

H₂⁺



1968

Patch R. W.

J. Chem. Phys., 49, 2, 961

стат.
суммы

Статистические суммы
основных элементар-
ных состояний H_2^+
и H_2^+



(Calc. H_2^+) II

1974

 H^+
2Отчет по научно - иссл.
работе ИВТАН, серия N8

т. 9

ф.

"Термодинамические св. в а
зота водорода и их соедине-
ний"

H_2^+

ammuck 3176

1974

Schneider J.

1000 - 4200°K

Z. Phys. Chem

1000 - 5900°K

1974, 255, N5, 986-96





1976

12 И70. Колебательно-вращательные уровни энергии и термодинамические функции H_2^+ . Иорш В. С., Юнгман В. С. «Ж. физ. химии», 1976, 50, № 8, 1932—1935

С использованием квантовой механич. потенц. ф-ции основного электронного состояния H_2^+ численным интегрированием ур-ния Шрёдингера рассчитаны все колебательно-вращательные уровни. На основе полученных данных методом непосредственного суммирования вычислена таблица термодинамич. ф-ций H_2^+ (C_p° , Φ_T° , S_T° и $H_T^\circ - H_0^\circ$) в состоянии идеального газа в интервале 100—20 000° K.

Ф 1976 N12

(сеч. H_2^+ ; $\overline{m}$)



1976

1 Б730. Колебательно-вращательные уровни энергии и термодинамические функции H_2^+ . Иорриш В. С., Юнгман В. С. «Ж. физ. химии», 1976, 50, № 8, 1932—1935

С использованием квантово-мех. потенциальной ф-ции основного электронного состояния H_2^+ , численным интегрированием ур-ния Шредингера рассчитаны все колебательно-вращательные уровни. На основе полученных данных методом непосредственного суммирования вычислена таблица термодинамич. ф-ций H_2^+ (C_p^0 , Φ_T , S_T^0 и $H_T^0 - H_0^0$) в состоянии идеального газа в интервале т-р 100—20 000 К.

Автореферат

т. 9. 97.

(+1) м.п.



22 1977 N 1

H_2^+ (2)

1978
Гурвич Л. В. и др.

т. оп. Термодинамич. св-ва
имд. в-в, 3^е изд. т. 1.
стр. 33.

И., Наука, 1978.

H_2^+

1980

8 Б88. Представление реальных межатомных потенциалов в виде дробно-рациональных функций. Иорш В. С., Щербак Н. Б. «Ж. физ. химии», 1980, 54, № 1, 229—231

Показана высокая точность представления двухточечным Паде-аппроксимантом (ПА) потенциальной ф-ции молек. иона H_2^+ . ПА (8,8) с 9 независимыми коэф. аппроксимирует адиабатич. потенциал в диапазоне $0,15 R_e < R < 10 R_e$ с погрешностью 1 см^{-1} . Точность представления колебательных уровней энергии $0,3 \text{ см}^{-1}$, вращательной постоянной $B_v = 0,01 \text{ см}^{-1}$. Автореферат

Х. 1980. № 3

H_2^+

1980

4 Д210. Представление реальных межатомных потенциалов в виде дробно-рациональных функций.
Иорис В. С., Щербак Н. Б. «Ж. физ. химии», 1980, 54, № 1, 229—231

Продemonстрирована высокая точность представления двухточечным паде-аппроксимантом потенц. ф-ции молекулярного иона H_2^+ , полученной квантовомеханич. расчетом.

Резюме

ф. 1980 № 4

H_2^+

Omura 12154

1980

' 94: 72473v Direct calculation of thermodynamic functions of diatomic ideal gases via interatomic potential. Iorish, V. S.; Shcherbak, N. B. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1980, 18(6), 1322-4 (Russ). The path integration approach proposed by V.S. Iorish et al. (1976) was used to develop a calcn. method for the thermodyn. functions of diat. gaseous mols. at high temps. It was used to calc. the free energy heat capacity, and entropy of H_2^+ .

m.g.op.

C.A. 1981.94,N10

1980



92: 116819c Representation of real interatomic potentials as fractional-rational functions. Iorish, V. S.; Sheherbak, N. B. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1980, 54(1), 229-31 (Russ). The potential function of H_2^+ obtained by quantum mech. calcs. is represented to a high degree of accuracy by Pade approximants.

C. A. 1980. 92 n 14

H_2^+

(cur. y Uopema)

1980

LiF

' 95: 50545p Computation of the thermodynamic functions of diatomic ideal gases by continual integration. Iorish, V. S.; Shcherbak, N. B. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). Deposited Doc. 1980, VINITI 1127-80, 19 pp. (Russ). Avail. VINITI. A method was developed for the calcn. of thermodyn.

LiCl

functions of diat. mols. by using a representation of potential curves in form of rational functions and Pade approximants. The method was tested on H_2^+ , LiF, LiCl, and CsI over wide temp. ranges, with satisfactory results.

CsI

m. gull. pykny, (73) (60 ii ref.)

⊗



C.A. 1981, 95, NB.

H₂⁺(g) JANAF

1985

T.P. Therm. 1985, стр 1261

февр 1974

март 1974