и 5145 Å) попадают в область поглощения O_3^- (5100—3700 Å). Библ. 14. Ю. М. Л.

(+1) (X)
Ембл

Ф. 1973. № 1.2

CH_3 ; C_2H_3 ; CN ; HCN^- ; H_2CN ; XIII 2247/1973
 HCO ; CH_3CO ; CO_2^- ; NH_2 ; NH_3 ; NH_3^+ ; H_2NO ;
 NO_2 ; HBO ; BH_3 ; O_3^- (кв. мет.
равен)

Chuvpkin N. D., Zhidomirov G. M.,
Mol. Phys., 1973, 25, N5, 1233-5 (англ.)

10/90.

O₃⁻

XI-4406

1973

1; Empyri-
naprav.

18055v Vibrational spectra and structure of ozonide (O₃⁻) ion. Karelin, A. I.; Rosolovskii, V. Ya.; Tokareva, S. A.; Vol'nov, I. I. (Inst. Obshch. Neorg. Khim. im. Kurnakova, Moscow, USSR). *Tezisy Dokl. Vses. Soveshch. Khim. Neorg. Perekisykh Soedin.* 1973, 108-9 (Russ). Edited by Vol'nov, I. I.; Blum, A. Ya. Rzh. Politekh. Inst.: Riga, USSR. The ir absorption spectra (400-4000 cm⁻¹) and Raman spectra (200-1800 cm⁻¹) of KO₃ were recorded. The following values for the structure parameters were established $r_{O-O} = 1.34 \text{ \AA}$, O-O-O bond angle = 100°. The vibrational spectra of O₃⁻ were very similar to those of other linear mols. as NF₂, O₃, and OF₂.

W. S. Brud

C.A. 1975. 83 N2

1973

X1-3838

70321k Negative ion reactions with neutral ozone. Rutherford, J. A.; Turner, B. R.; Vroom, D. A. (Gulf Radiat. Technol. Div., Gulf Energy and Environ. Syst., San Diego, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1973, 58(12), 5267-71 (Eng). Charge transfer reactions between O^- , O_2^- , OH^- , and NO_2^- and O_3 were studied to obtain cross sections for formation of O_3^- . The charge transfer reaction O_3^- on NO_2 was also remeasured. The range of ion energies considered was 1-500 eV. Upper limits were obtained for the charge transfer cross section of F^- , Cl^- , and CO_3^- , with O_3 . The electron affinity of O_3 must be close to the accepted value of ~ 2 eV. The method used to produce a neutral beam of pure O_3 is discussed.

C.A.

1973

79 N12(+1) $\boxtimes$

O₃⁻

24 Б27. Исследование озонид-иона и родственных соединений методом МО ППДП. Sichel John M. CNDD-MO study of the ozonide ion and related species. «Can. J. Chem.», 1973, 51, № 13, 2124—2128 (англ.; рез. франц.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП исследовано электронное и геометрич. строение озонид-иона O₃⁻ и ряда родственных соединений (O₃, SO₂, SO₂⁻, OF₂⁺, OF₂). Расчеты выполнены как с параметризацией Поппа—Сегала (ППДП/2), так и с параметризацией Бойда—Уайтхеда (ППДП/БУ). В случае открытых оболочек использована процедура неограниченного однодетерминантного метода ССП. Во всех расчетах выполнена оптимизация длины связей и валентного угла (в предположении симметрии C_{2v}) с помощью процедуры итерационной кубич. интерполяции. Найдено, что набор занятых МО во всех случаях согласуется с правилами Уолша, хотя точный порядок орбитальных энергий зависит от метода расчета и (в случае открытых оболочек) от значения проекции спина. Так для O₃⁻ и для SO₂⁻ найдено, что основной является конфигурация симметрии ²B₁ в согласии с эксперим. данными ЭПР. Оба варианта расчета предсказывают, что равновесная длина связи (r_e) O—O в O₃⁻ больше, чем в O₃. Метод

Зн. и
использ.
строения

Х. 1973

№ 24

1973
Х1-35900

(75)

(41)
Cmby

IX

ППДП/БУ дает значение r_e в O_3 (1,258 Å) близкое к экспериментальному (1,278), из чего сделан вывод, что и в случае O_3^- рассчитанная величина является достоверной. Метод ППДП/2 дает заниженное значение для O_3 (1,167) и высказано предположение, что величина, найденная для O_3^- методом ППДП/2 (1,201), занижена, несмотря на хорошее согласие с эксперим. значением 1,19, полученным из данных рентгеновской дифракции на KO_3 в порошке. Поскольку оба метода предсказывают удлинение r_e в O_3^- по сравнению с O_3 на 0,04 Å, сделан вывод, что правильное значение $r_e(O_3^-) = 1,32$ Å. Анализ распределений электронной плотности также свидетельствует о том, что нет причин ожидать повышения связывания в O_3^- , причем изменение порядка π -связи между связанными атомами O от 0,702 в O_3 до 0,353 в O_3^- согласуется с данными ИК-спектров в матрицах. Аналогичные результаты имеют место для пар родственных молекул $SO_2-SO_2^-$ и $OF_2^+-OF_2$. Обсуждены результаты расчета валентных углов. Для всех молекул рассмотрены также несимм. структуры с разными длинами связей r_1 и r_2 и найдено, что во всех случаях минимум отвечает симм. геометрии C_{2v} , за исключением SO_2 , для к-рой имеется двойной минимум при $(r_1-r_2)=0,03$ Å с небольшим потенциальным барьером для симм. геометрии (0,03 эв). Отмечено, что с учетом приближенного характера расчета этот результат нельзя считать достоверным, и данные ИК-спектров в матрицах свидетельствуют, что

такая асимметрия может быть лишь незначительной. Рассчитанные величины сродства к электрону для O_3 и SO_2 , найденные как разности полных энергий нейтр. молекулы и иона для соотв. процесса (вертикального, адиабатич., порога фотоотрыва) плохо согласуются с экспериментом, но метод ППДП/БУ правильно предсказывает для O_3 величину сродства к электрону большую, чем для атома O. Рассчитанные значения силовых постоянных плохо согласуются с экспериментом, кроме постоянных вал. кол. SO_2 и SO_2^- для к-рых правильно предсказан как относит. порядок, так и абс. значения величин.

А. Багатурянц

N_4^+ , O_4^+ , O_4^- (св-ва нон. элементов) 1973
и.н. $\bar{x}$ 3362

Varney, R.N.; Pahl M.; Maerk T.D.

Acta Phys. Austral, 1973,
38 (3), 287-94 (Eng).

Properties of the ionic systems
tetraatomic nitrogen (+), tetraatomic
oxygen (+), and tetraatomic oxygen (-).

C.A. 1974.80 N18.100452u.

10



03-

X- 8019

1973

2 Д421. Реакции атомов щелочных металлов с озон-
ном, изолированных в матрице: ИК-спектры молекул
озонидов щелочных металлов. Spiker Robert C., Jr,
Andrews Lester. Matrix reactions of alkali metal
atoms with ozone: infrared spectra of the alkali metal
ozonide molecules. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 4,
1851—1862 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения продуктов реак-
ций, происходящих при одновременном осаждении озона
и атомов щелочных металлов в матрице из аргона и
азота при $t = 15^\circ \text{K}$. Зарегистрированные полосы по-

+ 1974 n 2

(+5) ☒(см. также $\text{Cs}^+ \text{O}_3^-$; III)

глощения отнесены к колебаниям $M+O_3^-$, $M_2+O_3^-$, MO_2 и других образований ($M=Li, Na, K, Rb, Cs$). Поглощение в области 800 и 600 см^{-1} относится к колебаниям ν_3 и ν_2 иона O_3^- , входящего в состав ионной пары $M+O_3^-$. Эксперименты с различными комбинациями изотопов кислорода показывают, что ионная пара имеет симметрию C_{2v} . Для $Cs+O_3^2$ обнаружены полосы 281 см^{-1} (^{16}O) и $267,6\text{ см}^{-1}$ (^{18}O); относящиеся к меж-ионному колебанию. Рассчитана величина валентного угла иона озонида: 111° для $Na+O_3^-$ и 105° для $Li+O_3^-$.
Библ. 27. Ю. М. Л.

O₃⁻

Izidomirov G. M.

1973

1352

"J. Magn. Reson"

1973, 11, N3, 367-72.

"Calculations of the anisotropic
hyperfine coupling constants in
free radicals."

O₃⁻

#4-8028
X1-4419

1974

11 Б206. Об электронном спектре иона озонида, O₃⁻. Giguère Paul A., Herman Kazimiera. Sur le spectre électronique de l'ion ozonide, O₃⁻. «Can. J. Chem.», 1974, 52, № 23, 3941—3943 (франц.; рез. англ.)

(*Di; Te*)

Получены спектры поглощения р-ра озонида калия в NH₃ в видимой и УФ-области (200—600 нм) при t-ре —65°, а также спектры КР р-ра. Из анализа тонкой структуры полос найдены полосы, относящиеся к переходу ${}^2A_2 \rightarrow {}^2B_1$ иона O₃⁻, оценен коэф. экстинкции в максимуме полосы поглощения. Частота колебания 820 см⁻¹ (ν_1) в возбужденном состоянии O₃⁻ намного ниже соотв-щей частоты колебания в основном состоянии (1010 см⁻¹), это говорит об удлинении связи O—O (согласно оценке — от 1,38 до ~1,48 Å). На полосы поглощения O₃⁻ накладывается ряд полос поглощения O₃, O₂⁻ и NO₂.

А. Бобров.

x 1975 n 11

1974

 O_3^-

X4-8028

X1-4419

see mp.
creatp

49485u Electronic spectra of the ozonide ion, O_3^- . Giguere, Paul A.; Herman, Kazimiera (Fac. Sci., Univ. Laval, Quebec, Que.). *Can. J. Chem.* 1974, 52(23), 3941-3 (Fr). KO_3 dissolved in liq. NH_3 absorbs fairly strongly in the uv from 300 nm, in addn. to the strong band in the violet-blue. Previous conflicting results were due to interference of other species, such as O_3 , O_2^- , and HO_2 , which also absorb in that region. The irregular spacing of the max. in the visible band points to some interference of a 2nd vibrational mode of the upper state.

C.A.1975. 82 N8

O_3^-

#4-8028

1974

XI-4419

Электр.
спектр.

5 Д532. Об электронном спектре озонид-иона O_3^- .
Giguère Paul A., Herman Kazimiera. Sur le
spectre électronique de l'ion ozonide, O_3^- . «Can. J.
Chem.», 1974, 52, № 23, 3941—3943 (франц.; рез. англ.)

Исследован спектр поглощения озонида калия в
растворе жидкого аммиака. В УФ-области, начиная с
300 нм, и в фиолетово-голубой области спектра наблю-
даются сильные полосы поглощения. Неправильное рас-
пределение колебательной структуры видимой полосы
свидетельствует о переналожении второй гармоники
верхнего состояния. Библ. 20. Т. Н. Т.

ф. 1975. N 5

CF_2 ; NO_2^- ; O_3^- ; N_3^- ; $(E, pacrim)$ 1974
 CO_2^- ; NO_2^+ ; N_2O XI 4220

Harcourt R.D., Sillitoe J.E.,
Austral. J. Chem., 1974, 27, N4, 691-711
(anal.)

Some wave functions for the
four-electron three-centre
bonding of four-and-eight-
electron systems.

Pre PUS, 1975, 10130

110 (4)

O_3^-

XI-4590

1974

comp. res.

/ 37051m EPR spectral parameters and structure of ozonide radicals. Mikheikin, I. D.; Zhidomirov, G. M.; Chuvylkin, N. D.; Kazanskii, V. B. (Inst. Org. Khim. im. Zelinskogo, Moscow, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1974, 15(5), 769-73 (Russ). SCF MO LCAO calcs. of the EPR parameters of O_3^- with various models and comparison with literature data indicate that the lattice environment in which the O_3^- is present must be known precisely and must be included in the calcs. Michael Dymicky

C.L. 1975, 22, 16

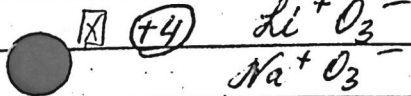
1975

O_3^-

5 Д452. Вибронные спектры иона O_3^- в соединениях $M+O_3^-$, изолированных в матрицах. Andrews Lester. Vibronic spectra of the ozonide ion in the matrix-isolated $M+O_3^-$ species. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 10, 4465—4469 (англ.)

спектры
поглощения

Исследованы спектры поглощения (340—640 нм) иона O_3^- в соединениях вида $M+O_3^-$, изолированных в инертных матрицах и образующихся в результате матричных реакций атомов щелочных металлов ($M=Li, Na, K, Cs$) с молекулами O_3 . По аналогии с ClO_2 , электронный переход, ответственный за видимое поглощение иона O_3^- интерпретирован как ${}^2B_1{}^2A_2$. В спек-



ф. 1976, N5

(спектры в матр) $K^+ O_3^-$
 $Cs^+ O_3^-$

трах Li- и Na-соединений обнаружено 14 хорошо разрешенных колебательных полос с $\Delta\nu \sim 8000-900 \text{ см}^{-1}$, которые образуют прогрессию, приписанную колебанию ν_1' . Сложная структура шести первых полос свидетельствует о наличии более слабой прогрессии по колебанию $\nu_2' = 300 \text{ см}^{-1}$. На основании сравнения спектров изотопзамещенных соединений локализовано положение начала электронной полосы (переход O—O): $17\,730 \text{ см}^{-1}$ для $\text{Li}+^{16}\text{O}_3^-$ и $\text{Li}+^{18}\text{O}_3^-$ в Кг. Определены колебательные константы в возбужденном состоянии. Приведены факты, свидетельствующие о наличии в исследованной спектральной области непрерывного диссоциационного поглощения. Библ. 12. В. С. И.

51003.8743
Ch, Ph, TC, Gph,
MGU

40892

O_3^- фотолизу

1975

3360

Cosby P.C., Bennett R.A., Peterson J.R.,
Moseley J.T.

Photodissociation and photodetachment of
molecular negative ions. II. Ions formed
in oxygen.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 4, 1612-1620

(см. O_2^- ; III)

(англ.)

1122

436 437

ВИНИТИ

50620.7282
Ch, Ph, TC, MGU

O_3^-

Раман спект

40892

(Vi)

1975

ХУ-9212

Bates J.B., Pigg J.C.
Resonance Raman and electronic
absorption spectra of O_3^- ions in
 γ -irradiated $KClO_3$ and $NaClO_3$.

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 10, 4227-4239

(англ.)

0391 пик

355 366

0383

ВИНИТИ

1975

O₃

18 Б213. Колебательные спектры иона O_3^- . Карелин А. И. В сб. «Неорган. перекисн. соединения», М., «Наука», 1975, 172—177

Проанализированы лит. данные о колебательных спектрах и строении озонидиона O_3^- . Показано, что колебательные частоты иона O_3^- в озониде калия и в матрице из инертного газа согласуются между собой. Частоты вал. кол. и валентная силовая константа связи $O-X$ (где $X=O$ или F) увеличиваются в последовательности OF_2 , O_3^- , O_3 с уменьшением числа электронов. Аналогичная закономерность известна для двухатомного ряда O_2^{2-} , O_2^- , O_2 , O_2^+ . Спектр O_3^- сходен со спектром изоэлектронного радикала OF_2 . Валентный угол и длина связи $O-O$, вычисленные различными авторами, находятся в согласии с параметрами $r(O-O)=1,34$ А и $\angle OOO=110^\circ$, оцененные впервые автором.

Резюме

(Лит. сил. нос.)

X 1975 N 18

O₃

1975

Chem. review.
(Ji)

84: 66970g Vibrational spectra of the ozonide ion. Karelin, A. I. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Necorg. Perekisnye Soedin., Dokl. Vses. Soveshch.* 1973 (Pub. 1975), 172-7 (Russ). Edited by Vol'nov, I. I. "Nauka": Moscow, USSR. A review on the ir, Raman and electronic spectra of the O₃ ion, their interpretation and their correlation with other (e.g., x-ray diffraction, force consts., EPR) data. 55 Refs.

T. Ordentlich

C.A. 1976. 84 W10

O₃⁻

1975

Krauss III.

нобелсен.
номинг.
мөхрүм

U.S. Aerosp. Res Lab
[Rep] 1975, ARL TR 75-0202
Vol 1, 206pp (Eng)

(cu NO₂; III)

50717.6684

Ch, Ph, TC

O₃

96615

1975

* 4-9451

Spoliti M., Nunziante Cesaro S.

Comment on the IR study of the magnesium-
discharged oxygen doped argon matrix
reaction. "J. Mol. Struct.", 1975, 26,
N 2, 442

(англ.)

04.11.1975

374 375

4 0 3

ВИНИТИ

70228.3432
Ch, Ph, MGU, TC
Gph

40892
03 (promedusa) 1976
Xy-17133

Cosby P.C., Ling J.H., Peterson J.
R., Moseley J.T. Photodissociation and
photodetachment of molecular negative ions.
III. Ions formed in $\text{CO}_2/\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ mixtures.
"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 12,
5267-5274 (англ.)

793 801 813

0822
ВИНИТИ

60202.6673

Ch, Ph, TC

96201

03 (См. 1976)

1976

3787

Da Silva E.C., Gualberto G.M., Vargas
H., Rettori C. ESR of the ozonide
(O_3^-) radical in γ -irradiated $AgClO_3$.
"Chem. Phys. Lett.", 1976, 37, N 1,
138-139

0552 (англ.)

526 527

ВИНИТИ

O₃⁻

Wight C.A., Ault B.S.,
Andrews L. ¹⁹⁷⁶

сущесств.
ионов

J. Chem. Phys., 1976,
65(4), 1244-9.

● /cell HCl₂⁻) III

1977

O₃⁻

Abdelnour Suheil F.,
Sabin John R.,

Fla. Sci, 1977, 40(1), 43-6

NOTES.
sp - yea,
kv. Mex.
растет

C.A. 1977. 24. N2

CU O₃; III

87: 190022a A study of the reaction $O_3^- + CO_2 \rightleftharpoons CO_3^- + O_2$ and its implication on the thermochemistry of CO_3 and O_3 and their negative ions. Dotan, I.; Davidson, J. A.; Streit, G. E.; Albritton, D. L.; Fehsenfeld, F. C. (Aeron. Lab., NOAA Environ. Res. Lab., Boulder, Colo.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(6), 2874-9 (Eng). The reaction $O_3^- + CO_2 \rightleftharpoons CO_3^- + O_2$ was examd. in the forward and reverse directions in a variable-temp. flowing afterglow from 200 to 600 K and in a flow-drift tube at mean relative kinetic energies from 0.04 to 1 eV. The forward direction is clearly established as the exothermic direction. Furthermore, collisional dissocn. of CO_3^- and O_3^- ions in the flow-drift tube at high E/N to form O^- shows that CO_3^- is the more stable ion. All of this implies that bond dissocn. energy $D(CO_2 + O^-) > D(O_2 + O^-)$. Kinetic-equil. studies at the higher temps. show that the reverse rate const. is $< 6 \times 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ below 600 K. When this is combined with the estd. entropy change of the reaction one obtains the quant. lower limit $D(CO_2 + O^-) - D(O_2 + O^-) \geq 0.58 \text{ eV}$. The reaction $OH^- + O_3 \rightarrow O_3^- + OH$ is found to be fast, thereby establishing lower limits for the electron affinity of O_3 and the O^- bond dissocn. energy of O_3^- . When taken with the above limit for the relative CO_3^- and O_3 bond dissocn. energy one obtains lower limits for the electron affinity of CO_3 and the O^- bond dissocn. energy of CO_3^- . The latter lower limit does not overlap an upper limit for $D(CO_2 + O^-)$ obtained from recent photodissockn. studies. The relation of this discrepancy to the electron affinity of O_3 is discussed.

O_3^-

CO_3^-

(Do)

(+1) 4

C.A., 1974, 84, 124

1974

 O_3^- (ξ_i)

7 Б1054. Долгоживущее возбужденное состояние иона O_3^- . Доказательство его существования методом индуцированной соударениями диссоциации. Wu R. L. C., Tiernan T. O., Lefshitz C. A long-lived excited state of O_3^- ; evidence from collision-induced dissociation. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 51, № 2, 211—214 (англ.)

На двойной масс-спектрометрич. установке при $T \approx 30^\circ$ измерены зависимости сечения σ процесса индуцированной соударениями диссоциации иона O_3^- : $O_3^- + X \rightarrow O^- + O_2 + X$ (1) ($X = He, Ar, CO_2$) от поступательной энергии E иона O_3^- (0,2—1,1 эв в координатной системе центра масс). Ионы O_3^- получали двумя способами: путем электронной бомбардировки смесей $O_3 + N_2O$ (по р-ции $O^- + O_3 \rightarrow O + O_3^-$ (2)) или смесей $O_3 + H_2O$ (по р-ции $OH^- + O_3 \rightarrow OH + O_3^-$ (3)) при давл. $\leq 0,1$ мм. Найденные зависимости σ от E различают-

2. 17, 1978

ся при различных способах получения O_3^- : энергетич. пороги процесса (1) равны 0,96 и 1,80 эв соотв. при получении O_3^- в смесях O_3 с N_2O и H_2O . Величина 1,80 эв соответствует известным значениям энергии диссоциации связи O_3 и сродства O_3 к электрону, равным соотв. 1,05 и 2,2 эв. Величина 0,96 эв приписана возбужденному состоянию O_3^- , возникающему в р-ции (2), с энергией возбуждения $0,84 \pm 0,2$ эв. Время жизни этого состояния несколько мксекунд, а константа скорости его столкновительной дезактивации $\leq 10^{-11}$ см³/молекула·сек. Обсуждается природа возбуждения — колебательное или электронное. Возможно также, что в р-ции (2) образуется циклич. изомер иона O_3^- , имеющего нециклич. структуру, к-рый возникает в р-ции (3).

В. Е. Скурат



1977

O₃⁻

Д 4 Д208. Долгоживущее возбужденное состояние O₃⁻.
 Доказательство существования, полученное при исследовании столкновительной диссоциации. Wu R. L. C., Tiernan T. O., Lifshitz C. A long-lived excited state of O₃⁻; evidence from collision-induced dissociation. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 51, № 2, 211—214 (англ.)

С помощью двойной масс-спектрометрич. установки исследована диссоциация отрицат. ионов озона на газовой мишени (He, Ar, CO₂). Ионы O₃⁻ получались перезарядкой по реакциям O⁻(O₃, O)O₃⁻ (I) или OH⁻(O₃, OH)O₃⁻ (II); исходные реагенты получались при облучении электронами соответственно смесей O₃+N₂O и O₃+H₂O. Измерено эффективное сечение диссоциации O₃⁻ как ф-ция энергии столкновения (до 11 эв в Ц-системе). Определены пороги диссоциации O₃⁻, оказавшиеся различными для двух способов получения O₃⁻ и равными, соответственно, $0,96 \pm 0,1$ и $1,80 \pm 0,1$ эв для реакций I и II, независимо от природы мишени. Сделано предположение о существова-

20; 7; 8

CP, N.Y. 1978

нии долгоживущего ($>10^{-6}$ сек) состояния изомерной
формы O_3^- с энергией возбуждения $0,84 \pm 0,2$ эв.

В. Ю. О.



O_3^-

1977

существование
изомеров
группы.

S7: 209045j A long-lived excited state of ozone(-); evidence from collision-induced dissociation. Wu, R. L. C.; Tiernan, T. O.; Lifshitz, C. (Dep. Chem., Wright State Univ., Dayton, Ohio). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 51(2), 211-14 (Eng). Translational energy thresholds were detd. for collision-induced dissoen. O_3^- formed by 2 alternative reactions. The different thresholds obsd. for these 2 processes, 0.96 eV and 1.80 eV resp., suggest the existence of a long-lived ($>\mu s$) excited state or isomeric form of O_3^- .

C. A. 1977, 84, N26

1977

номина
(сущ. нарицательн., существ.)
Wu R.L.C., Lifshitz and al...

O_3^-
(D, Ae)

Ja; Argonne Natl. Lab. [Rep]

ANL 1977, ANL-77-21.

Cond. High Temp. Sci. Open-

Cycle, Coal-Fired MHD system

~~227-29.~~

49-53

1978

O₃⁻

6 Д426. Фотодиссоциационная спектроскопия O₃⁻.
 Cosby P. C., Moseley J. T., Peterson J. R.,
 Ling J. H. Photodissociation spectroscopy of O₃⁻.
 «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 6, 2771—2778 (англ.)

фотодиссоциация Сечение фотодеструкции иона O₃⁻ в газовой фазе измерено в области 6400—5080 Å с помощью дрейфового масс-спектрометра и перестраиваемого лазера на красителе. В указанной области длин волн ионы O₃⁻ диссоциируют на O⁻+O₂. На кривой сечения фотодеструкции обнаружена структура, приписанная диссоциации с колебательных уровней возбужденного электронного состояния иона O₃⁻. Идентифицированы прогрессии в деформационном и симметричном валентном колебаниях возбужденного состояния иона O₃⁻. Наблюдались также переходы с возбужденных уровней тех же нормальных колебаний основного состояния иона O₃⁻. Полученные данные сопоставлены с результатами исследования спектров поглощения ионов O₃⁻ в конденсиро-

9-1979 NC

ванных средах. На основании теоретич. расчетов высказано мнение, что диссоциационным состоянием иона O_3^- , проявляющимся в исследованной области спектра, является состояние 1^2A_1 или 1^2A_2 . Приведены доказательства образования в реакции $O^- + 2O_2 \rightarrow O_3^- + O_2$ колебательно возбужденных ионов O_3^- . Оценена константа скорости релаксации возбужденных ионов O_3^- в O_2 , $K \sim 10^{-14} \text{ см}^3 \text{сек}^{-1}$. Библ. 45.

В. С. Иванов



O₃ -

1948

S9: 206856c Photodissociation spectroscopy of the ozonide ion. Cosby, P. C.; Moseley, J. T.; Peterson, J. R.; Ling, J. H. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(6), 2771-8 (Eng). The photodissocn. cross

Chemist

section of gas-phase O₃⁻ was measured using a tunable dye laser over a wavelength range of 6400-5080 Å. The cross section exhibits considerable structure which is consistent with dissocn. from vibrational levels of a quasibound excited electronic state. Anal. of the structure indicates progressions in 2 vibrational modes of the excited state. Photodissocn. spectra of ions prepd. in both excited and ground vibrational levels also yields 2 vibrational frequencies for the ground X²B₁ state and an apparent rate coeff. for vibrational relaxation in O₂. The mol. consts. detd. here for the 2 O₃⁻ electronic states are compared with those obtained from absorption spectra of the ion in other media. Identification of the dissocg. state is discussed.

C. A. 1948, 89 N24

O₃ -

10 Б1108. Фотодиссоциационная спектроскопия O₃⁻. (1978)
Cosby P. C., Moseley J. T., Peterson J. R.,
Ling J. H. Photodissociation spectroscopy of O₃⁻. «J.
Chem. Phys.», 1978, 69, № 6, 2771—2778 (англ.)

При помощи квадрупольного масс-спектрометра измерены сечения σ фоторазрушения ионов O₃⁻ под действием излучения перестраиваемого лазера на красителе в зависимости от длины волны λ в диапазоне 6400—5080 Å. Ионы O₃⁻ получали по р-ции O⁻ + 2O₂ → O₃⁻ +

фото-
диссоциация

+ O₂ (1) при дрейфе ионов O⁻ (генерировали в процессе диссоциативного электронного прилипания к молекулам O₂) в газ. O₂ при давл. 0,3—0,4 мм и т-ре 300° K. Длина области дрейфа до облучения 2,5—50,8 см, так что число термализующих столкновений O₃⁻ в газ. фазе можно было менять в широких пределах. Показано, что фоторазрушение O₃⁻ происходит преимущественно в процессе фотодиссоциации O₃⁻ + $h\nu$ → O⁻ + O₂, а не фотоотщепления электрона O₃⁻ + $h\nu$ → O₃ + e⁻. Зависимость σ от λ обнаруживает структуру в виде ряда широких максимумов, каждый из к-рых содержит три или большее число более узких компонент. На основании зависимостей σ от длины дрейфа при различных λ сделан вывод, что при энергиях фотонов $E \leq$

2. 1979, N 10

$\leq 2,15$ эв наблюдаемая структура в спектре фотодеструкции O_3^- обусловлена возбужденными колебательными уровнями основного электронного состояния $O_3^-(X^2B_1)$, а при более высоких значениях E структура связана с колебательными уровнями диссоциирующего квазисвязанного электронно-возбужденного состояния O_3^- . Идентифицированы прогрессии переходов, начинающихся в симм. вал. к деф. кол. модах возбужденного состояния, и переходов, начинающихся из этих мод в X^2B_1 -состоянии. Наблюдаемая структура σ может быть объяснена на основании двух наборов колебательных частот для этих состояний (cm^{-1}): для основного состояния $\omega_1'' = 790 \pm 50$ или 928 ± 50 ; $\omega_2'' = 419 \pm 20$ или 403 ± 20 ; для возбужденного состояния $\omega_1' = 855 \pm 20$ или 794 ± 20 ; $\omega_2' = 290 \pm 20$ или 282 ± 20 ; $T_0 = 2,146$ или $2,163$ эв. Диссоциирующее состояние O_3^- экспериментально не идентифицировано. Согласно известным из лит-ры расчетным данным, им может быть состояние 1^2A_1 или 1^2A_2 . Получена оценка энергии диссоциации иона $D[O_3^-(X^2B_1)] = 1,65 \pm 0,06$ эв. Эта величина сильно расходится с известной из лит-ры оценкой верхнего предела $D(O_3^-) \leq 1,32$ эв, полученной на основе сравнительных кинетич. исследований фотодиссоциации CO_3^- и O_3^- . Причины этого расхождения не ясны. Полученные данные показывают, что в р-ции (1) образуются колебательно-возбужденные ионы O_3^- , релаксация к-рых в газ. среде O_2 происходит с эффективной константой скорости 10^{-14} $cm^3/молекула \cdot сек.$

В. Е. Скурат

1978

O₃⁻

6 Д394. Ион-молекулярные реакции отрицательных ионов озона и их использование для термохимии O₃⁻. Lifshitz C., Wu R. L. C., Tiernan T. O., ~~Ter-~~williger D. T. Negative ion-molecule reactions of ozone and their implications on the thermochemistry of O₃⁻. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 1, 247—260 (англ.)

Двойной масс-спектрометр с соосными пучками использован для определения констант скорости реакций отрицат. ионов с участием озона. Изучены реакции перезарядки типа $M^- + O_3 = O_3^- + M$ (где $M = O, OH, F, Cl, Br, J, S, SH, Cl_2, C_2H, NO_2$ и CO_3) и реакции передачи частиц типа $MO^- + O_2 = O_3^- + M$ (где $MO = O_2, NO_2, NO_3, CO_3$). Определены пороги эндотермич. процессов. Определен нижний предел сродства к электрону озона 2,26 (+0,04, -0,06) эв и энергия диссоциации $D(O^- - O_2) = 1,8$ эв из процессов диссоциации $O_3^- + M = O^- + O_2 + M$.

Г. К.

⊗

9, 1978, № 6

O_3^-

1979

Corderman R. P. et al

Annu. Rev. Phys. Chem.

Vol. 30. Palo Alto, Calif.,
1979, 347-78

фотоэлектр.
спектр

$Cu OH^- - \text{III}$



$Cu PM_2^- \text{ III}$

O_3^-

Commerce 8744

1979

Smith G.P., Lee L.C.

gomo-
grecoy.

J. Chem. Phys., 1979,
71(5), 2323-24.

O_3^-

Detrick J., et al.

1980

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, Quantum, Chem,

(7). Symp, N 14, 262.

расч.
потенц.
поверх.
счл. поск.

● (счл. N_2O^+ ; III)

D_3^-

1980

Moadges R. V. et al

exp.
uonon

J. Chem. Phys. 1980,
72(5), 2998-3000

$Eu O^- ; \overline{III}$

1980



ракет
мод. сверх-
мощности
проект.

С.А. 1980.
93 N 18

(+3)

□

93: 174164s Ab initio calculation of hyperfine splitting constants of molecules. Ohta, K.; Nakatsuji, H.; Hirao, K.; Yonezawa, T. (Fac. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(4), 1770-6 (Eng). Hyperfine splitting consts. of mols., Me, Et, vinyl, allyl, cyclopropyl, formyl, O_3^- , NH_2 , NO_2 , and NF_2 radicals were calcd. by the pseudo-orbital (PO) theory, the unrestricted HF (UHF), projected UHF (PUHF) and single excitation (SE) CI theories. The PO theory is based on the symmetry-adapted-cluster (SAC) expansion proposed previously (H. Nakatsuji 1977,78). Several contractions of the Gaussian basis sets of double-zeta accuracy were examd. The UHF results were consistently too large to compare with expts. and the PUHF results were too small. For the mols. studied, the PO theory and SECI theory gave relatively close results. They were in fair agreement with expts. The first-order spin-polarization self-consistency effect, which is important for atoms, is relatively small for the mols. studied. The result shows an importance of eliminating orbital-transformation dependence from conventional first-order perturbation calcs.

O_3^-

оттиск 11401

1981.

Campelo L.C., et al.

Раман спект

~~в~~ в $Cd(ClO_3)_2$

J. Raman Spectrosc.,
1981, 10, 33-35.

O_3^-

12 226

1981

1 Д652. Исследование фотодиссоциации ионов O_3^- в поле лазерного излучения с помощью тройного квадрупольного масс-спектрометра. Laser photodissociation of O_3^- by triple quadrupole mass spectrometry. Hiller J. F., Vestal M. L. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6096—6105 (англ.)

М.П., До

С помощью системы из трех последовательных квадрупольных масс-фильтров получены спектральные зависимости сечений фотодиссоциации газообразных ионов O_3^- с образованием осколков O^- или O_2^- . Первый масс-фильтр применен в источнике ионов с электронным ударом для генерации O_3^- , второй, являясь камерой фотон-ионных столкновений, одновременно служит собирающей линзой для заряженных продуктов фотодиссоциации O_3^- независимо от их энергии и направления движения, третий предназначен для счета конкретных осколков (O^- или O_2^-). В качестве источника фотонов применен лазер на красителе, перестраиваемый в области 380—650 нм. Установлено, что в

ср. 1982, 18, 41

исследованном спектральном диапазоне лежат переходы ${}^2B_1 \rightarrow {}^2A_2$ и ${}^2B_1 \rightarrow {}^2A_1$. По спектральным зависимостям сечений фотодиссоциации определены молекулярные постоянные для состояний, участвующих в переходах ($T_\infty, \nu_1', \nu_2', \nu''_1, \nu_2''$), а также величины энергии диссоциации (в эВ): $D(O-O_2^-) \leq 2,41$; $D(O_2-O^-) \leq 1,388$ и $D(O_2-O) \leq 0,747$. Полученные результаты хорошо согласуются с литературными данными. Библи. 33. М. Т.

O_3^-

Оттиск 12226

1981

1 Б1637. Изучение лазерной фотодиссоциации ионов O_3^- методом тройной квадрупольной масс-спектрометрии. Hiller J. F., Vestal M. L. Laser photodissociation of O_3^- by triple quadrupole mass spectrometry. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6096—6105 (англ.)

На установке, состоящей из трех последовательных квадрупольных масс-фильтров, измерены абс. сечения процессов $O_3^- + h\nu \rightarrow O^- + O_2$ и $\rightarrow O_2^- + O$ в зависимости от длины волны фотолизующего света в области 380—650 нм, к-рую изменяли ступеньками величиной 0,2 нм или меньше. Ионы O_3^- получали из O_2 при давл. 0,2 Торр методом хим. ионизации по р-циям: $O_2 + e \rightarrow O^- + O + O$ (диссоциативное прилипание электрона) и $O^- + 2O_2 \rightarrow O_3^- + O_2$. Ток ионов O_3^- составлял $\sim 10^{-11}$ А. В кач-ве источника света использовали перестраиваемый импульсный лазер на красителе. На основании зависимостей сечений процессов от длины волны сделан вывод о фотодиссоциации O_3^- из двух возбужденных состояний — 2A_2 и 2A_1 . По этим зависимостям опре-

М.П., До

☒

(+1)

Х. 1982, 19АБ, №1

$O_2 - O$

(До)

делены пороговые энергии процессов и произведено отождествление колебат. уровней. Для перехода ${}^2A_2 \leftarrow \leftarrow {}^2B_1$ $T_{00} = 2,046 \pm 0,002$ эВ, $\nu_1' = 815 \pm 10$ см $^{-1}$, $\nu_2' = 275 \pm$ см $^{-1}$, $\nu_1'' = 975 \pm 10$ см $^{-1}$, $\nu_2'' = 590 \pm 10$ см $^{-1}$; для перехода ${}^2A_1 \leftarrow {}^2B_1$ $T_{00} = 2,655$ эВ, $\nu_1' = 760 \pm 20$ см $^{-1}$, $\nu_2' = 190 \pm 20$ см $^{-1}$. Пороговая энергия образования O_2^- из основного состояния O_3^- найдена равной $2,41 \pm 0,01$ эВ. В сочетании с др. термохим. данными это позволяет найти след. оценки энергий диссоциации: $D(O_2-O^-) \leq 1,388 \pm 0,013$ эВ, $D(O_2-O) \leq 0,747 \pm 0,013$ эВ. Последняя величина расходится со значением $1,05 \pm 0,02$ эВ, определенным калориметрич. методом, но согласуется с результатами спектроскопич. исследований положит. и отриц. ионов озона.

В. Е. Скурат



O₃⁻

Оттиск 14450 1982

23 Б186. Ультрафиолетовый спектр и распад ион-
радикала озонида O₃⁻ в сильно щелочном растворе.
Sehested K., ~~Hotzman~~ J., Bjergbakke E.,
Hart E. J. Ultraviolet spectrum and decay of the ozo-

nide ion radical, O₃⁻, in strong alkaline solution. «J.
Phys. Chem.», 1982, 86, № 11, 2066—2069 (англ.)

УФ спектр

Измерены УФ-спектры ионов O₃⁻, образующихся при
импульсном радиолизе в ячейке высокого давления N₂O.
(40 атм) в равновесии с сильно щел. р-ром (pH—
13—14), содержащим кислород. После 10 мкс после
облучающего импульса наблюдается поглощение с мак-
симумом ~430 нм, минимумом ~280 нм и увеличива-
ющееся непрерывно до 220 нм, характерное для O₃⁻.
После 30 мкс после импульса в спектре наблюдается толь-
ко полоса с максимумом 240 нм, отнесенная к иону
O₂⁻. Время жизни этой полосы, увеличивающееся с
повышением конц-ии NaOH оценено в несколько секунд.

X. 1982, 19, № 23

Отмечено, что выход O_2^- чуть меньше половины первоначально образующегося O_3^- и примерно такой же, как и в насыщ. кислородом р-рах. Предложен след. механизм распада O_3^- : $O_3^- + O^- \rightarrow [O_4^{2-}] \rightarrow 2O_2^-$ (1) и $O_2^- + O^- + H_2O \rightarrow O_2 + 2OH^-$ (2). Показано, что р-ции $O_3^- + O_3^- \rightarrow$ продукт и $O_3^- + O_2^- \rightarrow$ продукт не играют роли в используемых условиях импульсного радиолиза. Проведен модельный кинетич. расчет процессов, происходящих в ячейке высокого давления и в насыщ. O_2 щел. р-рах, результаты к-рого хорошо согласуются с эксперим. данными. Рассчитаны константы скорости р-ций, связанных с распадом иона O_3^- : $k_1 = (7,0 \pm 1,0) \times 10^8 \text{ дм}^3 \text{мол}^{-1} \text{с}^{-1}$ и $k_2 = (6,0 \pm 1,0) \times 10^8 \text{ дм}^3 \text{мол}^{-1} \text{с}^{-1}$.
С. Б. Осин



O₃⁻

Оттиск 14450 1982

12 Д639. УФ-спектр и распад ион-радикала озонида, O₃⁻, в сильном щелочном растворе. Ultraviolet spectrum and decay of the ozonide ion radical, O₃⁻, in strong alkaline solution. Sehested K., Holcman J., Bjergbakke F., Hart Edwin J. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 11, 2066—2069 (англ.)

УФ-спектр
и распад

Методом импульсного радиолиза исследован процесс образования и распада ион-радикалов озонида, O₃⁻, в сильных щелочных растворах. Для получения ион-радикалов озонида использованы закись азота при давл. 4 МПа и кислород при давл. 0,1 МПа. Измерен УФ-спектр ион-радикалов O₃⁻ и идентифицированы продукты распада. Обсужден механизм и приведена кинетич. схема распада. Оценены константы скорости отдельных реакций. Библ. 19. Е. Н. Викторова

ар. 1982, 18, N 12

03⁻

1982.

Ярков А. В.

21

Авторизов. диссертация
на соискание ученой
степени К. Х. Н. М.: МГУ,

1982.

O₃⁻

1987

| 196: 75479d Laser photodetachment of ozone(1-). Wang, L. J.; Woo, S. B.; Helmy, E. M. (Dep. Phys., Univ. Delaware, Newark, DE 19716 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1987, 35(2), 759-63 (Eng). Spectroscopic laser photodetachment of O₃⁻ was accomplished in a drift tube with mass and mobility identification in the photon energy range from 2.0 to 4.7 eV. The initial ionic state is in the electronic and vibrational ground state. The photodetachment cross section of O₃⁻ increases with the photon energy at a rate of $\sim 1.25 \times 10^{-18}$ cm²-eV⁻¹, with the threshold at 2.082 ± 0.040 eV. The bond length and the bond angle of O₃⁻ were detd. through Franck-Condon factor anal. as $r = 1.3415 \pm 0.0300$ Å and $\theta = 112.6 \pm 2.0^\circ$.

2e, 4,
спектр фото-
ионизации
электронов

С.А. 1987, 106, N 10

O₃⁻

1987

8 Л307. Лазерное фотоотщепление электрона O₃⁻.
Laser photodetachment of O₃⁻. Wang L. J., Woo S. B.,
Helmy E. M. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1987, 35,
№ 2, 759—763 (англ.)

Получена спектральная зависимость сечения фотоотщепления электрона в реакции $O_3^- + h\nu \rightarrow O_3 + e$. Измерения проведены в молекулярном потоке с сортировкой ионов O₃⁻ электрич. полем. Установлено, что сечение фотоотщепления имеет порог, отвечающий энергии сродства к электрону для O₃ $2,082 \pm 0,040$ эВ. В области за порогом сечение растет с увеличением энергии со скоростью $1,25 \cdot 10^{-18}$ см/эВ (линейный рост модулирован ступенями 0,136 эВ, отвечающими валентным колебаниям O₃). Определен угол $\theta = 112,6 \pm 2,0$ и длина связи $r = 1,34 \pm 0,03$ А в ионе O₃⁻. Библ. 20. И. Н. А.

И. Н.

фр. 1987, 18, № 8

O₃⁻

(OM-30940)

1988

Dines T. J.,

Spectrochim. acta A

1988, 44, N 11, 1087-
-1092.

СКР, структура
возб.
состояния.

O_3

om. 30490

1988

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 343.



$O_3^-(O_2)\pi$

(DM. 30.990)

1988

Нираока К.,

стойбиль-
ность

Chem. Phys. 1988, 125,
N 2-3, 439-444.

O_3^-

1989

Basch H.

un

Chem. Phys. Lett., 1989,
157, n 1-2, 129-34



(Cur. O_3) III).

O₃⁻

(OM 33760)

1990

Hacaloglu J, Suter S.,
et al.

чрезмер. J. Phys. Chem. 1990,
6 94, NS, 1759-1764.
неадекватно

Chemical Ionization
Discharge ● of N₂O for

Matrix Infrared Spectro-
scopic Study of Isolated
Anions.

O₃⁻

Jacox M. E.,
Thompson W. E.

1989

UK-спектры

High Temp. Sci. 1988-1989.
28, spec. vol. c. 225-234.

(cur. ● CO₂⁻; III)

O₃ - [119125] 1990
Peterson K.A., Mayhew R.C.,
Woods R.C.,

U.N. J. Chem. Phys. 1990, 93,
N7, C. 5020 - 5028.

P.N.P. N 11, 1991

1991

O₃⁻ Guo Y., Whitehead M.A.,

Li.N. J. Mol. Struct. Theochem.
1991. 231, C. 307-319.

(cur. ● ClO₄⁻; III)

O_3^-

1992

116: 139004m Time-resolved Raman observation of the aqueous ozonide ion (O_3^-). Su, Yali; Tripathi, G. N. R. (Radiat. Lab., Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN 46556 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 188/5-6, 388-91 (Eng.). A Raman study of the $O_3^- + O_2 \rightarrow O_3$ reaction in aq. soln. is reported. The reaction half-period was measured as ~ 200 ns in oxygen satd. soln. at room temp. Spectroscopic evidence for the O_3^- -solvent coupled vibrations has been found. The harmonic frequency (ω_e) of the O_3^- sym. stretch in aq. soln., 1058 cm^{-1} , is $30\text{--}40\text{ cm}^{-1}$ higher, and the anharmonicity const. ($\omega_e x_e$), $9 \pm 2\text{ cm}^{-1}$, about twice as large as compared to the O_3^- inbedded in cryat. matrixes or bonded to a counter ion. The $O_3^- \rightarrow 2O + O^-$ disocn. energy is drastically lowered on hydration.

(ω_e , $\omega_e x_e$)

C.A. 1992, 116, N 14

O₃⁻

1993

/ 120: 117271b On the theoretical determination of the electron affinity of ozone. Gonzalez-Luque, Remedios; Merchan, Manuela; Borowski, Piotr; Roos, Bjoern O. (Dep. Quim. Fis., Univ. Valencia, Burjassot, Spain E-46100). *Theor. Chim. Acta* 1993, 86(6), 467-76 (Eng). Multiconfigurational, electron-correlation methods were analyzed in order to calc. theor. the electron affinity (EA) of ozone. The near-degeneracy correlation effects, which are so important in O₃ and Or, were described by using CAS-SCF wave functions. Remaining dynamic correlation effects were calc. by using second-order perturbation theory (the CASPT2 method). The best calc. adiabatic value (including zero-point energy corrections), 2.19 eV, is about 0.09 eV larger than the exptl. value. Comparative studies done by using size-consistent, coupled-pair-functional approaches (CPF and ACPF) were also done. The harmonic frequencies of Or were detd. to be: $\omega_1 = 992$, $\omega_2 = 572$, and $\omega_3 = 879$ cm⁻¹, which gave a zero-point energy of 0.151 eV.

$\omega_2 = 992, 572$
 879 cm^{-1}

meop. pacrim

(H) Δ

O₃(Ae)

meop. pacrim

C.A. 1994, 120, N10

03-

1993

HELLEKUL
 ZIKMANN
 COCHRELL
 Te

119: 169367m The low lying electronic states of ozonide (O_3^-). Koch, Wolfram; Frenking, Gernot; Steffen, G.; Reinen, D.; Jansen, M.; Assenmacher, W. (Inst. Org. Chem., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Germany). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(2), 1271-7 (Eng). The energies of the three lowest lying excited states of the ozonide anion (1^2B_2 , 1^2A_1 , 1^2A_2) at the optimized geometry of the X^2B_1 ground state are theor. predicted at the MRCI-SD level of theory using large at. natural basis sets. The calcd. vertical excitation energy $T_v = 2.85$ eV for the $1^2A_2 \leftarrow X^2B_1$ transition, which has a large transition moment, is in good agreement with the exptl. results for the isolated O_3^- anion in host matrixes and soln. between 2.69-2.81 eV. The state symmetry forbidden transition $1^2B_2 \leftarrow X^2B_1$ is calcd. with $T_v = 2.26$ eV. The excitation energy for the $1^2A_1 \leftarrow X^2B_1$ transition is theor. predicted with $T_v = 2.28$ eV and a very low transition moment. The theor. results are also discussed in comparison with recently obsd. low lying absorption bands of O_3^- .

C.A. 1993, 119, N 16

O₃⁻

1993

Zakharov I. I.,

Kolbasina O. I. et al.

сверхт., Zh. Strukt. Khim.
свободн., 1993, 34 (2), 28-32.
теор. расчёт

( O₃ ; III)

O₃⁻

1994

121: 118143u Study of low-lying electronic states of ozone anion photoelectron spectroscopy of O₃⁻. Arnold, Don W. Cangshan; Kim, Eun H.; Neumark, Daniel M. (Department of Chemistry, University of California, Berkeley, CA 94720 USA). Chem. Phys. 1994, 101(2), 912-22 (Eng). The low-lying electronic states of ozone are studied using anion photoelectron spectroscopy of O₃⁻. The spectra show photodetachment transitions from the O₃⁻ X ¹A₁ ground state and to the five lowest lying electronic states of the ozone mol., namely the ³A₂, ³B₂, ¹A₂, ³B₁, and ¹B₁ states. The geometry of the ozonide anion detd. from a Franck-Condon analysis of the O₃⁻ X ¹A₁ ground state spectrum agrees reasonably well with previous work. The excited state spectra are dominated by vibrational progressions which, for some states, extend well above the dissociation asymptote without noticeable lifetime broadening. Preliminary assignments are based upon photoelectron angular distributions and comparison with ab initio calculations. None of the excited states obsd. lies below the ground state dissociation limit of O₂ + O, suggested by previous exptl. and theor. results.

НУ ХИМИЯ
СО СЛОЖИТЕЛЬНО
ГО МОЛЕКУЛЯРНОГО
СЕРИИ

C.A. 1994, 121, N10

03-

1995

↑ 5 Б134. Озонидный анион. Теоретическое исследование.
The ozonide anion: A theoretical study / Borowski Piotr,
Roos Björn O., Racine Stephen C., Lee Timothy J., Carter
Stuart // J. Chem. Phys. — 1995. — 103, № 1. — С.
266—273. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве с учетом электронной корреляции во втором порядке теории возмущений и методом КВ исследовано электронное строение O_3^- (I) и комплекса $Li^+O_3^-$. Длина связи и валентный угол I оценены в 1,361 Å и $115,4^\circ$, колебательные частоты — 989, 556 и 870 см^{-1} , что очень хорошо согласуется с эксперим. данными. Обсуждено влияние катиона на колебательные частоты. Показано, что матрицы (азот, аргон, неон) мало влияют на ИК-спектр I. Библ. 40. Н. Л.

X. 1996, N5

05-38174

1995

O₃-

123: 68936y The ozonide anion: a theoretical study. Borowski, Piotr; Roos, Bjoern O.; Racine, Stephen C.; Lee, Timothy J.; Carter, Stuart (Chem. Cent., Theoretical Chem., S-221 00 Lund, Swed.). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(1), 266-73 (Eng). Complete active space SCF (CASSCF) and CASSCF second-order perturbation theory (CASPT2) methods have been used for the geometry optimization and calcn. of harmonic and fundamental frequencies of the ozonide ion (O_3^-) and the ozonide lithium complex ($Li^+O_3^-$). For O_3^- harmonic frequencies have also been obtained using the coupled-cluster method, CCSD(T). IR intensities are computed from dipole moment derivs. at the CASSCF level. The predicted equil. geometry for O_3^- is $R_{OO} = 1.361 \text{ \AA}$ and $\angle_{OOO} = 115.4^\circ$, and the fundamental frequencies are $\nu_1 = 989 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2 = 556 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_3 = 870 \text{ cm}^{-1}$ [exptl. values are $R_{OO} = 1.36 \pm 0.02 \text{ \AA}$, $\angle_{OOO} = 111.8 \pm 2.0^\circ$, $\nu_1 = 975(50) \text{ cm}^{-1}$, $\nu_2 = 550(50) \text{ cm}^{-1}$, $\nu_3 = 880(50) \text{ cm}^{-1}$]. Corresponding data for the lithium ozonide complex have also been obtained. The presented data contradict the previous interpretation of the IR and Raman spectrum obtained after codeposition of ozone and alkali atoms in N_2 , argon, or neon matrixes. The presence of the lithium cation raises the asym. stretch frequency to about 940 cm^{-1} , which is contradictory to assumptions made in the assignments of the matrix spectra. Calcns. made in a dielec. medium strongly suggest that the effect of the matrix on the IR spectrum is small for O_3^- itself. The dissocn. and atomization energies of O_3^- are found to be in agreement with expt.

(v₁, v₂, v₃)

C.A. 1995, 123, N6

0m.38174

1995

F: O3-

P: 3

5B134. Озонидный анион. Теоретическое исследование. The ozonide anion: A theoretical study / Borowski Piotr, Roos Bjorn O., Racine Stephen C., Lee Timothy J., Carter Stuart // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 1. С. 266-273. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве с учетом электронной корреляции во втором порядке теории возмущений и методом КВ исследовано электронное строение $O\{-\}[3]$ (I) и комплекса $Li\{+\}O\{-\}[3]$. Длина связи и валентный угол I оценены в 1,361 Å и $115,4^\circ$, колебательные частоты - 989, 556 и 870 см^{-1} , что очень хорошо согласуется с эксперим. данными. Обсуждено влияние катиона на колебательные частоты. Показано, что матрицы (азот, аргон, неон) мало влияют на ИК-спектр I. Библ. 40.

P. 44. X. IV 5, 1996

O₃⁻

[Om. 38 248]

1995

Tsunedo T., Nakano H.,
et al.,

J. Chem. Phys., 1995,
103 (15), 6520,....

Study of low  - lying electro-

RIC states of ozone by
multi-reference Møller-Plesset
perturbation method.

O₃⁻

1996

125: 287535m Matrix isolation study of the interaction of excited neon atoms with O₃. Infrared spectrum of O₃⁻ and evidence for the stabilization of O₂...O₄⁺. Lugez, Catherine L.; Thompson, Warren E.; Jacox, Marilyn E. (Molecular Physics Div., Natl. Inst. Stds. Technology, Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(6), 2153-2160 (Eng). When a Ne:O₃ sample is codeposited at -5 K with Ne atoms that were excited in a microwave discharge, the most prominent IR absorptions of the resulting solid are contributed by trans- and cyclo-O₄⁺ and by O₃⁻. The failure to detect IR absorptions of O₃⁺ is consistent with the initial formation of that species in ≥ 1 dissociative excited states. The ν_3 absorption of O₃⁻ appears at 796.3 cm⁻¹, close to its position in earlier Ar-matrix expts. in which photoionization of an alkali metal atom provided the electron source and in which diffusion of the atom would result in the stabilization of appreciable M⁺O₃⁻. The identification of O₃⁻ isolated in solid Ne is supported by observations of O₃⁻ generated from isotopically substituted Ne:O₃:N₂O samples, also codeposited with excited Ne atoms. An upper bound of 810 cm⁻¹ is estd. for

the gas-phase band center of ν_3 of O₃⁻. IR absorptions which grow on mild warmup of the sample are tentatively assigned to an O₂...O₄⁺ complex.

C.A. 1996, 125, N22.

UK, CREAM
MAMPUSE