

1968

1968

H₂OC_v

38186x Isochoric specific heat of water and steam up to 800° and 1000 bars. Amirkhanov, Kh. I.; Stapanov, G. V.; Mursalov, B. A.; Alibekov, B. G. (USSR). *Tr. Vses. Nauch.-Tekh. Konf. Termodin., Sb. Dokl. Sekts. "Termodin. Fazovykh Perekhodov, Potoka Neobratimyykh Protsessov" "Teplofiz. Svoistva Veshchestv,"* 3rd 1968 (Pub. 1970), 352-65 (Russ). Leningrad. Tekhnol. Inst. Kholod. Prom.: Leningrad, USSR. The isochoric sp. heat c_v values of triply distd. water for 18 isochors (1.001-21.94 cm³/g) at 100-800° and the equations for c_v for 100-350° and 25-1000 atm and for 500-800° and 0-1000 bars were obtained. The measurements were made by using Pt as well as stainless steel high-temp. adiabatic calorimeters. The accuracies were $\leq 3.5\%$ for rapid changes of parameters (temp., vol., c_v), and $< 1.5-2\%$ for uniform c_v changes (in the liq. and steam regions). Comparisons of the results with some literature data revealed divergences of 0.2-1%, but at higher temps. and pressures these are as large as 3.6%.

J. Pietkiewicz

C.A. 1972. 76. 8

Whitney page

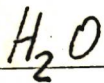
H₂O

99556v Approximate Hartree-Fock wave functions, one-electron properties, and electronic structure of the water molecule. Aung, Soe; Pitzer, Russell M.; Chan, Sunney I. (California Inst. of Technol., Pasadena, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(5), 2071-80 (Eng). Several approx. Hartree-Fock S.C.F. wavefunctions for the ground electronic state of the water mol. have been obtained by using an increasing no. of multicenter *s*, *p*, and *d* Slater-type A.O. as basis sets. The predicted charge distribution has been extensively tested at each stage by calcg. the elec. dipole moment, mol. quadrupole moment, diamagnetic shielding. Hellmann-Feynman forces, and elec. field gradients at both the H and the O nuclei. A carefully optimized minimal basis set suffices to describe the electronic charge distribution adequately except in the vicinity of the O nucleus. These calcns. indicate, for example, that the correct prediction of the field gradient at this nucleus requires a more flexible linear combination of *p* orbitals centered on this nucleus than that in the minimal basis set. Theoretical values for the mol. octopole moment components are also reported.

RCJO

C. A. 1968-69.24

1968



сродство
к протону

XII-14 1968
Beauchamp F. L.,
Buttrill S. R.

J. Chem. Phys., 48, n 4,
1783.

сродство H_2S и H_2O
к протону.
(см. H_2S) III

H_2O
2

ВР - XI - 78

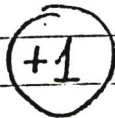
1968

Горюхаев. м.с.р.

19 Б128. Молекулярная фотоэлектронная спектроскопия высокого разрешения. II. Вода и окись дейтерия. Brundle C. R., Turner D. W. High resolution molecular photoelectron spectroscopy. II. Water and deuterium oxide. «Proc. Roy. Soc.», 1968, A307, № 1488, 27—36 (англ.)

На фотоэлектронном спектрометре высокого разрешения исследованы фотоэлектронные спектры H_2O и D_2O , возникающие под действием излучения 584 А от гелиевого источника света. Обсуждены электронная структура молекул и характеристики связи различных молек. орбиталей. Установлено, что у воды имеются только три конфигурационно различных ионизационных потенциала меньших 21,22 эв. Ч. I см. реф. 19Б127.
О. Г. Гаркуша

2. 1969. 19



27

№ 20

ВР-ХТ-78

1968

7 Д284. Молекулярная фотоэлектронная спектроскопия высокого разрешения. II. Вода и окись дейтерия. Brundle C. R., Turner D. W. High resolution molecular photoelectron spectroscopy. II. Water and deuterium oxide. «Proc. Roy. Soc.», 1968, A307, № 1488, 27—36 (англ.)

Получены спектры распределения фотоэлектронов по энергиям при освещении H_2O и D_2O излучением линией 584 Å He. В спектрах наблюдается отчетливая тонкая колебательная структура. Результаты обсуждены в терминах электронной структуры молекул. Из анализа спектров следует, что вода имеет три конфигурационно различающихся потенциала ионизации с энергией ниже 21,22 эв. Ч. 1 см. реф. 7Д283. Ю. М.

сметер

ф. 1969. 72

1968

 H_2O

16 Б52. Анализ эффектов искажения в спектре молекулы H_2O . Bruscatto Dianne Garrett, Genusa Vincent A. Analysis of distortion effects of the H_2O molecule. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 10, 4462—4466 (англ.)

Из первых трех инвариантов матрицы вращательной энергии молекул типа асимм. волчка с учетом поправок центробежного искажения второго порядка получены ф-лы, связывающие вращательные и центробежные постоянные с энергией вращательных уровней заданного колебательного состояния. Эти ф-лы применены к эксперим. данным по колебательно-вращательному ИК-спектру молекулы H_2O . Определены вращательные и центробежные постоянные для колебательных уровней 000, 010 и 020 H_2O .

М. Р. Алнев

м. п.

ж. 1969

16

H₂O

1968

8 Д316. Интенсивности сорока двух линий в ν_1 - и ν_3 -полосах паров воды. Babrov Harold J., Casen Frank. Strengths of forty-two lines in the ν_1 and ν_3 bands of water vapor. «J. Opt. Soc. Amer.», 1968, 58, № 2, 179—187 (англ.)

С помощью вакуумного спектрометра высокого разрешения (до $0,16 \text{ см}^{-1}$) получены спектры поглощения паров воды в области λ 2,7 μ при парциальных давлениях паров 50, 100 и 150 мм. рт. ст., длине пути 3,98 см и t -ре 420° К. Методом кривых роста определены значения интенсивностей отдельных «слабых» линий в полосах ν_1 (12 линий) и ν_3 (30 линий). С целью проверки теоретич. расчетов интенсивностей линий H_2O и определения роли колебательно-вращательных взаимодействий эксперим. значения интенсивностей сравнены с вычисленными в приближении жесткого асимметричного волчка. Показано, что фактор колебательно-вращательного взаимодействия изменяется от значений меньшей единицы для линий R-ветви до значений больших единицы для линий P-ветви,

ср. 1968. 89

хотя и не является плавной ф-цией вращательного квантового числа. Наибольшие изменения F -фактора наблюдаются для линий полосы ν_1 . Для линий полосы ν_1 при 3626,24 и 3596,17 см^{-1} , близких по частоте к линиям полосы ν_3 , F -фактор равен 184 и 257, соответственно. Отмечается хорошее согласие эксперим. значений интенсивностей линий полосы ν_1 с вычисленными недавно Бенедиктом и Калфи с учетом зависимости интенсивности линий от центробежного растяжения. Сопоставление эксперим. и вычисленных значений интенсивностей приводит в этом случае к значению интенсивности полосы ν_1 , равному $1,33 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}/\text{г} \cdot \text{см}^{-2}$ при $287,7^\circ \text{ К}$.

К. Василевский

A(r) (~~111~~ NH_3 , H_2O | | XI 112 1968

Chupke W. A., Russell M. E.

J. Chem. Phys, 1968, 48, n 4, 1527-1533

Ion-molecule reactions of NH_3^+
by photoionization.

Case
4

Proc X_{II}, 1969, 56-1110.

10

1968

H₂O

La

Dobbins D.L., Grone A.H.

20th annual Southwest IEEE conference, 1968

Determination of vibrational and rotational energy levels of water vapor.

1968

 H_2O (конспект.)

14584a Hydrogen bonding in water and ice. Ford, Thomas A.; Falk, Michael (Dalhousie Univ., Halifax, Nova Scotia). *Can. J. Chem.* 1968, 46(22), 3579-86 (Eng). The absorption bands due to the OH and OD stretching vibrations of HDO in ice were measured between 0 and -182° and compared with the corresponding bands in liq. water. Their frequencies were correlated with the intermol. potential energies of H_2O and D_2O . The distributions of the intermol. energies in ice and in water at different temps. were derived from the profiles of the bands.

RCCM

Человек

C. A. 1969. 70. 4:

$\text{BeH}_2, \text{LiH}_2^-, \text{BH}_2^+, \text{BH}_3, \text{BeH}_3^-, \text{CH}_3^+, 9, 4, 1968$
 $\text{CH}_4, \text{BH}_4^-, \text{NH}_4^+, \text{H}_4\text{O}^{2+}, \text{NH}_3, \text{CH}_3^-, \overline{\text{V}}^{11, 13} 5946$
 $\text{H}_3\text{O}^+, \underline{\text{H}_2\text{O}}, \text{NH}_2^-, \text{H}_2\text{F}^+, \text{HF}, \text{OH}^- (\text{Z}_e)$

Frost A.A., 6 sep 5, 9410
curr
 J. Phys. Chem., 1968, 72(4), 1289-93

A floating ○ spherical Gauss-

1968

Cred. Wg
JUN 11 1968

61642g Determination of molecular vibrational force constants from kinematically defined normal coordinates. Feeman, D. E. (Air Force Cambridge Res. Lab. (OAR), Bedford, Mass.). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 27(1-4), 27-43 (Eng). The criterion that the sum of the diagonal force consts. of a generalized valence force field attain an extremum, consistent with elimination of the arbitrariness inherent in the usual unrestricted formulation of the inverse secular problem of detg. $\frac{1}{2}n(n+1)$ vibrational force consts. from only n harmonic frequencies and the equil. configuration, leads to $n!$ solns. for the force field. All such solns. are characterized by symmetric GF matrices, and are obtained in terms of the observed vibrational frequencies, the equil. configuration, and the scaling chosen for the internal symmetry

(H₂O, NO₂)₂Ge F₄
Cred. Wg

(+ 2nd)

C. A. 1968. 69. 16

X

coordinates. The particular 2 force fields involving, resp., the smallest and greatest extrema of the trace of the F matrix are specified, and they correspond to completely reversed assignments of the frequencies. Comparison of the above model with 2 others based on kinematically defined normal coordinates, viz., the method of the characteristic set of valence coordinates and the method of progressive rigidity, reveals that the last possesses some advantages. H_2O , NO_2 , and GeF_4 are discussed. 43 references.

RCKP

OH₂

Gordon M.S.

1968

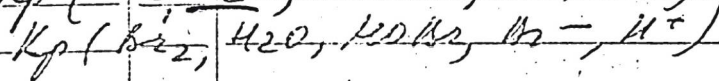
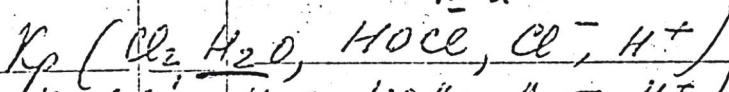
расчет
равнов
весов.

J. Chem. Phys.,
1968, 49, NID, 4643-50.

● (C₄H₂; III)

XI 220

1968
" "



Gutmann H., Lewin M., Perlmutter -
Hayman B.

J. Phys. Chem, 1968, 72, v10, 3671-3673 (eng)

The ultraviolet absorption spectra
of chlorine, bromine, and bromi-
ne chloride in aqueous solution

publ, 1968, SD 298

W 12

H_2O

(E)

Ридберговские
состояния

19 Б14. Корреляция между молекулярными и атомными ридберговскими уровнями. Часть 1. Анализ ридберговских состояний воды. Harada Y., Murrell J. N. The correlation between molecular and atomic Rydberg levels. Part I. An analysis of the Rydberg states of water. «Molec. Phys.», 1968, 14, № 2, 153—164 (англ.)

На основе энергий ридберговских состояний Ne рассчитаны энергии ридберговских состояний H_2O относительно ионизационного потенциала. Сначала рассчитывались энергии валентных состояний Ne, а затем возмущения первого и второго порядка из-за изменений ядерного остова. Члены, описывающие возмущения, оказались чувствительными к форме волновой функции для ридберговских орбиталей Ne. Использовались и самосогласованные волновые функции. Обнаружено разумное согласие между рассчитанными и эксперим. энергиями, исключая 3s-состояние, к-рое, вероятно, лучше коррелирует с переходом на разрыхляющую МО, чем с переходом на ридбергову орбиталь.

Резюме

Х. 1968. 19

1968

H₂O

(d.h.)

13001a) Correlation between molecular and atomic Rydberg levels. I. An analysis of the Rydberg states of water. Harada, Y.; Murrell, J. N. (Univ. Sussex, Brighton, Engl.). *Mol. Phys.* 1968, 14(2), 153-64 (Eng). The energies of the Rydberg states of H₂O relative to the ionization potential have been calcd. by starting from the energies of the Ne Rydberg states. The first step is the calcn. of Ne valence state energies, the second is the calcn. of first and second-order perturbations due to the change in the nuclear framework. These perturbation terms are sensitive to the form of the wavefunction of the Ne Rydberg orbitals. Self-consistent field wavefunctions have been chosen when available. There is a reasonable agreement between the calcd. and observed energies except for the 3s states, which are probably better correlated with a transition to an antibonding M.O. than a transition to a Rydberg orbital. RCFS

C.A. 1968. 69.4

1968

H₂O

(65501z) Infrared spectral absorption coefficient data for water. Herget, W. F.; Muirhead, J. S. (Rocketdyne, Canoga Park, Calif.). *NASA Contract. Rep.* 1968, NASA-CR-98160, 46 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From *Sci. Tech. Aerosp. Rep.* 1969, 7(3), 425. A summary is presented of a spectral absorption coeff. measurements program. The data are for water vapor in the 1-8- μ region at 575-1250°K. at pressures up to 1 atm. Foreign gas broadening by H, Cl, and CO₂ is included. TCSL
 Far infrared and chemistry. Experi. results from French universities. I. C.N.R.S. Paris, Fr.). Bu. is present

C.A. 1969. 71.14

1968

B. Mex.
 racem
 mol-1

H₂O

- (23004p) Self-consistent-field one-center expansion method for C_{2v} symmetry molecules. I. Analysis of the integrals. Joshi, Bhairav D. (Univ. Delhi, Delhi, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1968, 6(11), 599-604 (Eng). General expressions are derived for the one-electron two-center integrals, and the angular parts of one-center Coulomb and exchange integrals for C_{2v} symmetry mols. (AH_2 type). The basis functions are a set of symmetry adapted Slater type (exponential) functions centered on the heavy atom which is taken as the origin of the coordinate system. Computational aspects of the problem are discussed. Numerical values for some types of integrals arising from a basis set of 8 symmetry adapted Slater type orbitals are given for the H_2O mol. for comparison purposes.

RCXZ

C.A. 1969. 70.6

1968

4 Д69. Теоретико-групповая классификация состояний при расчетах молекулярных систем. Каплан И. Г., Родимова О. Б. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 1968, 55, № 5, 1881—1892 (рез. англ.)

Предложен общий метод нахождения разрешенных молекулярных мультиплетов, которые могут быть построены из заданных атомных состояний при учете взаимодействия конфигураций. Метод исходит из описания молекулы координатной волн. ф-цией с заданной перестановочной симметрией схемы Юнга [λ]. Разобраны конкретные частные случаи различных молекулярных конфигураций. Для молекулы H_2O найдены все 100 мультиплетов, которые могут быть построены на четырех 2p-орбиталях атома O и двух 1s-орбиталях атомов H.

Автореферат

кв.-мех.
расчет

ф. 1968. 42

H_2O

расчет,
сл. пост.

(см. №)
III

1968

Kim H., Parr R. G.

J. Chem. Phys., 49, n 7, 3071-
- 83

Одноэлектронное расче
всех атомных ядер
молекулы по методу
вариантов возмущений
IV. Десять нижних атомных
молекул. Имена MMX.

14 11 1968
7 (CH₃F, CH₃Cl, H₂O) XI 293

Krauss M.

Advances Mass Spectrom. Vol. 4, London,
1968, 575-578 (comm.)

Use of approximate Hartree-Fock
calculations to estimate ionization
potentials.

Burkett, 1970, 3624

10 7 (9)

1968

22 Б22. Вычисление ридберговских термов для молекулы воды. Lin T. F., Duncan A. B. F. Calculations on Rydberg terms of the water molecule. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 2, 866—871 (англ.)

Вычислены и сопоставлены с соответствующими эксперим. данными серии ридберговских термов для молекулы воды. В расчетах использована одноцентровая ядерная функция. При этом предполагалось, что одноэлектронные ридберговские функции взаимно ортогональны и ортогональны к ядерной функции. Энергии электронов определялись из потенциалов, содержащих операторы для электронов с внутренних оболочек. Значение термов определено с точностью около 1%, за исключением самых низкоэнергетич. членов некоторых серий. Вариация величин термов по отношению к параметрам/ экранирования во всех случаях приводит к стационарности этих величин.

Резюме

H₂O

ив. нар. раб.

Л. 1968. 22

1968

H₂Oпрограмма
расчета

в р. Док. ур. в. н.

1 Б40. К вычислению постоянных в гамильтониане нежесткого ассимметричного волчка. Макушкин Ю. С. «Ж. прикл. спектроскопии», 1968, 8, № 6, 1067—1070.

Обсуждается вопрос о вычислении колебательно-вращательной энергии молекул H₂O. По полученным ранее ф-лам рассчитываются постоянные центробежного искажения вплоть до третьего порядка. Эффективные вращательные постоянные рассчитываются с помощью эксперим. вращательных уровней. Составлена программа расчета вращательных энергетич. уровней. Расчет проведен для колебательных состояний (030), (041) (131); (031).

Резюме

9
X. 1968. 1

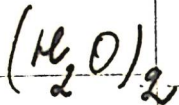
1988

H₂O

- 2 Д153. Волновые функции колебательных состояний молекулы H₂O. Макушкин Ю. С., Толмачев В. И. «Изв. высш. учебн. заведений. Физика», 1968, № 7, 13—18
- Из литературных данных о колебательных постоянных вычислены ангармонич. поправки 1- и 2-го порядков к гармонич. колебательным волн. ф-циям молекулы H₂O.
М. Р. Алиев

9. 1989. 2Д

1968

кв. - мех.
расчет

3 Д120. Изучение водородных связей методом молекулярных орбиталей. Неэмпирический расчет димерной H_2O . Morokuma K., Pedersen L. Molecular-orbital studies of hydrogen bonds. An Ab-initio calculation for dimeric H_2O . «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 7, 3275—3282 (англ.)

Методом Рутана с использованием базиса из гауссовых ф-ций (3 ф-ции s-типа, центрированные на ядрах H, 5 ф-ций s-типа и 3 — p-типа для атомов O) исследована энергия водородных связей и строение димерной H_2O в линейной, циклической и сдвоенной (атом O молекулы-акцептора образует одновременно 2H-связи с молекулой-донором) конфигурациях. Наиболее стабильной является линейная конфигурация с одной

фр. 1969. ЗЯ

Н-связью, расстоянием $O \dots H$ 1,72 Å и энергией стабилизации (разность полной энергии двух молекул H_2O и Н-связанной системы) 12,6 ккал/моль. При этом акцептор почти свободно вращается вокруг, своей молекулярной оси. Удлинение связи $O-H$ в доноре найдено равным 0,012 Å при одновременном выигрыше энергии 0,1 ккал/моль. Анализ заселенностей показал, что для понимания природы Н-связи в воде, кроме поляризации связей в доноре и переноса заряда между двумя молекулами, необходимо учитывать также поляризацию связей в акцепторе и делокализацию зарядов как в доноре, так и в акцепторе.

В. Л. Лебедев

H₂O; D₂O (сн. пост.) К13889. 1968

Морозов В. П., Сторчай Н. П.,
Продрыменко В. Г., Сауце А.,
Сиктирск., тр. сб. совещ., 6-го
1968 (ошубл. 1973), 188-9 (русск.)

Ю Связи между симво-
лами постоянными в мнест-
ных и немнестных константах
(Ф) ных координат, иллюстриро-
ванные, иллюстрируемые, иллюстрируемые
таблица 6000. С.А. 1973, 79, №20, 1199662

1968

Wh. Mex. fac. reg.

H₂O

09554t One-electron properties of near-Hartree-Fock wave functions. I. Water. Neumann, D.; Moskowitz, J. W. (New York Univ., New York, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49 (5), 2056-70 (Eng). Self-consistent-field calcs. are reported for the ground state of the water mol. in a contracted and uncontracted Gaussian basis set. The uncontracted set is shown to be near the Hartree-Fock limit for water. One-electron properties were computed from both wavefunctions. Best est. for several of these quantities are: dipole moment, $\mu_z = 1.995$ D.; quadrupole moment, $\theta_{zz} = -0.108$ and $\theta_{xx} = -2.422$ in buckinghams; octupole moment, $\Omega_{zzz} = -1.337$ and $\Omega_{xxx} = -0.960$ in units of 10^{-34} esu. cm.³; av. diamagnetic shielding at the proton, $\sigma_{Av}^d = 102.9$ ppm.; quadrupole coupling const. at the deuteron, $(eqQ/h)_{AA} = 343.9$ kc./sec., and at the O, $(eqQ/h)_{aa} = -8.34$ Mc./sec. The effect of including *d*-type Gaussian functions in the basis is examd.

RCJQ

C. A. 1968. 69. 24

1968

22117v Force constant displays of unsymmetric molecular isotopes of water, hydrogen sulfide, hydrogen selenide, and acetylene. Nibler, Joseph W.; Pimentel, George C. (Univ. of California, Berkeley, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 26(3), 294-314 (Eng). The results of normal coordinate calcs. can be presented in the form of "force const. displays," the loci of all possible solns. The intersections of the loci for isotopically substituted mols. identify a "best" soln. The value of such displays is evaluated and demonstrated with the data for H_2O , H_2S , H_2Se , and $HCCH$. The displays derived from both exptl. frequencies, (ν) and harmonic frequencies (ω_e) are examd. In general, the partially deuterated, unsymmetric isotopic mol. is more useful in detg. potential functions than is the completely deuterated species. The significance and relative effectiveness of various error-weighting functions in normal coordinate iterative programs are demonstrated. The displays generally det. the principal force const. to better than 5%, but the off diagonal force const. must be interpreted with care. RCKP

progr. (C.A.)
Nag.

13m

C.A. 1968. 69.6



1968

H₂O

сим. пост.

1/2 Д154. Кривые силовых постоянных в несимметричных изотопах молекул H₂O, H₂S, H₂Se и HCCH. Nibler Joseph W., Pimentel George C. Force constant displays of unsymmetric molecular isotopes of H₂O, H₂S, H₂Se, and HCCH. «J. Molec. Spectrocs.», 1968, 26, № 3, 294—314 (англ.)

Из наблюдаемых (ω) и гармонич. (ω^0) частот основных колебаний симметричных и несимметричных изотопич. модификаций молекул H₂O, H₂S, H₂Se и HCCH методом наименьших квадратов вычислены их силовые коэф. Расчет выполнен с 3 весовыми матрицами $W=1$, $W=\Lambda^{-1}$ и $W=\Lambda^{-2}$ ($\Lambda=\omega_i^2$) или $(\omega_i^0)^2$ и показано, что при использовании ω_i^0 можно выбрать любую W , а для ω_i различный выбор W приводит к существенно различ-

09. 1969. 20

X

ным результатам для силовых коэф. Оценка ошибок выполнена по дисперсии силовых коэф. Построены кривые зависимости диагональных силовых коэф. от недиагональных, точки пересечения которых дают искомые силовые коэф. При этом отдельно использованы частоты симметрично и несимметрично замещенных изотопич. молекул. Отмечено, что неопределенность в определении силовых коэф. графич. методом зависит от использованного набора ω_i^0 . Область пересечения кривых, определяющая степень неопределенности значения соответствующего силового коэф. для ω_i^0 симметричных замещенных молекул, шире, чем для ω_i^0 несимметричных замещенных молекул.

М. Р. Алнев

1988

 H_2O

10 Б208. Наборы силовых постоянных в несимметричных изотопных молекулах H_2O , H_2S , H_2Se и $HCCH$, Nibler, Joseph W. Pimentel George C. Force constant displays of unsymmetric molecular isotopes of H_2O , H_2S , H_2Se , and $HCCH$. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 3, 294—314 (англ.)

Результаты расчета колебаний в нормальных координатах могут быть представлены в виде «наборов силовых постоянных» — годографов всех возможных решений. Точки пересечения годографов для изотопически замещенных молекул определяют «наилучшее» решение. Этот метод применен для оценки силовых полей молекул H_2O , H_2S , H_2Se и $HCCH$, исходя как из эксперим. наблюдаемых частот (ν), так и гармонич. частот (ω).

Л. 1969. 10

Использование несимм. изотопных молекул при вычислении потенциальной функции является более предпочтительным по сравнению с полностью замещенными дейтероаналогами. При оценке точности расчетов были использованы функции ошибок с различными весами и обсуждены их значимость и относительная эффективность. Метод дает значения основных силовых постоянных с погрешностью менее 5%; при этом интерпретация недиагональных силовых постоянных требует осторожности.

Резюме

1968

H₂O

Nielsen H.H.,
Rao K.N.

транзит
суп-ра
носе

U.S. Govt. Res. Develop.
Rep., 1969, 69, n 9,
75.

(at. CO₂) !!!

1968

 H_2O (magn)

47854w Vacuum ultraviolet absorption spectra of liquid water and ice. Onaka, Ryumyo; Takahashi, Tsutomu (Kyoiku Univ., Tokyo, Japan). *J. Phys. Soc. Jap.* 1968, 24(3), 548-50 (Eng). The fundamental absorption bands were studied of various phases of H_2O . Cubic ice has a well-defined absorption band at about 8.7 ev., while hexagonal and amorphous ices show only a gradual increase of absorption toward the higher energy in the range 7-10 ev. The absorption coeff. of liq. H_2O shows a steep rise in the range 6.5-8 ev. and complies with the Urbach rule at the low-energy tail of the fundamental absorption. This rule is believed to characterize the behavior of phonon-broadened absorption bands. 18 references.

JDJN

C.A. 1968. 69. 12

11 13 14 XI 427 1968

J (H₂, HCl, H₂O, NH₃, CH₄, N₂, NO, O₂)

Price W.C.

Molec. Spectrosc. Proc. Conf, Brighton, 1968,
London, 1968, 221-236; Discuss, 232-238 (an)

Developments in photo-electron spectroscopy

6. 11. 68

14

Proc. X-ray, 1968, 46/63

10

(10)

№ 20

1968

2 Д146. Изучение водородной связи в воде методом МО. Rein Robert, Clarke George A., Harris Frank E. Molecular orbital study of the hydrogen bonding of water. «J. Molec. Struct.», 1968, 2, № 2, 103—109 (англ.)

Расширенным методом Хюккеля с самосогласованием по заряду рассчитаны H_2O (I) и плоский димер I (II). Расчет I удовлетворительно передает величину валентного угла (100°), потенциал ионизации (10,61 эв), дипольный момент (2,23 ед. Дебая), атомные заряды ($-0,23 e$ на O). Использование двухкомпонентных приближенных орбиталей Хартри—Фока приводит к тем же качеств. результатам. Метод, однако, не позволяет определить равновесное значение длины связи (ДС): энергия монотонно понижается с увеличе-

расчет
у

ном.ср-ра

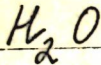
оп. 1970. 28

ⓧ

нием ДС, в результате чего не получается также и стабильного II. Однако при закреплении расстояния O—O наблюдается минимум энергии при r_{0-II} , большем ДС в I. Расчет обнаруживает значительный сдвиг заряда вдоль H-связи в II от акцептора к донору, заселенность перекрывания связей O—H и H—O изменяется при образовании II в значительно меньшей степени.

А. П. Клягина

1968



силовые
постоянные

14 Б12. Применение теоремы вариала к расчету молекулярных силовых постоянных. Гармонические силовые постоянные молекулы воды. Россихин В. В. Морозов В. П., Цауне А. Я. «Теор. и эксперим. химия», 1968, 4, № 1, 42—47

Квантовомеханическая теорема вариала применяется к расчету гармонич. части потенциальной функции молекулы H_2O на основе волновых функций, полученных в приближении самосогласованного поля. Резюме

X. 1968. 14

1968

 H_2O

(Calc. log)

13050r Use of the virial theorem to calculate molecular force constants. Harmonic force constants of a molecule of water. Rossikhin, V. V.; Morozov, V. P.; Caune, A. (Dnepropetrovsk. Khim. Tekhnol. Inst., Dnepropetrovsk, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1968, 4(1), 42-7 (Russ). Equations obtained by differentiating the virial may be used in any case where the classical theory of mol. vibrations gives an insufficient no. of equations for detg. the harmonic force consts. The Hartree-Fock-Roothan wave functions were used for the calcs. of the H_2O mol. The force consts. obtained are in good agreement with the exptl. values.

Mary Frances Richardson

C.A. 1968. 69. 4

H_2O

Rothe A. E.
McCaa A. J.

1968

U. S. At. Energy Comm.,
CAZ-TR-165, 70 pp.

check

(cell. N_2) III

H_2O
(жидк.)
ИК-
спектр

15 B260. Колебательная динамика в жидкой воде: новая интерпретация инфракрасного спектра жидкости. Schiffer J., Hornig D. F. Vibrational dynamics in liquid water: a new interpretation of the infrared spectrum of the liquid. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 9, 4150—4160 (англ.)

При сравнении ИК-спектров жидк. воды и простых гидратов отмечены нек-рые аномалии, необъяснимые в рамках принятых в настоящее время теорий жидкости. Эти аномалии объясняются с точки зрения максвелловского распределения взаимодействий при столкновениях между молекулами воды. Колич. оценки показывают, что большинство молекул в жидкости сильно искажены вследствие столкновений, и что наблюдается широкое распределение степени искажений молекул в жидкости. В рамках колебательной динамики характер проявления вал. кол. $\nu(OH)$ воды можно трактовать как континуум осцилляторов OH с набором различных частот, испытывающих слабые меж- и внутримолек. взаимодействия. Предложена новая интерпретация ИК-спектра жидк. H_2O в рамках этой модели.

Резюме

Ж. 1969.

15

1968

H₂O *etc*

1968

L.K. Cline

— 47746n The infrared spectra of liquid water and heavy water in the 1000 to 250 cm.⁻¹ range. Simon, Martha Nichols (Cornell Univ., Ithaca, N.Y.). 1968, 109 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 68-6602. From *Diss. Abstr. B* 1968, 28(11), 4536. SNDC

C.A. 1968. 69. 12

1968

H₂OC_p

(38191w) Specific heat of water c_p at the solidification curve. Sirota, A. M.; Grishkov, A. Ya. (USSR). *Tr. Vses. Nauch.-Tekh. Konf. Termodin., Sb. Dokl. Sekts. "Termodin. Fazovykh Perekhodov, Poloka Neobratimyykh Protseessov" "Teplofiz. Svoistva Veshchestv,"* 3rd 1968 (Pub. 1970), 334-44 (Russ). Leningrad. Tekhnol. Inst. Kholod. Prom.: Leningrad, USSR. The measurements of c_p at 4.11-32.53° and 500-1000 bars revealed divergences between the exptl. data and those calcd. by use of the "International equation" (1967 IFC Formulation for industrial use), esp. for temps. below 30°. The 1000-bar isobar obtained by use of the exptl. c_p data does not change its curvature, and the presence of characteristic inflections on c_p isobars at the curve of solidification was not confirmed. The exptl. set-up used is described in details.

J. Pietkiewicz

C.A. 1972. 76.8

H_2O

Колес.
спектр

9 Д247. Возбуждение колебательных переходов в парах воды и углекислом газе посредством электронных ударов при кинетических энергиях между 30 и 60 эв. Skerbele Ausma, Dillon Michael A., Lassetre Edwin N. Excitation by electron impact of vibrational transitions in water and carbon dioxide at kinetic energies between 30 and 60 eV. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 11, 5042—5046 (англ.)

Исследованы спектры колебательных переходов в молекулах H_2O и CO_2 , возбужденных посредством электронных ударов при кинетич. энергиях 30÷60 эв. В спектрах паров воды получены переходы, соответствующие колебательным полосам ν_1 , ν_2 , ν_3 , $2\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$, $\nu_1+\nu_3$, $\nu_1+\nu_2+\nu_3$ и $2\nu_1+\nu_3$. В спектрах CO_2 , помимо полос ν_2 и ν_3 , наблюдаются слабые полосы, соответствующие колебаниям $\nu_1+\nu_3$, $2\nu_2^0+\nu_3$ и полносимметричному колебанию ν_1 . Относит. интенсивности колебательных переходов в спектрах электронного удара определены для углов рассеяния от 2° до 15° и сравнены с интенсивностями соответствующих полос в ИК-спектрах. Библ. 18.
К. Василевский

ф. 1969. 99

+1

☒

H₂O

коэф.

поглощ.

1968
4 Д298. Коэффициент поглощения паров воды в области 600—1000 см^{-1} . Varanasi P., Chou S., Penner S. S. Absorption coefficients for water vapor in the 600—1000 см^{-1} region. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1968, 8, № 8, 1537—1541 (англ.)

Изучены спектры поглощения паров воды в области 600—1000 см^{-1} с разрешением 25 см^{-1} при t -рах 400, 450 и 500°K и давлениях 2 и 10 атм. Спектры получены с использованием кювет из нержавеющей стали с окнами CdTe. Наблюдаемое поглощение отнесено к вращательным переходам молекулы H₂O. Вычисленный коэф. поглощения оказался заметно ниже экспериментального, причем согласно с опытом улучшается при повышении t -ры. Разность между этими величинами объяснена вкладом в интенсивность поглощения за счет молекул, связанных водородной связью. Оценка энергии водородной связи молекул H₂O в газовой фазе дает величину 3—5 ккал/моль. Библ. 9. М. В. Тонков

ф. 1969.

42

1968

~~63092b~~ Quantum-mechanical analysis of fine structure in the vibration-rotation spectrum of water vapor. I. Methods for calculating positions, intensities, half-widths of lines, and coefficients of absorption. Zuev, V. E.; Ippolitov, I. I.; Makushkin, Yu. S.; Orlov, A. A.; Fomin, V. V. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1968, 25(1), 36-44 (Russ). Equations for calcg. of the title spectral parameters were detd. by means of quantum mech. anal. V. Bekarek

C.A. 1968. 69. 16

Ив. мех. расч.

1968

H_2O

5 Б172. Квантовомеханический анализ тонкой структуры колебательно-вращательного спектра водяного пара. 1. Методика расчета положений, интенсивностей, полуширин линий и коэффициентов поглощения. Зубев В. Е., Ипполитов И. И., Макушкин Ю. С., Орлов А. А., Фомин В. В. «Оптика и спектроскопия», 1968, 25, № 1, 36—44

Разработана методика квантовомеханич. расчетов уровней колебательно-вращательной энергии, положения центров линий, их полуширин, интенсивностей и коэф. поглощения в спектрах водяных паров. Учтено взаимодействие колебательных и вращательных термов молекулы.

Резюме

Х. 1969. 5

H₂O

1968

8 Д154. Исследование тонкой структуры колебательно-вращательного спектра водяного пара. Зуев В. Е., Ипполитов И. И., Макушкин Ю. С., Орлов А. А., Фомин В. В. «Докл. АН СССР», 1968, 179. № 1, 51—54

Приближенный метод записи колебательно-вращательного гамильтониана, удобный для применения теории возмущений. Показано, что полная колебательно-вращательная энергия может быть представлена в виде суммы энергии трехмерного ангармонич. осциллятора и энергии нежесткого волчка. Рассчитан вращательный энергетич.

оп. 1968. 8А

спектр для ряда колебательных полос. Колебательно-вращательная ф-ция представляется в виде произведения ф-ций ангармонич. осциллятора и нежесткого волчка. Рассчитаны линейные и квадратичные коэф. в разложении дипольного момента по норм. координатам. С помощью полученных волн. ф-ций и дипольного момента определены интенсивности, полуширины линий и коэф. поглощения для ряда узких участков спектра в районах 0,84, 1,06 и 1,15 μ .

1968

H_2O

17 Б49. Приближенные ангармонические потенциальные функции многоатомных молекул. Случай двух изотопических модификаций трехатомных нелинейных симметричных молекул. Цауне А. Я., Морозов В. П., Даниова В. С. «Оптика и спектроскопия», 1968, 24, № 3, 372—377

На примере молекул H_2O , D_2O ; H_2S , D_2S ; H_2Se , D_2Se исследуются возможности применения метода исследовательных приближений к определению постоянной ангармонич. потенциальной функции. Изучается применимость ее к вычислению колебательных постоянных и частот перехода указанных молекул. Резюме

ν_i ;

м.п.;

2. 1968. 17

