

$H_2O^+$

I-739

1954

818

A.P. ( $\text{OH}^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{H}^+$ )

Tsuchiya T.

J.Chem.Phys. 1954, 22, N 10, 1784-1785  
( )

Mass spectrometric detection of free OH  
radical in the thermal decomposition product  
of  $\text{H}_2\text{O}$  vapor.

PX, 1955, 45259

10

8/10/54

$H_2O^+$

1958.

Erst D.C. McDowell C.A.

Can. J. Chem., 1958, 36, 39

III  
B99-5424-69

Восстановление соединений  
ионов.

(ан.  $HF^+$ )

1959

$\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{OH}^+$ ,  $\text{O}^+$ ,  
(A.P.)

$\text{H}^+$ ,  $\text{H}^-$ ,  $\text{O}^-$ ,  $\text{OH}^-$

I-3070

Cottin M.

J.chim.phys.et phys.-chim.biol., 1959, 56,  
N 11-12, 1024-1035.

Исследование ионов, образованных электрон-  
ным ударом в парах воды.

РЖХ, 1960, № I4,  
55907.

Ю. М.

✓  
Э. В. Ф.



$H_2O^+$

1960

Cottin M.

(3)

Dep-3070-1

p-1025-35

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

1961.

Kadota N  
Tshida S

A.P.

Bp-5475-1

1961, N18, 119-122

June, per. ann

I-3155

$H_2O^+$  (A.P.)

1963

Эксперимент

Foner S.N., Hudson R.L.

Ionization and dissociation of  
hydrogen peroxide by electron impact.  
"J.Chem.Phys.", 1962, 36, N 10, 2676-  
2680 (АНГЛ.)

РХ., 1963, 2 Б 34

10

Эс/б ф

I 3267

1963

$H_2O^+$  ( A )

Кацота Нориаки. Исика Сэйити.  
"Сингурё Бунсэки. Сасс Брестозо.",  
1961, 9, 5 18, 119-122 /японск;  
рез.англ./

Аномальное поведение паров воды  
в масспек-трометре.

РХ., 1963, 8 545

Ю

Есго орт

0; (I<sup>II</sup>, I<sup>III</sup>, I<sup>V</sup>, 2ge 1 - 29 | XI 2085 1964

Bertie J. E., Whalley E., H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

J. Chem. Phys.; 1964, 40, N6,

1646-59

Infrared spectra of ices II, III and  
V in the range 4000 to 350 cm<sup>-1</sup>

pp 65 10 6 aspects

X-6038

~~WAB 103~~

1964

$\text{Na}^+, \text{H}_2\text{O}, \underline{\text{H}_2\text{O}^+}, \text{H}_3\text{O}^+, \text{O}, \text{O}^-, \text{OH}, \text{T}, \text{T}^-$  (Ea. R)

Pecul K.

Rept. Inst. badan jadro. Warsaw,  
1964, ~ 550 / XVIII, July, 27 pp

HD 6038 f. K.

E, ze, A(p), A(e-) XI 2191 1965  
( $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{H}_4\text{O}^{2+}$ ,  $\text{H}_3\text{O}$ ,  $\text{H}_4\text{O}^+$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{OH}$   
 $\text{OH}^-$ )

Pecul K.

Acta phys polon, 1965, 27, N5,  
713-22

Theoretical investigation of oxygen  
hydrides by the united atom  
method

pp 66

10

Есть оригинал

HeB<sup>+</sup>

Brehm Burkhard.

1966

Z. Naturforsch., 21a, N3, 1966.

Масс-спектрометрическое  
изучение гетероциклических  
молекул

(1 см 0.2<sup>+</sup>) III



$\text{OH}_2^+$   
(м.и.)  
кв. мех.  
расчет

Pople J.A., Segal G.A.  
J. Chem. Phys., 1966, 44,  
N 9, 3289-3296.

1966

см ВМЗ, III

$H_2O$

$H_2O^+$

$H_2O$

(Ei, n.n.)

11  
Fr 174

1969

Figueroa - Fayard F.

X

Israel J. Chem., 1969, 7, n 2, 275-289/ann.

Study of the water molecule in the gaseous phase excited states of  $H_2O$ ,  $H_2O^+$  and  $H_2O^-$

Pre Kuss, 1970, 5516Z

10

Атомный состав.  $(CH, CH^+, CH_2, CH_2^+, CH_3, CH_3^+,$   
Соединения.  $Si, Vi (CH_4; CH_4^+, CH_5; CH_5^+, NH,$   
Сред. масс  $NH^+, NH_2; NH_2^+; NH_3; NH_3^+;$

$NH_4; NH_4^+; OH, OH^+, OH_2; FH,$   
 $OH_2^+; OH_3; OH_3^+; FH, FH^+, FH_2)$

Labhan W.A., Mehre W.J., Curtiss L.H.  
Pople J.A.

J. Amer. Chem. Soc., 1971, 93, N24,  
6377-87

PX72

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O (εi, I, vom. empty.) 1971  
XI 2920

Meyer W.,  
Int. J. Quant. Chem., 1971, N5, 341-  
-348 (англ.)

Ionization energies of water  
from PNO-CI calculations.

Isic Puz, 1972, CD 160

10

6

⊕

$H_2O$ ,  $H_2O^+$  (кв. мех. pacem) " 1971  
Rosmus P., Vojtik Y., Kvasnicka V.  
Theor. Chim. Acta, 1971, 22, N2, 142-8  
(Chem.)

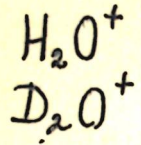
Full complete neglect of differen-  
tial overlap / 2 - configuration  
interaction [CND0/2-CI] calcula-  
tion on water and water mono-  
cation  
CA, 1971, 75, N20, 1222-234

1972.

3 Б983. Реакции  $\text{H}_2\text{O}^+$  и  $\text{D}_2\text{O}^+$  с молекулярным водородом. I. Сродство водорода к протону. Cotter R. J., Rozett R. W., Koski W. S. Reactions of  $\text{H}_2\text{O}^+$  and  $\text{D}_2\text{O}^+$  with molecular hydrogen. I. Proton affinity of hydrogen. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 10, 4100—4103 (англ.)

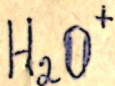
С помощью двойного масс-спектрометра измерены полные сечения  $\sigma_{1,2}$  эндотермич. р-ций  $\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{OH}$  (1) и  $\text{D}_2\text{O}^+ + \text{D}_2 \rightarrow \text{D}_3^+ + \text{DO}$  (2) при энергиях первичных ионов  $E_{\text{лаб}} = 2-100$  эв. Сечения  $\sigma_{1,2}$  быстро возрастают от порога, достигают широкого максимума при  $E_{\text{ц.м.}} \approx 3$  эв ( $\sigma_1 \approx 0,40 \text{ \AA}^2$  и  $\sigma_2 \approx 0,16 \text{ \AA}^2$ ) и затем спадают с ростом  $E$ . С учетом теплового движения мишени определены в системе центра масс пороговые энергии  $E_1 = 1,820$  эв и  $E_2 = 1,693$  эв, откуда получены сродство к протону  $\text{PA}(\text{H}_2) = 4,37 \pm 0,05$  эв и сродство к дейтерону  $\text{DA}(\text{D}_2) = 4,50 \pm 0,05$  эв. Обсуждаются прежние эксперименты по определению РА. Отмечается, что в условиях проведенного эксперимента нельзя строго оценить влияние возбужденных состояний исходных и конечных молекул на РА.

А. Резников



сродство  
к протону

Х. 1973.  
№ 8.



emmc 3285

1973

104043t Spectrum of  $\text{H}_2\text{O}^+$  [water cation]. Lew, H; Heiber, I. (Div. Phys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1973, 58(3), 1246-7 (Eng). The emission and absorption spectra of  $\text{H}_2\text{O}^+$  were obsd. in the 3500-6800-Å range. About 10 bands were obsd. corresponding to transitions from various vibrational levels of the  $^1A_1$  upper state to the (0,0,0) vibrational level of the  $^2B_1$  ground state. At least 4 bands were obsd. corresponding to similar transitions to the (0,1,0) vibrational level of the ground state. The (0,0,0) ground state rotational consts. were obtained from the obsd. combination differences in 5 bands and taking the avs. of the spin doublets. The HOH bond angle and the OH bond distance were calcd. to be  $110.5^\circ$  and  $0.999 \text{ Å}$ , resp. Tentative vibrational assignments of the upper state were made by comparison with photoelectron spectroscopy data.

Di  
Encorp

C.A. 1973. 78 N 16

18-92

$H_2O^+$

Оттиск 3285

1973

7 Д340. Спектр  $H_2O^+$ . Lew H., Heiber I. Spectrum of  $H_2O^+$ . «J. Spect. Phys.», 1973, 58, № 3, 1246—1247 (англ.)

С использованием многоходовой кюветы в области 350—680 нм при дисперсии 16 Å/мм фотоэлектрически зарегистрирован спектр поглощения  $H_2O^+$  (I). Спектр излучения I изучен с помощью фотоаграфич. методики при дисперсии 1,2 Å/мм. Ионы I генерировались в низковольтном разряде через пары воды при давлении до  $2 \cdot 10^{-3}$  мм рт. ст. Обнаружено 10 полос, соответствующих переходам с различных колебательных уровней состояния  $^2A_1$  на (0,0,0) колебательный уровень основного состояния  $^2B_1$  и 4 полосы, принадлежащие переходам на колебательный уровень (0,1,0) этого состояния. Проведен предварительный анализ спектра, определены вращательные константы уровня (0,0,0) основного состояния и геометр. параметры I. П. Ш.

(м.п.)

ф. 1973 № 7

6-92



H<sub>2</sub>O

спенир

X. 1973

N 14

14 Б155. Спектр H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>. Lew H., Heiber I. Spectrum of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 3, 1246—1247 (англ.)

В области 3500—6800 Å исследованы с высоким разрешением спектры испускания и поглощения иона H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> (I). Ионы I получали при электр. разряде в парах воды при  $p=1-2 \times 10^{-3}$  мм (разность потенциалов, приложенная к разряду, равнялась 60 в, разрядный ток имел величину 4А). Наблюдали около 10 полос, соотв-щих переходам из различных колебательных уровней верхнего состояния <sup>2</sup>A<sub>1</sub> на колебательный уровень (0, 0, 0) основного состояния <sup>2</sup>B<sub>1</sub> и не менее 4 полос, соотв-щих подобным переходам на колебательный уровень (0, 1, 0) основного состояния. Из комбинац. разностей для пяти полос и при использовании средн. величин для спиновых дублетов определены вращательные постоянные центробежного искажения I для колебательного уровня (0, 0, 0) основного состояния: A=29,07, B=12,42, C=8,46, D<sub>J</sub>=0,0008, E<sub>K</sub>=0,045, D<sub>JK</sub>=-0,004 см<sup>-1</sup>. Из вращательных постоянных определены геометрич. параметры I: <НОН 110,5° и r. (O—H)=0,999 Å.

А. П. Александров

1973

отмеч 3285

У-92

H<sub>2</sub>O; NH<sub>3</sub> (схватили в матрице) 1973

Smeyers-Nebe N., Devlin J. P., XI 3846

J. Phys. Chem., 1973, 77, N 26, 3067-  
-3070 (англ.)

Matrix isolated  $\text{H}^+ \text{NO}_3^-$  ion  
pairs in argon, glassy water,  
and ammonia.

Proc. Chem., 1974, 105159

110

30925.6646

TE, Ph, Ch

OH<sub>2</sub><sup>+</sup>

49587

Chemical

(1151)

Stenkamp Larilyn Zeller, Davidson  
Ernest R. An ICSCF investigation of  
Walsh's rules. "Theor. chim. acta",  
1973, 30, N 4, 283-314

(англ.)

0969 ВИИ

952 954

962

ВИНИТИ

1974

 $H_2O^+$ 

Вместе по научно-исслед.  
работе ИВТАН, серия №8  
"Периодические св-ва  
азота, водорода и их соеди-  
нений."

ш.п.

$H_2O^+$

Buenker Robert J. 1974

Peyrimhoff Sigrid D.

"Chem Phys. Lett" 1974, 29,  
N2, 253-259 (англ).

(см  $H_2O$ , III)

расчет  
энергии  
переходов  
сим. осцил.  
момента.

Ф. 1975. N4

$\text{OH}_2^+$

Ommea 1876

4974

Hariharan P.C.

Pople J.A.

Mol. Pys.

I974, 27, NI, 209-2II.

paet  
26.00p

( $\xi_i$ )

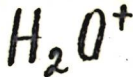
ommick 2274 1974

$H_2O^+$

G. Herzberg, H. Lew.

(chemsp.) "Astron. and Astrophys"  
1974, 31, 123-24

Tentative Identification  
of the  $H_2O^+$  ● Ion in Comet  
Kohoutek.



\*4-6264

1974.

12 Д122. Возбужденные состояния ионов в газе. IV. Поверхности потенциальной энергии иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Lesclerc J. C., Horsley J. A., Logquet J. C. Excited states of gaseous ions. IV. Potential energy surfaces of the  $\text{H}_2\text{O}^+$  ion. «Chem. Phys.», 1974, 4, № 3, 337—352 (англ.)

Для четырех типов низколежащих электронных состояний иона  $\text{H}_2\text{O}^+$  проведены расчеты потенц. поверхностей. При несимметричной диссоциации в расчете использовано приближение самосогласованного поля с представлением ф-ции в базисе сгруппированных лепестковых гауссовых ф-ций. Потенц. поверхности, соответствующие симметричной диссоциации, получены методом ППДП/2. Найденны равновесные значения угла  $\text{H}-\text{O}-\text{H}$ :  $123^\circ$ ,  $180^\circ$  и  $69^\circ$ , соответственно, в электронных состояниях  $X^2B_1$ ,  $\bar{A}^2A_1$  и  $\bar{B}^2A_2$ . Квартетное состояние  $\bar{a}^4B_1$  получается несвязанным, и рассматриваемый ион в этом состоянии линейен. Для состояния  $\bar{A}^2\bar{A}_1$  энергетич. поверхность характеризуется двумя долинами, по которым может идти диссоциация. Ч. II см. РЖХим, 1972, 5Б114. А. Дементьев

м.п. До,  
г.ашкрф. 1974  
N12



$H_2O^+$

ХЗ-6264

1974

1 Б21. Возбужденные состояния ионов в газе. IV. Поверхности потенциальной энергии иона  $H_2O^+$ . Lesclerc J. C., Horsley J. A., Lorquet J. C. Excited states of gaseous ions. IV. Potential energy surfaces of the  $H_2O^+$  ion. «Chem. Phys.», 1974, 4, № 3, 337—352 (англ.)

Для 4 низших состояний иона  $H_2O^+$  проведены расчеты потенциальных поверхностей. При расчетах несимм. процесса диссоциации использован неэмпирич. метод ССП МО в базисе лепестковых сгруппированных гауссовых функций. Потенциальные поверхности, соотв-щие симм. диссоциации, получены методом ППДП/2. Найдены равновесные значения угла  $H-O-H$ : 123, 180 и 69°, соотв., в электронных состояниях  $\tilde{X}^2B_1$ ,  $\tilde{A}^2A_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$ . Квартетное состояние  $\tilde{a}^4B_1$  получается отталкивательным и рассматриваемый ион в этом состоянии линейен. Для состояния  $\tilde{A}^2A_1$  энергетич. поверхность характеризуется двумя долинами, по к-рым может идти диссоциация. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1969, 14Б21.

А. Дементьев

м.н.  
г.дементьев

Х. 1975. N1

H<sub>2</sub>O

+

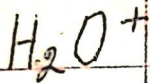
\*4-6264

1974

u.n.

111658n Excited states of gaseous ions. IV. Potential energy surfaces of the water(+) ion. Leclerc, J. C.; Hbrsley, J. A.; Lorquet, J. C. (Cent. Ondul. Appl., Paris, Fr.). *Chem. Phys.* 1974, 4(3), 337-52 (Eng). Cross sections of the potential-energy hypersurfaces are reported for the 4 lower-lying states of the H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> molecular ion. The sym. dissociation of the ion was investigated by using the CNDO/2 method supplemented by a CI calcn. SCF wave functions were calculated for the asym. dissociation by using an extended basis of Gaussian-lobe functions. The values of the H exponents are very sensitive to the molecular geometry. The calculated equilibrium H-O-H angle is 123° in the X<sup>2</sup>B<sub>1</sub> state, nearly 180° in the A<sup>2</sup>A<sub>1</sub> state and 69° in the B<sup>2</sup>B<sub>2</sub> state. The lower-lying quarter a<sup>4</sup>B<sub>1</sub> is linear and entirely repulsive. The potential-energy surface of the A<sup>2</sup>A<sub>1</sub> state has a peculiar shape, characterized by 2 dissociation valleys.

C.A. 1974.81. N18



#4-6263

1974

преддиссоц.  
иона

+2

[X]

ж. 1975. №4

4 Б1311. Возбужденные состояния ионов в газе. V. Преддиссоциация иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Lorquet A. J., Lorquet J. C. Excited states of gaseous ions. V. The predissociation of the  $\text{H}_2\text{O}^+$  ion. «Chem. Phys.», 1974, 4, № 3, 353—367 (англ.)

Проведен теор. анализ диссоциации состояния  $\tilde{B}^2 B_2$  иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Этот ион преддиссоциирует через 2 состояния отталкивания:  $\tilde{a}^4 B_1$ , давая  $\text{OH}^+ + \text{H}$  [переход в это состояние обусловлен спин-орбитальным взаимодействием (COV)] и  $a^2 A''$ , давая  $\text{H}^+ + \text{OH}$  (переход обусловлен COV и кориолисовым взаимодействием). На основании колебательного анализа фотоэлектронных спектров  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{P}_2\text{O}$ , определены частоты колебаний  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{D}_2\text{O}^+$  и  $\text{HDO}^+$ . Найдено, что ион  $\text{H}_2\text{O}^+$  в состоянии  $B^2 B_2$  имеет длину связи OH 1,12 Å и угол между связями OH 78°. Динамика процесса мономолек. распада иона  $\text{H}_2\text{O}^+$  определяется взаимодействиями между нормальными колебательными модами  $\text{H}_2\text{O}^+$ .

полностью симм. оптически активными модами  $\nu_1$  и  $\nu_2$ , к-рые способны воспринимать энергию при возбуждении фотонным и электронным ударом, но химически инертным, и антисимм. модой  $\nu_3$ , к-рая оптически не активна (ее доля в 0—0-переходе  $\sim 0,6\%$ ), но связана с континуумом, так что из нее и происходит распад. Проведен расчет взаимодействия этих мод в 2 моделях: а) в результате ангармоничности Пв потенциальной энергии по механизму резонанса Ферми возбуждаются лишь четные обертоны антисимм. колебания; б) возбуждение нечетных обертонов обеспечивается вибронным взаимодействием. Модель (б) лучше, чем (а), согласуется с имеющимися в лит-ре эксперим. данными по изотопному сдвигу в Пт появления ионов  $\text{OH}^+$  и  $\text{OD}^+$ , формам кривых фотоионизации, масс-спектрам ионизации фотонами с энергией 21 эв, метастабильным распадам ионов и образованию ионов  $\text{O}^+$ . Показано, что все колебательные уровни, лежащие выше 1-й асимптоты диссоциации, полностью, predisцинируют, так что автоионизация в этом случае приводит лишь к образованию молек. ионов  $\text{H}_2\text{O}^+$ , а не осколочных ионов  $\text{OH}^+$ . Процесс автоионизации полностью отсутствует при ионизации фотонами с энергией 21 эв, тогда как при бомбардировке электронами с энергией 21 эв его вклад составляет 75%, а остальные 25% обусловлены прямой ионизацией. Сообщ. II см. РЖХим, 1972, 5Б114.

В. Е. Скурат

$H_2O^+$

43-6263

1974

12 Д123. Возбужденные состояния ионов в газе. V. Предиссоциация иона  $H_2O^+$ . Lorget A. J., Lorget J. C. Excited states of gaseous ions. V. The predissociation of the  $H_2O^+$  ion. «Chem. Phys.», 1974, 4, № 3, 353—367 (англ.)

Исследуется колебательная структура электронного состояния  $\bar{B}^2B_2$  иона  $H_2O^+$ , для которого дважды возможна предиссоциация благодаря пересечению с кривыми разваливающихся состояний  $\tilde{a}^4B_1$  и  $^2A''$ . Получены частоты колебаний и их отнесение для ионов  $H_2O^+$ ,  $D_2O^+$  и  $HDO^+$ . Имеются 2 типа колебаний: симметричные, возбуждаемые оптически, и антисимметричные, невозбуждаемые оптически, но активные с химич. точки зрения. Колебательное взаимодействие, определяющее динамику диссоциации, изучено в рамках двух моделей. В модели I предполагается, что антисимметричные колебания возбуждаются из-за резонанса Ферми и сильной аугармоничности, а в модели II этот эффект связывается с вибронным взаимодействием. Модель II лучше объясняет эксперим. данные. См. также реф. 12Д122. А. Дементьев

предиссоц.

ф. 1974

№12



XU-6263

1974

83752c Excited states of gaseous ions. V. Predissociation of the water(+) ion. Lorquet, A. J.; Lorquet, J. C. (Inst. Chim., Univ. Liege, Liege, Belg.). *Chem. Phys.* 1974, 4(3), 353-67 (Eng). The previously obtained (J. C. Leclerc, et al., 1974) potential-energy surfaces were used to make a vibrational anal. of the photoelectron band of the  $\tilde{B}$  state of  $\text{H}_2\text{O}^+$  and  $\text{D}_2\text{O}^+$ . This gave the vibrational frequencies of the  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{D}_2\text{O}^+$ , and  $\text{HDO}^+$  ions, as well as a vibrational assignment of the peaks. The  $\text{H}_2\text{O}^+$  ion in its  $\tilde{B}^2B_2$  state has a OH bond length of 1.12 Å and a valence angle of 78°. To describe the unimol. fragmentation process, a distinction was introduced between the totally sym., optically active vibrational modes, and the antisym. modes which are coupled to the continuum. The former are supplied with photon or electron impact energy, but only the latter are chem. efficient. The dynamics of the dissocn. process depends therefore on the couplings among normal modes. This was studied in the framework of 2 models. In Model I, it is as-

(+2) ☒

C.A. 1974. 81. N14

sumed that, as a result of the anharmonicity of the potential-energy surface, only even overtones of the antisym. vibration are excited by Fermi resonance. In Model II, excitation of the odd overtones is provided by vibronic coupling. Model II agrees better with expt. than Model I. Calcd. and exptl. results were compared on the following points: isotopic shift on the appearance potential of  $\text{OH}^+$  and  $\text{OD}^+$  ions, shapes of the photoionization curves, fragmentation pattern with 21-eV photons, presence of a unimol. metastable transition, prodn. of  $\text{O}^+$  ions. All the vibrational levels situated above the dissocn. asymptote are totally predissocd. Autoionization in this case contributes only to the formation of mol.  $\text{H}_2\text{O}^+$  ions, and not to that of the  $\text{OH}^+$  fragments. For 21-eV electrons, the contribution due to direct ionization is  $\sim 25\%$  of the total cross section, the rest being due to autoionization.

$H_2S^+$

$H_2O^+$

\* 3-5167

ВФ-Х1-4045

1974

10 Д218. Неэмпирические МО расчеты электронного строения  $H_2S^+$  и  $H_2O^+$ . Sakai H., Yamabe S., Yamabe T., ~~Fukui K.~~, Kato H. Ab initio MO calculations of the electronic structures of  $H_2S^+$  and  $H_2O^+$ . «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 4, 541—545 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в миним. базисе слэтеровского типа, где каждая слэтеровская ф-ция представляется линейной комбинацией трех гаус-

ш.н;  
геометрич

Ф. 1974. № 10





совских ф-ций, в неограниченном хартри-фоковском приближении исследовано электронное строение катион-радикалов  $\text{H}_2\text{S}^+$  и  $\text{H}_2\text{O}^+$  в состояниях  $^2B_1$ ,  $^2A_1$  и  $^2B_2$ . Длины связей  $\text{H}-\text{S}$  и  $\text{H}-\text{O}$  принимались равными 1,336 и 1,0 Å соответственно. Вычислены полные энергии, равновесные углы, энергетич. барьеры по отношению к линейной молекуле, силовые постоянные, колебательные частоты и энергии 0—0-переходов. Показано, что оптимальные углы катионов в состоянии  $^2B_1$ , равные  $97,4^\circ$  ( $\text{H}_2\text{S}^+$ ) и  $111,1^\circ$  ( $\text{H}_2\text{O}^+$ ) хорошо согласуются с эксперим. данными. Энергетич. барьеры в состоянии  $^2B_1$  равны 3,50 для  $\text{H}_2\text{S}^+$  и 1,55 эв для  $\text{H}_2\text{O}^+$  (эксперим. значение для  $\text{H}_2\text{S}^+ - 2,5$ ). Силовые постоянные и колебательные частоты равны 0,615 мдин/Å и 1480  $\text{см}^{-1}$  для  $\text{H}_2\text{S}^+(^2B_1)$  и 0,868 и 1810 для  $\text{H}_2\text{O}^+(^2B_1)$ . Расчет среднего значения оператора  $\langle \hat{S}^2 \rangle$  показал, что все состояния являются чисто дублетными. В. А. Корсунов

40911.7258  
A, TC

$H_2O^+$  38226 02  
(список) \*

1974  
4-6329

*оттиски 2981*  
Wehinger P.A., Wyckoff S., Herbig G.H.,  
Herzberg G., Lew H.  
Identification of  $H_2O^+$  in the tail of  
comet Kohoutek (1973f).

"Astrophys. J.", 1974, 190, N 1, Part 2,  
L43-L46  
(англ.)

0189

152 156

181

ВИНИТИ

\*4-10579

1975

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

min.

pacem

84: 36802m Investigation of the  $B^2B_2$  state of water(+) ion using valence-bond techniques. Balint-Kurti, G. G.; Yardley, R. N. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 36(3), 342-4 (Eng). Ab initio valence-bond calcs. were performed on the low-lying states of  $H_2O^+$ , with special attention being focused on the  $B^2B_2$  state of the ion. The calcd. potential energy surface for the  $B^2B_2$  state is in qual. agreement with several previously published MO orbital calcs. in predicting an equil. angle of  $\sim 60^\circ$ . This prediction is, however, inconsistent with the most recent interpretation of the high-resolution photoelectron spectrum of  $H_2O$ . Examn. of the potential energy surfaces for geometries which have been distorted from  $C_{2v}$  symmetry indicates that the  $B^2B_2$  and  $A^2A_1$  states are strongly coupled by the asymmetric stretching motion of the mol. ion. The presence of such a coupling supports the interpretation of the  $H_2O$  photoelectron spectrum which invokes excitation of the asymmetric stretching vibration of the ion.

0276-17-4730  
B9-17-4730

C. A. 1976 84. N6

$H_2O^+$

В91-Х1-4730

1975

строение,

7 Б19. Исследование  $B^2B_2$ -состояния  $H_2O^+$  методом валентных схем. Balint-Kurti G.-G., Yardley R. N. Investigation of the  $B^2B_2$  state of  $H_2O^+$  using valence — bond techniques. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 36, № 3, 342—344 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода валентных схем рассмотрены состояния  $X^2B_1$ ,  $A^2A_2$  и  $B^2B_2$  молек. иона  $H_2O^+$ . Атомные орбитали  $s$ - и  $p$ -типов с включением диффузных  $p$ -орбиталей представлены линейными комбинациями гауссовых функций. Для устранения погрешностей, связанных с неточными значениями энергии составляющих атомов, вычисляемых с данным базисом, использован ортогонализированный метод Моффита. Отмечен значительный вклад структуры  $O-(^2P^0)H^+H^+$  при расчете рассмотренных состояний. При фиксированной дли-

Х1976 N7

не связи ОН, равной 1,15 А, потенциальная кривая состояния  $B^2B_2$  имеет минимум при значении угла между связями  $\theta=60^\circ$ , что не согласуется с данными, полученными при обработке фотоэлектронных спектров  $H_2O$ . Продемонстрировано сильное взаимодействие состояний  $A^2A_2$  и  $B^2B_2$  в окрестности точки пересечения потенциальных кривых  $\theta=71,5^\circ$  при искажении  $C_{2v}$ -симметрии за счет антисимм. колебаний молекулы. Это заключение подтверждает интерпретацию фотоэлектронных спектров  $H_2O$ , согласно к-рой несимметрич. колебательное движение приводит к возбуждению  $H_2O^+$ .

А. В. Немухин

50721.4245

TC, Ch, Ph

29864

 $H_2O^+$ 

1975

\*4-9475

Blustin Peter H.

Linnett John W.

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

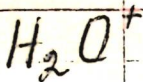
0413

ВИНИТИ

379 382

405

1975

кв. мех.  
расчет

4 Д141. Исследование  $\tilde{B}^2B_2$ -состояния  $\text{H}_2\text{O}^+$  методом валентных схем. Balint-Kurti G. G., Yardley R. N. Investigation of the  $\tilde{B}^2B_2$  state of  $\text{H}_2\text{O}^+$  using valence-bond techniques. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 36, № 3, 342—344 (англ.)

Неэмпирическим методом валентных схем рассчитаны  $\tilde{X}^2B_1$ ,  $\tilde{A}^2A_1$ ,  $\tilde{B}^2B_2$  состояния иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . В базис были включены  $1s$ -,  $2s$ -,  $2p$ -орбитали атома О и  $1s$ -орбиталь атома Н, представленные в виде суперпозиции пяти гауссовых ф-ций, а также диффузные  $p$ -орбитали атома О. Основное внимание уделено  $\tilde{B}^2B_2$ -состоянию, найденные характеристики поверхности потенц. энергии кото-

Ф1976 N4

рого (равновесные валентный угол и длина связи) оказались в хорошем согласии с рассчитанными ранее методом МО. Однако это совпадение противоречит интерпретации фотоэлектронных спектров  $\text{H}_2\text{O}$ , свидетельствующей о том, что валентный угол при ионизации в  $\tilde{B}^2B_2$ -состояние изменяется мало. В  $\tilde{B}^2B_2$ -состоянии вблизи минимума потенц. энергии имеется пересечение с термом  $A^2A_1$ , которое в  $C_s$ -симметрии превращается в квазипересечение. Вблизи этой области  $B_2$ - и  $^2A_1$ -состояния смешиваются антисимметричными валентными колебаниями. Отмечается возможность возбуждения этих колебаний при фотонионизации воды. А. Зембеков



51209.6777

96200

1975

TC, Ph, Ch

 $H_2O^+$ 

4-10833

Eland J.H.D. The predissociations  
of water ions. "Chem. Phys.", 1975,  
11, N 1, 41-47

(англ.)

0520 ПИК

481 485

ВИНИТИ

50604.433

Ch, TC

Докл. 21.07.75

63253

H<sub>2</sub>O +

1975

4059

Figeys H. P., Geerlings P., Van Alsenoy C. A self-consistent field molecular orbital theory with "intermediate neglect of differential overlap", based on the atomic valence state concept. "Bull. Soc. chim. belg.", 1975, 84, № 3, 145-158

(англ.)

358 358

370

0378

ПЧК

ВИНИТИ



1975

112 Б86. О применении теории характеристических частот к расчету колебаний молекул  $\text{XY}_2$  с легкими концевыми атомами. Годнев И. Н., Ушанова Н. И., Александровская А. М. «Тр. Иванов. хим.-технол. ин-та», 1975, вып. 18, 34—37

Рассмотрена применимость одного из вариантов приближенных ф-л (т. н. случай  $K_{11}$  (макс.) для расчета силовых постоянных молекул типа  $\text{XY}_2$  с легкими концевыми атомами. Показано, что из условия  $D_{21} \approx 0$ , где  $D_{21}$  — элемент блока симметрии  $A_1$  матрицы полного взаимодействия в координатах симметрии, вытекает приближенная характеристичность колебания  $\nu_1(A_1)$  по форме и частоте. Обоснована справедливость обратного утверждения. Приведена соотв-щая логич. схема связи этих утверждений. Ф-лы приближения  $K_{11}$  (макс.) применены для предсказания силовых постоянных и частот нормальных колебаний иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Ю. Н. Панченко

(Di)

сил. пост.

(+1) ☒многоэт.  
мол-161☒

X 1976 N 12

$H_2O^+$

1975

Д.и.с.с.  
но.с.

85: 113930b Use of a theory of characteristic frequencies for calculating vibrations of  $XY_2$  molecules, with light terminal atoms. Godnev, I. N.; Ushanova, N. I.; Aleksandrovskaya, A. M. (USSR). *Tr. Ivanov. Khim.-tekhnol. In-ta* 1975, (18), 34-7 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1976, Abstr. No. 12B36. Title only translated.

① расчет частот. мод. Тупа  $XY_2$

С.А. 1976, 25 № 16 ●

р. м. н.

$\text{OH}_2^+$

1975

Pople J. A.

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

(all  $\text{H}_2$ ; III)

энергия  
координат.

XI-4385

1975

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O (кб. max packet)

Smith J.A., Jørgensen P., Öhrn Y.,  
J. Chem. Phys., 1975, 62, n° 4, 1285-1288

10

Рнелф, 1975, 89/57

$H_2O^+$

1975

Кб. мех.  
пачем

87531j Complex of orbital programs for nonempirical calculations of molecules as the basis of linear combinations of junctionfree Gaussian functions. Zhogolev, D. A. (Inst. Fiz. Khim. im. Pisarzhevskogo, Kiev, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1975, 16(2), 327-9 (Russ). Programs Orbital 1 - Orbital 8, used for nonempirical calcns. of mols. on the basis of linear combinations of junctionfree Gaussian functions by which Slater or hydrogenlike functions of the type  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ , ...,  $3d$ , and  $4s$  are approximated, are briefly described. Results of the calcns. for  $H_2O^+$ ,  $H_2O^-$ ,  $H_2O$ ,  $CO_2$ , and  $N_2O$  by these programs are compared.

L. A. Pavlatova

(+1)



C. A. 1975, 83 N 10

$H_2O^+$

\* 4-15578

1976

Bischof P.

(J)

J. Amer Chem Soc  
1976, 98, N22, 6844-49



$H_2O^+$

4-12239

1976

(revised)  
9/15/76  
C.A. 1976

84:171881e Ro-vibronic structure in the photoelectron spectra of water  $H_2O$ ,  $D_2O$  and  $HDO$ . Dixon, R. N.; Duxbury, G.; Rabalais, J. W.; Asbrink, L. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Mol. Phys.* 1976, 31(2), 423-35 (Eng) Using He 584 Å excitation, the high resolution photoelectron spectra of the 3 lowest transitions of  $H_2O$ ,  $D_2O$  and  $HDO$  were measured and analyzed. Characteristic rotational envelopes are assigned to particular combinations of vibronic sub-bands. Results are compared with optical spectra and the  $^2A_1$  state of  $H_2O^+$  is shown to have a linear conformation. The vibrational structure of the  $^2B_2-^1A_1$  transition arises from a change ( $\sim 0.2$  Å) in the OH bond length due to vibronic interactions between the  $^2B_2$  and  $^2A_1$  states.

C.A. 1976 84 N24

#4-15601

1976

 $H_2O^+$ 

4 Д133. Теоретическое изучение атмосферных молекул: результаты расчета потенциальных поверхностей для состояний  $X^2B_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$  иона  $H_2O^+$  методом ССП и с учетом корреляционных поправок. Fortune P. J., Rosenberg Bruce J., Wahl Arnold C. Theoretical studies of atmospheric molecules: SCF and correlated potential surface results for the  $X^2B_1$  and  $B^2B_2$  states of  $H_2O^+$ . «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 6, 2201—2205 (англ.)

М.Н.

В приближениях метода ССП и многоконфигурац. метода ССП (ССП—КВ) проведены расчеты поверхности потенц. энергии для состояний  $X^2B_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$  иона  $H_2O$ . Пять валентных орбиталей иона  $1a_1$ ,  $2a_1$ ,  $1b_2$ ,  $3a_1$  и  $1b_1$  находились методом ССП, 2 валентные орбитали  $4a_1$  и  $2b_2$ , а также 3 виртуальные орбитали  $5a_1$ ,  $4b_2$ ,  $2b_1$  получены методом ССП—КВ, причем расчет этих орбиталей повторялся многократно с включением каждый раз

Ф. 1977 N 4

X1-5167

наиболее важных конфигураций. Конечные результаты получены с учетом 99 конфигураций для конформаций с симметрией  $C_s$  и 58 и 53 конфигураций для состояний  $X^2B_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$ , соответственно, при конформациях с симметрией  $C_{2v}$ . На основе полученных значений полной энергии рассчитаны силовые постоянные и частоты колебаний в обоих изученных состояниях  $H_2O^+$ . Для основного состояния  $^2B_1$  вычисленные колебательные постоянные хорошо согласуются с эксперим. значениями.

И. Топол



$H_2O^+$

1976

(un, secret)

#4-15601

85:168986 Theoretical studies of atmospheric molecules: SCF and correlated potential surface results for the  $X^2B_1$  and  $\tilde{B}^2B_2$  states of water(+). Fortune, P. J.; Rosenberg, Bruce J.; Wahl, Arnold C. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(6), 2201-5 (Eng). SCF and multiconfiguration SCF/configuration interaction (MCSCF/CI) calcns. were carried out on the  $X^2B_1$  and  $\tilde{B}^2B_2$  states of  $H_2O^+$ . Vibrational analyses based on 2nd order perturbation theory were also performed. Computed equil. geometries, force consts., and low-lying vibrational frequencies for both the SCF and MCSCF/CI surfaces are reported.

N-5167

C.A. 1976 85 N22

$H_2O^+$

6 Б62. Теоретическое изучение молекул атмосферы: результаты расчета потенциальных поверхностей состояний  $X^2B_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$  иона  $H_2O^+$  в приближении ССП и с учетом корреляционных поправок. Fortune P. J., Rosenberg Bruce J., Wahl Arnold C. Theoretical studies of atmospheric molecules: SCF and correlated potential surface results for the  $X^2B_1$  and  $\tilde{B}^2B_2$  states of  $H_2O^+$ . «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 6, 2201—2205 (англ.)

геометр,  
 $D_e; E_i$

Для двух электронных состояний  $X^2B_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$  иона  $H_2O^+$  рассчитаны поверхности потенциальной энергии в приближениях ССП и конфигурац. взаимодействия (с учетом до 99 конфигураций). Валентные занятые МО получены при расчете методом ССП, виртуальные валентные МО  $4a_1$  и  $2b_2$  и виртуальные атомоподобные МО — многоконфигурац. методом ССП, причем этот расчет повторен многократно с включением на каждом шаге наиболее существенных конфигураций. На основе полученных значений полной энергии рассчитаны равновесные геометрич. конфигурации, силовые постоянные, гармонич. частоты колебаний и энергии низших колебательных состояний  $H_2O^+$ .

А. Дементьев

1976

10951-54

10915-11

1-1976  
№ 6

ном. 24. нов-срм

60528.72 16  
Ch, Ph, TC, MGU

40892

1976

$H_2O^+$

74-13903

Harris H.H., Leventhal J.J.

Ultraviolet emission in  $O^+-H_2$   
reactive scattering.

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 8, 3185-3191  
(англ.)

0633 ЛМК

601 608 6 2 5

ВИНИТИ

$H_2O^+$

XI-5174

1976

4 Д367. Электронный спектр  $H_2O^+$ . Lew H. Electronic spectrum of  $H_2O^+$ . «Can. J. Phys.», 1976, 54, № 20, 2028—2049 (англ.; рез. франц.)

Спектр испускания иона  $H_2O^+$  сфотографирован в области 4000—7500 Å с эффективным разрешением 175 000 и 90 000. Проанализированы полосы расположенной в этой области системы  $H_2O^+ (\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1)$ . Определены точные значения вращательных постоянных для трех первых уровней деформационного колебания иона в основном состоянии. Для угла  $H-O-H$  и длины связи  $O-H$  в основном состоянии иона  $\tilde{X} (0,0,0)$  получены значения 110,46 Å и 0,9988 Å. Приведены таблицы линий. Отмечено, что некоторые из них наблюдались в свечении хвостов комет. Предсказаны некоторые микро-волновые, и ИК-линии, могущие представлять астрофизич. интерес. Описана конструкция специально разработанного источника излучения. Библ. 32.

В. С. Иванов

электр.  
спектр

М.П.

Ф. 1977 N 4

оттиски 4954

$H_2O^+$

отт. 4954

1976

8 Б138. Электронный спектр иона  $H_2O^+$ . Lew H. Electronic spectrum of  $H_2O^+$ . «Can. J. Phys.», 1976, 54, № 20, 2028—2049 (англ.; рез. франц.)

В области 3400—9000 Å на решеточном спектрографе с дисперсией 1,2—2,4 Å/мм измерен спектр излучения иона  $H_2O^+$ , возбужденного в электрич. разряде. Идентифицирована колебательно-вращательная структура системы полос электронного перехода  $\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1$ , расположенной в области 4000—7500 Å: приведены волновые числа всех идентифицированных переходов (наблюдались полосы переходов с  $v_2' \leq 15$ ). Определены значения вращательных и кватертичных центробежных постоянных и постоянных спин-вращательного и спин-спинового взаимодействия для различных колебательных состояний основного электронного уровня. Для структурных параметров  $H_2O^+$  в состоянии  $\tilde{X}$  получено: ОН 0,9988 Å НОН 110,46°. Вычислены частоты микроволновых и ИК-переходов, к-рые могут представлять астрофиз. интерес.

М. Р. Алиев

м.п.

1977/5-11

л. 1977. №8



H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

XI-517ef

1976

85: 200274j Electronic spectrum of water(+) ion. Lew, H. Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1976, 54(20), 2028-49 (Eng). Many bands of the  $\bar{A} \ ^2A_1 - \bar{X} \ ^2B_1$  electronic emission spectrum of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, occurring in the wavelength region 4000-7500 Å, were analyzed. These include bands obsd. in the tails of comets. The wavelengths and wave nos. of all assigned lines are tabulated. Accurate rotational consts. for the 1st 3 bending vibrational levels of the ground state are given, as well as energy levels in the upper and lower electronic states. The O-H bond distance and the H-O-H angle in the  $\bar{X} \ (0,0,0)$  level are 0.9988 Å and 110.46°, resp. Some predicted microwave and ir lines that may be of astrophys. interest are included.

Д.А. Черепин,  
список,  
направ.

4954  
Dumuch

C.A. 1976. 8.5 N26

70202.467

75542

\*4-16527  
1976

A, TC

 $H_2O^+(X^2A)$  \* 4-16527Pétro poulos Basile, BotterRené. Interprétation du spectre de la  
comète Kohoutek au moyen des facteurs  
de Franck-Condon calculés par la  
méthode Rydberg-Klein-Rees. "C. r.Acad. sci.", 1976, 283, № 12, B351-B353  
(франц., рез. англ.)

773 775 796 0804 фнк ВИНТИ



X-11857

1976

15 Б31. Электронная и геометрическая структура ряда возбужденных состояний  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Rouse Robert A. Electronic and geometric structure of some excited state of  $\text{H}_2\text{O}^+$ . «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 3, 1244—1245 (англ.)

геометр;  
и.п.

Методом МО ЛКАО ССП рассчитаны энергии ряда возбужденных состояний иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Использован базис гауссовых функций (4s/1p), сгруппированный в (2s/1p) для атома Н и (10s/5p/1d), сгруппированный в (5s/13p/1d) для атома О. Найдены равновесные геометрич. конфигурации для состояний  $\bar{b}^4A_2$ ,  $\bar{a}^4B_1$ ,  $\bar{c}^4A_2$ ,  $^2B_2$ . Отме-

X, 1976, 15.

чено, что вследствие пересечений и квазипересечений этих термов при вариации угла Н—О—Н корреляц. диаграммы, построенные с использованием значений энергий возбужденных состояний  $\text{H}_2\text{O}^+$  в конфигурации, соотв-щей вертикальному переходу  $\text{H}_2\text{O}(^1A_1) \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+$ , могут приводить к неправильным представлениям о путях р-ций в этой системе.

А. Зембеков

$H_2O^+$

\* 45 - 11857

1976

Кб. илх.  
факт

84:111928n Electronic and geometric structure of some excited states of water(+). Rouse, Robert A. (Dep. Chem., Univ. Missouri, St. Louis, Mo.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(3), 1241-5. (Eng). The mol. energies of  $H_2O^+$  were calcd. using a basis set of (10s/5p/1d) contracted to (5s/3p/1d) on O and (4s/1p) contracted to (2s/1p) on H. The results were considered in terms of their effects on the equil. geometries of  $H_2O^+$ .

84:111929p Comment on "Inelastic scattering in atom-diatom molecule collisions. I. Rotational transitions in the sudden approximation". Pack, Russell T. (Dep. Chem., Brigham Young Univ., Provo, Utah). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(3), 1257-8. (Eng). A polemic. The approxs. used by d. R. Stiefen U. *J. Chem. Phys.*, 1974, 61, 5096) are in conflict with each other thus resulting in a theory which is invalid.

C. A. 1976 84 N16

60421.2030

ТС, А

$H_2O^+$  *интерм.  
наблюдения*  
38226  
*в см. планет*

1976

4285

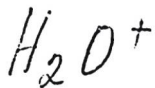
Wyckoff S., Wehinger P.A. Molecular  
ions in comet tails.

"A trophys. J.", 1976, 204, N 2, Part 1,  
604-615 (англ.)

0608 мм

579 585 598

ВИНИТИ



1977

Botter R; et al.

promos.  
enerk,  
zeacifas  
acacays

J. Electron. Spectrosc.  
Relat. Phenom., 1977,  
12 (1), 55-66.

(see.  $\text{HDO}^+$ ; III;

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

ommuc' 5427 1977

Heebst E. et al.

uicnonn.ear.  
rag.

Astrophys. J.

1977, 215, 503-10



$H_2O^+$

ommuen 5771

1977

Huntress W.T., Jr.

Astrophys. J. Suppl. Ser.,  
1977, 33, (40), 495-514.

( $AH^+, y$ )

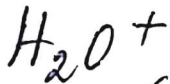
(cen.  $H^+$ ; III)



ommccc 5513 1977

$E(2p, 3p)$   
концентр.  
 $AH^+; Ae^-$

Kari R. E. et. al.  
J. Amer. Chem. Soc.  
1977, 99, N 14, 4539-  
45



Лоттис 5905 1974  
обзор.

(см. сборник в искорку едессинев)

Sunner F.

вод-мол,  
р-цис,

нонзагис

Reactions of gas-  
phase ions studied  
by the charge trans-  
fer technique.

Lund, 1974,

(Sweden.)

$H_2O^+$

1978

Bell Stephen

J. Chem. Phys. 1978,  
68(7), 3014-24.

кв. мек.  
пакет,  
эмфизит

(см.  $H_2O$ ; III)

1978

$\text{CO}^+$

$\text{H}_2\text{O}^+$

вращат.  
структур.  
переход

1-0

ж. 1979  
н. 2

2 Б191. Индуцированные лазером электронные спектры поглощения  $\text{CO}^+$  и  $\text{H}_2\text{O}^+$  в ионных пучках, измеренные методом молекулярно-ионных реакций. Carrington Alan, Milverton David R. J., Roberts Philip G., Sarre Peter J. Laser-induced electronic absorption spectra of  $\text{CO}^+$  and  $\text{H}_2\text{O}^+$  in ion beams detected through ion-molecule reactions. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 12, 5659—5661. (англ.)

Методом молекулярно-ионных р-ций измерена вращательная структура полосы 1—0 перехода  $A^2\Pi-X^2\Sigma\text{CO}^+$  и полосы 0,12,0—000 перехода  $A^2A_1-X^2B_1\text{H}_2\text{O}^+$ . Ионы  $\text{CO}^+$  и  $\text{H}_2\text{O}^+$ , образующиеся при ионизации  $\text{CO}$  и  $\text{H}_2\text{O}$  электронным ударом, ускорялись до энергии 5 экв и после магнитного масс-филтра попадали в сетчатую трубку, на к-рую накладывалось варьируемое напряжение. Вдоль трубки пропусклось модулированное излучение  $\text{Ar}^+$ -лазера (457,9 нм), к-рое поглощалось ионами  $\text{CO}^+$  и  $\text{H}_2\text{O}^+$ . За трубкой помещали систему линз

(+P) [X]

замедляющих ионы до энергии 1—50 эв, после чего ионы попадали в камеру, заполненную нейтр. газом ( $\text{H}_2$ ). Ионы  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$ ,  $\text{C}^+$ ,  $\text{O}^+$ ,  $\text{CO}^+$  и  $\text{HCO}^+$ , образующиеся в результате молекулярно-ионных р-ций  $\text{CO}^+$  и  $\text{H}_2\text{O}^+$  с  $\text{H}_2$ , регистрировались на масс-спектрометре. Измерялась величина тока втор. ионов  $\text{HCO}^+(\text{CO}^+)$  и  $\text{H}_3^+(\text{H}_2\text{O}^+)$ . Сканирование спектра осуществляли путем варьирования напряжения на трубке, приводящего к перестройке доплеровского контура линий ионов при фиксированной частоте поглощаемого излучения.

В. М. Ковба

1978

 $H_2O^+$  $CO^+$ J. Chem. Phys.  
1978, 68(12), 5659-61

①

A

89: 120086s Laser-induced electronic absorption spectra of carbon monoxide(+) and water(+) in ion beams detected through ion-molecule reactions. Carrington, Alan; Milverton, David R. J.; Roberts, Philip G.; Sarre, Peter J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton/Hants., Engl.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(12), 5659-61 (Eng). Rotational components of electronic transitions were obsd. in  $CO^+$  and  $H_2O^+$  by using ion-mol. reactions to monitor the changes in internal state. For a  $CO^+$  beam reacting with  $H_2$  laser excitation causes in  $H^+$ ,  $H_2^+$ , and  $H_3^+$  peaks. The most consistent interpretation is that rapid charge transfer to  $H_2$  occurs for the laser-excited  $CO^+$  ( $A^2\Pi$ ) ions, thus increasing the  $H_2^+$  (and  $H^+$ ,  $H_3^+$ ) intensities but reducing the total  $CO^+$  flux. The  $HCO^+$  redn. is then simply a consequence of the reduced  $CO^+$  flux. A rotational component of the  $\tilde{A}^2A, \leftarrow \tilde{X}^2B$ , electronic transition of  $H_2O^+$  was detected. In the reaction  $H_2O^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + OH$  the  $H_2O^+$  absorption lines was obsd. by monitoring the  $H_3^+$  product ions.

C.A., 1978, 89, 114

1978



поверхн.  
потенц.  
энергии

10 Д117. Поверхность потенциальной энергии для  $\text{H}_2\text{O}^+$ : линейный подход. Chambaud G., Millie Ph., Levy B. Potential energy surface of  $\text{H}_2\text{O}^+$ : linear approach. «J. Phys.», 1978, B11, № 7, L211—L215 (англ.)

Выполнены расчеты поверхности потенц. энергии (ППЭ) системы  $\text{H}_2\text{O}^+$  при линейном расположении атомов. Расчеты проводились методом ССП с учетом конфигурац. взаимодействия (КВ): предварительно строилась ф-ция  $\Psi_0$ , содержащая основную конфигурацию и конфигурации, входящие в ф-цию метода КВ с коэф.  $|c_i| \geq 0,015$ . На 2-м этапе методом теории возмущений решалась задача о полном КВ в пространстве ф-ций, содержащих все одно- и двукратно возбужденные относительно  $\Psi_0$  конфигурации. Расчеты производи-

ср. 1978, N10



лись в сжатом гауссовом базисе типа  $[6s4p2d/3s1p]$ . Такой базис обеспечивает точность, близкую к хартри-фовскому пределу; по оценке авторов, расчет позволяет получить около 75—35% энергии корреляции. Рассчитанная теплота реакции  $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$  равна  $-0,0075$  ат. ед. (эксперим. значение  $-0,0081$  ат. ед.). На пути этой реакции активационный барьер отсутствует: обнаружен минимум при  $R(O-H) = 2,25$  и  $R(H-H) = 2,0$  ат. ед. глубиной 12 ккал/моль (относительно энергии  $O^+ + H_2$ ). Это указывает на возможность существования линейной системы  $O \dots H \dots H$  в связанном состоянии.

В. И. Барановский

$H_2O^+$

20 Б25. Поверхность потенциальной энергии  $H_2O^+$ .  
Линейная структура. Chambaud G., Millie Ph.,  
Levy B. Potential energy surface of  $H_2O^+$ : linear ap-  
proach. «J. Phys.», 1978, B11, № 7, 2211—2215 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с использо-  
ванием расширенного базиса сгруппированных гауссовых  
функций рассчитана потенциальная поверхность систе-  
мы  $H_2O^+$  при линейной геометр. структуре. Резуль-  
таты расчета использованы для выяснения возможно-  
сти протекания р-ции  $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$  при низких  
т-рах. Указано, что при нелинейной ( $C_{2v}$ ) configura-  
ции системы такая р-ция потребует преодоления высо-  
кого энергетич. барьера. Получена потенциальная кри-  
вая вдоль предполагаемого пути р-ции при линейной  
конфигурации (расстояние H—H оптимизировалось при  
каждом значении расстояния O—H). Барьер на этой  
кривой отсутствует; переходному состоянию ( $O \cdots H \cdots$   
 $\cdots H$ )<sup>+</sup> отвечает минимум, лежащий на 12 ккал/моль  
ниже уровня исходных реагентов ( $O^+ + H_2$ ) и на  
7,4 ккал/моль ниже уровня продуктов р-ции ( $OH^+ +$   
 $+ H$ ). Сделан вывод об осуществимости рассмотренной  
р-ции в межзвездном газе и о возможности существо-  
вания устойчивой частицы  $H_2O^+$ . А. В. Абраменков

поверхн.  
потенц.  
энергии

2, 1978,  
N 20

1978

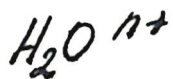
 $H_2O^+$ 

89: 136150u Potential energy surface of water(1+): linear approach. Chambaud, G.; Millie, Ph.; Levy, B. (Lab. Chim., Ec. Norm. Super. Jeunes Filles, Montrouge, Fr.). *J. Phys. B* 1978, 11(7), L211-L215 (Eng). A SCF CI calcn. was used to det. the potential energy surface of  $H_2O^+$  in  $C_{2v}$  symmetry. No energy barrier was found for  $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ . The energy of the intermediate species  $(O...H...H)^+$  was 12 kcal/mol below the energy of the input products and can occur at temps. estd. for interstellar clouds.

k.b. accx.  
fact



C.A., 1978, L9, N16



1978

Takahata Y.

геометр.  
молекулы.

Chem. Phys. Lett., 1978,  
59, n3, 472-474.



) III

1978

Yoon K.H., et al.

$H_2O^+$

J. Vac. Sci. Technol. 1978,

(A.P.)

15(3), 1198-9



(Cur C<sup>+</sup>; III)

$H_2O^+$

Lommuu 8875

1979

Barrow W. L.

кв. уч. Chem. Phys. Lett., 1979,  
печет, 68 (1), 170-74

печет.  
рецепт

(см.  $C_2H_4$ ; III)

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

(summa 7946)

1949

Wallensky J.

Кв. мех.  
раств.

J. Mol. Struct., 1949, 52,  
n 2, 281-291.

Др. Кондратьев.

(см. H<sub>2</sub>O; III)

$\text{OH}_2^+$

[enumera 9875]

1980

Casida M.E., et al

с. н.  
номер.

Isr. J. Chem., 1980, 19,  
N1-4, 127-31.

●  $(\text{CuBH}_2)\text{III}$



$H_2O^+$

ammonia 9456

1980

Gerard-Alu M.

nomeres.  
steepus  
новерхлюсми

J. Phys. B: Atom. and  
Mol. Phys., 1980, 13,  
L 131 - L 132.

Comment on "Potential energy  
surface of  $H_2O^+$ ..."

Ommereck 9996

1980

$H_2O^{2+}$

$H_2O^+$

Glidenwell C.

молеку.  
номеру

J. Mol. Street. 1980,  
65, 231-8

$H_2O^+$

1979

Hall Michael B.

Int. J. Quantum Chem.,  
Ei; a.n. Quantum Chem. Symp.  
N13, 195-203.

•  
ccu  $H_2O$ ; 11

$H_2O^+$  [XII-2048] 1980

Bruna P. J., Hirsch G.,  
et al.

равнее  
номер,  
структ.,  
61;

Mol. Phys., 1980, 40,  
N3, 521-537.

Р.Ж.ф., 1980, 12D/49.

$H_2O^+$

$C_2H_4$

confyrt.  
Napier.  
M.N.

(71) ☒

94:74240r Photoelectron spectra and Franck-Condon calculation for some isotopically substituted molecules. Carrier, Jacqueline (CEN-Saclay, CEA, Gif-sur-Yvette, Fr.). Report 1980, CEA-N-2127, 137 pp. (Fr). Avail. INIS. From INIS Atomindex 1980, 11(20), Abstr. No. 554484. The 1st band of the photoelectron spectra of  $H_2O$ ,  $C_2H_4$  and of the corresponding deuterated mols. was recorded. Taking the geometry of the ion as parameters, the Franck Condon factors for the ionization of water and ethylene mols. were calcd. The geometry of the ions (ground state) was detd. by comparison of the calcd. results with the corresponding photo-electron spectra. The geometry for  $H_2O^+$  is  $r(OH) = 1.00 \text{ \AA}$   $\angle HOH = 110^\circ$ . The vibrational structure of the first band of the ethylene spectra shows that the 2 normal modes  $\nu_2$  (sym. C-C stretching) and  $\nu_3$  (sym. HCH bending) are excited simultaneously. The calens. of Franck Condon factors shows that when the C-C bond length or the HCH angle  $2\alpha$  are modified both  $\nu_2$  and  $\nu_3$  modes are excited with an intensity ratio which varies rapidly with  $\alpha$ , and with the degree of isotopic substitution. These results show that the assignment given in the previous publications for  $C_2H_4$  has to be reversed:  $\nu_2 = 1375 \text{ cm}^{-1}$ ;  $\nu_3 = 1225 \text{ cm}^{-1}$ . For  $R = 1.41 \text{ \AA}$ ,  $2\alpha =$

C.A. 1981-94 N10

116.4° and the torsional angle  $2\epsilon = 17^\circ$ , the calcn. reproduces correctly the intensities obsd. in the photoelectron spectra of the 7 isotopic derivs. of  $C_2H_4$ .



$H_2O^+$

16 Б1062. Замечания к статье «Поверхность потенциальной энергии  $H_2O^+$ : линейная конфигурация». G é -  
rard-A in M. Comment on «Potential energy surface  
of  $H_2O^+$ : linear approach». «J. Phys.», 1980, B13, № 5,  
L131—L132 (англ.)

1450

Замечания  
к поверхности  
потенциальной  
энергии

Отмечается, что рассчитанная в статье (Chamb and G., Millie Ph., J. Phys. B., 1978, 11, 211—215) энергия связи комплекса  $H_2O^+$ , равная 0,32 эВ по отношению к уровню энергии продуктов в линейной р-ции  $O^+(^4S) + H_2 \rightarrow OH^+(^3\Sigma^-) + H$ , возможно содержит ошибку порядка 0,2 эВ. Эта оценка получена путем сравнения вычисленной в цитируемой работе теплоты р-ции 0,20 эВ с наиболее вероятной эксперим. величиной 0,45 эВ. Пв потенциальной энергии указанной р-ции вычислялась в приближении ССП с учетом взаимодействия конфигураций.

Е. Е. Никитин

21 1980 N16

1980

 $H_2O^+$ кв. мех,  
расчет

12 Д148. Неэмпирическое исследование поверхности потенциальной энергии для некоторых состояний катиона воды. An ab initio potential-energy surface study of several states of the water cation. Jackels Charles F. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 4873—4884 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия одно- и двукратно возбужденных конфигураций в базисе гауссовых ф-ций 9s5p1d/4s1p, сгруппированном в 4s2p1d/2s1p, исследовано электронное строение  $H_2O^+$  (I) в состояниях  $X^2B_1$ ,  $A^2A_1$  и  $B^2B_2$ . Для состояния  $^2B_1$  длина связи и валентный угол найдены равными (в скобках эксперимч. значения) 1,000 Å (1,03; 0,9988) и  $109,54^\circ$  (109,4; 110,46). В состоянии  $^2A_1$  поц линейн и длина связи найдена равной

Ф.1980 N12



0,991 А, при этом потенц. кривая очень пологая (для изменения угла на  $25^\circ$  требуется энергия лишь в  $\sim 200 \text{ см}^{-1}$ ). Для  ${}^2B_2$  получены значения 1,13 А (1,12—1,17) и  $55,7^\circ$  (эксперим. оценка 78). Для двух последних состояний структура симметрии  $C_{2v}$  отвечает минимуму, а не седловой точке. Для симметрии  $C_s$  в адиабатич. и диабатич. представлениях исследованы вибронно связанный набор состояний  ${}^2A_1\text{—}{}^2B_2$  ( $1{}^2A'\text{—}2{}^2A'$ ). Показано, что это взаимодействие возмущает низколежащие вибронные уровни состояния  ${}^2B_2$ , хотя и не может привести к нарушению симметрии  $C_{2v}$  для этой структуры. Кратко обсуждены пути диссоциации иона симметрии  $C_{2v}$  и  $C_s$  для состояния  ${}^2B_2$ . В. Л.

$H_2O^+$

3 Б30. Неэмпирический расчет поверхностей потенциальной энергии катиона воды. Jackels Charles F. An ab initio potential-energy surface study of several states of the water cation. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 9, 4873—4884 (англ.)

Методом конфигурационного взаимодействия рассчитаны Пв потенциальной энергии катиона  $H_2O^+$ . Расчет проведен с помощью двухэкспоненциального базиса гауссовых лепестковых функций, дополненного поляризац. функциями. Исследованы равновесные конформации  $\tilde{X}^2B_1$ ,  $\tilde{A}^2A_1$  и  $\tilde{B}^2B_2$ , принадлежащие группе симметрии  $C_{2v}$ . Найдено, что потенциальная Пв состояния  $^2A_1$  имеет минимум при линейной конформации иона, а потенциальная Пв состояния  $^2B_2$  имеет минимум при угле НОН  $55,7^\circ$ . Для колебательно связанных состояний  $^2A_1-^2B_2$  ( $1^2A'-2^2A'$ ), принимающих конформации симметрии  $C_s$ , расчет проведен в адиабатич. и в неадиабатич. приближениях. Показано, что хотя эта связь слишком слаба, чтобы ликвидировать минимум Пт состояния  $^2B_2$ , приходящийся на конформацию симметрии  $C_{2v}$ , она может возмущать нижние кол. уровни состояния  $^2B_2$ . Охарактеризованы два пути диссоциации иона  $H_2O^+$ , находящегося в состоянии  $^2B_2$  (группы симметрии  $C_{2v}$  и  $C_s$ ).

В. П. Дмитриев

Кв. мех.  
расчет  
пов. пот.  
энергии

Х. 1981 № 3

$H_2O^+$

ommueu 9843

1980

Zungen Ch; et al.

nomeris.  
krubae

Mol. Phys., 1980, 40  
(1), 25-63.



(all.  $NH_2$ ; III)

$\text{NH}_2$  } (om. 9845) 1980  
 $\text{H}_2\text{O}^+$  } (purer even) 6277-XI

Jungen ch., Hallin K.E.F., Merer A.F.,  
Mol. Phys, 1980, 40, v1, 65-94 (acc)

Orbital angular momentum in tri-  
atomic molecules. II. Spin and rota-  
tional fine structure effects on the  
 $\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1$  transitions of  $\text{NH}_2$  and  $\text{H}_2\text{O}^+$ .

PuRuz, 1980, 125145- LO (90)



1980

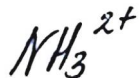
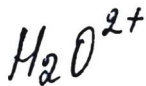
расчет  
пов. потенц.  
энергии

3 Д103. Поверхности потенциальной энергии и механизмы диссоциации молекулярных ионов. Potential energy surfaces and dissociation mechanisms of molecular ions. Lorquet J. C., Dehareng D., Sannep C., Rašeev G. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1980, 77, № 7—8, 719—724 (англ.; рез. франц.)

Обзор расчетов поверхностей потенц. энергии молекулярных ионов  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{H}_2\text{S}^+$ ,  $\text{H}_2\text{CO}^+$  и  $\text{C}_2\text{H}_4^+$ . Представлены сечения поверхностей вдоль координат реакции. Обсуждается характер взаимодействий, приводящих к диссоциации ионов по различным каналам. Библ. 38. А. И. Разников

(43) A

Ф. 1981 N 3



кв. мех.  
расчет

94: 90763u Electronic states calculation of doubly ionized water and ammonia molecules. Polezzo, Stefano; Fantucci, Piercarlo (Cent. Studio, CNR, I-20133 Milan, Italy). *Gazz. Chim. Ital.* 1980, 110(9-10), 557-9 (Eng). The total energies of the ground states and several excited states of  $\text{H}_2\text{O}^{2+}$  and  $\text{NH}_3^{2+}$ , and the double ionization potentials of  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NH}_3$  were obtained in SCF and MC-SCF calcns. Comparisons are made with other published calcns. and the existing exptl. data. The results should be useful in interpreting mol. Auger spectra.

(+1) ☒

C.A. 1981, 94, 112

$\text{DH}_2^+$

1981

Gemmell D.S.

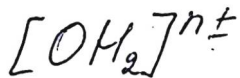
волевая,  
структура

IEEE Trans. Nucl.

Sci., 1981, 28, N2,

1168-1173.

●  
(all.  $\text{H}_2^+$ ; III)



1981

Takahata Y., et al.

In. Acad. brasil. ciên.,  
1981, 53, N 1, 93-99.(перевод  
с англ.)

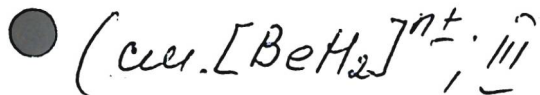




1981  
Takahata Y., et al.

An. Acad. Brasil. Ciênc.,  
1981, 53, N1, 101-107.

(гидрох.  
момент)





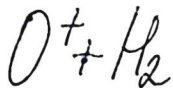
1982

Brändas Erkki J.,  
et al.

расчёт  
основного  
состояния

Int. J. Quantum Chem.  
1982, 21, N1, 259-267.

●  
(см.  $\text{H}_2\text{O}$ ; III)



C.M.M. 14107

1982

/ 97:446S9p Diatomics-in-molecules calculation of the potential energy surface of water(1+): linear approach. Ellison, Frank O.; McCandlish, Mitchel L. (Dep. Chem., Univ. Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 USA). *J. Phys. B* 1982, 15(7), L229-L234 (Eng). A diatomics-in-mols. calcn. of the potential energy surface for  $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$  yielded a 22 kcal/mol activation barrier. This is in contrast to a previous ab initio calcn. (G. Chambaud et al., 1978) in which the intermediate species  $(O...H...H)^+$  was found with respect to reactants and products.

потенс.  
поверхность

C.A. 1982, 97, 46

$H_2O^+$

1982

3 Б43. Замечание к статье: «Расчет поверхности потенциальной энергии  $H_2O^+$  методом двухатомных фрагментов в молекулах». Comment on «Diatomics-in-molecules calculation of the potential energy surface of  $H_2O^+$ ». Kuntz P. J., Sizun M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 15, L511—L514 (англ.)

Отмечено что выбранная в работе Эллисона и Мак-Кандиша («J. Phys. B., At. Mol. Phys.», 1982, 15, 229) модель для расчета поверхности потенциальной энергии ион-молек. р-ции  $O^+(^4S_u) + H_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow OH(^2\Sigma^-) + H(^2S)$  методом двухатомных фрагментов в молекулах (ДФМ) неудовлетворительно описывает область продуктов р-ции, что и является причиной расхождений данных неэмпирич. вычислений с результатами ДФМ. Миним. набор многоатомных базисных ф-ций для этой системы должен включать, по крайней мере, 4 ф-ции, отвечающие след. комбинациям одноатомных фрагментов:  $O(^3P) + H(^2S) + H^+$ ,  $O(^3P) + H^+$ ,  $H(^2S)$  и  $O^+(^4S) + H(^2S) + H(^2S)$ .

А. В. Немухин

расчет  
поверхности  
потенциальной  
энергии

X. 1983, 19, 13

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

1982

meopen.  
paeim

(97:169271c Diatomics-in-molecules calculation of the potential energy surface of water(1+). Comments. Kuntz, P. J.; Sizun, M. (Hahn-Meitner-Inst., Kernforsch. Berlin G.m.b.H., D-1000 Berlin, Fed. Rep. Ger.). *J. Phys. B* 1982, 15(15), L511-L514 (Eng). A polemic. The large discrepancy between DIM and ab initio calcs. (Ellison, F. O.; McCandlish, M. L., 1982, Chambaud, G.; et al., 1978, resp.) of the collinear potential energy surface for the reaction  $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$  is attributed to the inadequacy of the DIM model in describing the products. Consideration of available ab initio calcs. on  $OH^+$  suggest that the smallest conceivable DIM model for this reaction must include at least 4 polyat. basis functions. The difficulties inherent in comparing the behavior of different ion-mol. reactions are discussed.

C.A. 1982, 97, N 20.

$H_2O^+$

1982

11 Д248. Расчет поверхности потенциальной энергии  $H_2O^+$  методом двухатомных фрагментов в молекуле. Линейная молекулярная конфигурация. Diatomics-in-molecules calculation of the potential energy surface of  $H_2O^+$ . Linear approach. Ellison Frank O., McCandlish Mitchel L. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 7, L229—L234 (англ.)

расчет  
поверхности  
потенц.  
энергии

ср. 1982, 18,  
N 11

Методом 2-атомных фрагментов в молекуле рассчитывается поверхность потенц. энергии (ППЭ) для линейной реакции  $O^+(^4S_u) + H_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow OH(X^2\Sigma) + H$  в основном  $^4\Sigma^-$ -электронном состоянии. Учитывались три валентные структуры  $\Omega_1 \sim O^+H-H$ ,  $\Omega_2 \sim O^+-HH$ ,  $\Omega_3 \sim O^+HH$ , где штрих означает валентную связь. Для реагентов структура  $\Omega_1$  обладает миним. энергией, но ее диабатич. ППЭ является чисто отталкивательной. Для продуктов структура  $\Omega_2$  соответствует минимуму энергии и ее ППЭ характеризуется притяжением. Квазипересечение ППЭ структур  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  определяет поведение адиабатич. ППЭ системы. Вследствие этого квазипересечения ППЭ имеет потенц. барьер для реакции

$O^+ + H_2$  в линейной конфигурации высотой в 22 ккал/моль при расстояниях  $R_{OHa} = 1,3 \text{ \AA}$ ,  $R_{OHe} = 0,89 \text{ \AA}$ . Это противоречит результатам работы (Chambaud G. et al., «J. Phys.», 1978, 11B, 211), в которой показано, что в приближении ССП—КВ отсутствует потенц. барьер и имеется квазисвязанное состояние для рассмотренной реакции. Полученные результаты качественно согласуются с аналогичными результатами для реакции  $C^+ + H_2 \rightarrow CH^+ + H$ , отличающейся от исследованной отсутствием двух несвязывающих  $2p+2p_-$ -электронов.

А. А. Зембеков

$H_2O^+$

1982

№ 12 Б102. Угловые распределения фотоэлектронов в  $H_2O$ . Truesdale C. M., Southworth S., Kobrin P. H., Lindle D. W., Thornton G., Shirley D. A. Photoelectron angular distributions of  $H_2O$ . «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 2, 860—865 (англ.)

парциальн  
сечение  
фотоио-  
низации

С возбуждением синхротронным излучением в диапазоне энергий 18—31 эВ для состояний  $^2B_1$ ,  $^2A_1$  и  $^2B_2$  иона  $H_2O^+$  измерены парц. сечения фотоионизации (ПСФ) и параметры асимметрии, к-рые согласуются с соотв-щими данными для O 2p-орбиталей. ПСФ и  $\beta$  чувствительны к изменению хим. связи. Наилучшее соответствие между теорией и экспериментом для ПСФ и  $\beta$  достигается в расчетах этих величин методом ССП-Х $\alpha$  рассеянных волн и методом инверсии потенциала основного состояния.

И. А. Тополь

Х. 1982, 19, № 12.



1982

$\text{OH}_2^+$

структурн.  
параметры,  
ab initio  
расчет.

Wu. Weixiong, Jiang  
Shouping.

Shengwu Huaxue  
Yu Shengwu Wuli  
Jinzhai 1982, 44, 58.  
(Ser. FH; III)

$\text{OH}_2^+$

1983

Bruna Pablo F., Hirsch G.,  
et al.

Mol. Ions: Geom. and Elect.  
ron. Struct. Proc. NATO Adv.  
Study Inst., Isle of Kos,  
Sept. 30-Oct. 10, 1980. New  
York; London, 1983, 309-  
354.

(see  $\text{SH}_2^+$ ; III)

pariem  
Eig. u. n.

$H_2O^+$

механизм  
преддиссоци-  
ации

1983

14 Б992. Динамическое исследование неадиабатических мономолекулярных реакций: коническое пересечение между  $\tilde{B}^2B_2$  и  $\tilde{A}^2A_1$  состояниями  $H_2O^+$ . Dynamical study of nonadiabatic unimolecular reactions: The conical intersection between the  $\tilde{B}^2B_2$  and  $\tilde{A}^2A_1$  states of  $H_2O^+$ . Dehareng Dominique, Chapuisat Xavier, Lorquet Jean-Claude, Galloy Claudine, Raseev Gheorghe. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 1246—1264 (англ.)

Исследован механизм преддиссоциации иона  $H_2O^+$  из возбужденного состояния  $B^2B_2/2A$  в разрыхляющее состояние  $\tilde{A}^2A_1/2A$  в области конического пересечения потенциальных Пв (указана симметрия терма в конфигурации  $C_{2v}/C_s$ ). Адиабатич. термы иона рассчитаны методом ВК в молек. базисе ф-ций, оптимизирующих однопредельную ф-цию молекулы  $H_2O$  в основном состоянии  $1A_1$ . В кач-ве атомного базиса использовался сгруппированный набор гауссовых АО  $[3s2p; 2s]$ . Ф-ции иона построены с учетом всех однократно воз-

х. 1983, 19, № 14.

возбужденных конфигураций; учет двухкратно возбужденных конфигурацией не приводит к существенному изменению Пв. Полученные ф-ции использованы для вычисления матричных элементов неадиабатич. взаимодействия при изменении трех внутренних координат иона. Найдено, что вблизи пересечения Пв в конфигурации равнобедренного треугольника эти матричные элементы в зависимости от координаты хорошо аппроксимируются лоренцевыми ф-циями, что указывает на применимость линейной модели Ландау — Теллера. В рамках этой модели выполнен переход к адиабатич. базису, и линия пересечения адиабатич. Пв отождествлялась с положением максимума неадиабатич. связи. При исследовании динамики преддиссоциации иона предполагалось, что начальное состояние ядер на поверхности терма  $\tilde{B}$  соответствует вертикальному переходу из основного состояния молекулы  $H_2O$  при фотоионизации для энергии фотона  $\sim 20$  эВ. Далее интегрировались классич. ур-ния движения на терме  $\tilde{B}$  и вычислялась полная вероятность перехода (или вероятность выживания иона) как ф-ция времени. Распад носит неэкспоненциальный характер, что связано с особенностями перераспределения энергии в конич. потенциальной яме. При малых временах наблюдается быстрая преддиссоциация, аналогичная преддиссоциации двухатомных молекул. При больших временная преддиссоциация происходит после выхода молек. динамики на статистич. режим. Оба процесса сравнительно нечувствительны к начальному колебательному и вращательному распределению молекулы  $H_2O$  до фотоионизации. Отмечается, что образование протонов при в результате преддиссоциации  $H_2O(\tilde{B})$  через конич. пересечение на разрыхляющий терм  $\tilde{A}$ , может конкурировать с преддиссоциацией в два др. состояния —  $^2A''$  и  $^4A''$ , ведущих к образованию  $H^+$  и  $OH^+$ .

Е. Е. Никитин

$\text{OH}_2^+$

[Om. 16886]

1983

Farnell L., Pople J.A.,  
et al.

ab initio  
calculations

J. Phys. Chem., 1983,  
87, N 1, 79-82.

$H_2O^+$

Om. 16842!

1983

Knight L.B., Headman J.,

ESR  
спектр  
матрице

J. Chem. Phys., 1983,  
78, N 10, 5940-5945.

$H_2O^+$

Om. 16293

1983

98: 134669g Anomalous rotational distributions in electronic emission of supersonically cooled oxoniumyl ion ( $H_2O^+$ ) ( $A^2A_1 \rightarrow \tilde{X}^2B_1$ ). Leutwyler, Samuel; Klapstein, Dieter; Maier, Johannes (Phys. Chem. Inst., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Chem. Phys.* 1983, 74(3), 441-5 (Eng). The  $A^2A_1 \rightarrow \tilde{X}^2B_1$  emission spectrum of  $H_2O^+$  was obsd. by electron impact on rotationally-vibrationally cooled  $H_2O$ , which was seeded in a He supersonic jet. Rotational distributions are significantly different for different sub-bands ( $\Sigma$ ,  $\Pi$ ) and asymmetry components ( $\Pi^+$ ,  $\Pi^-$ ), due to the effects of rotational asymmetry on the rotational line strengths. Implications for astrophys. and geophys. temp. measurements based on  $H_2O^+$  electronic emission bands are discussed.

unmeteculic.

6 m. example

$A^2A_1 - \tilde{X}^2B_1$

C.A. 1983, 98, N16.

$H_2O^+$

Om. 16293

1983

13 Б131. Аномальные вращательные распределения в электронном испускании охлажденного в сверхзвуковом потоке  $H_2O^+(\bar{A}^2A_1 \rightarrow X^2B_1)$ . Anomalous rotational distributions in electronic emission of supersonically cooled  $H_2O^+(\bar{A}^2A_1 \rightarrow X^2B_1)$ . Leutwyler Samuel, Klapstein Dieter, Maier John P. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 3, 441—445 (англ.)

м.п.;

Измерены электронные спектры испускания ионов  $H_2O^+$  образующихся под действием электронного удара на переохлажденные в сверхзвуковом потоке молекулы  $H_2O$ . Наблюдены  $\Sigma$ -полосы ( $K_a'=0$ ,  $v_2'=7, 9, 11, 13$ ) и  $\Pi$ -полосы ( $K_a'=1$ ,  $v_2'=8, 10, 12$ ) перехода  $\bar{A}^2A_1 \rightarrow X^2B_1$  иона  $H_2O^+$ . В случае  $\Pi$ -подполосы 8—0 в области 6200 Å обнаружено, что наблюдаемое во вращательной структуре распределение интенсивности соответствует  $T_{вр.} = 500—100$  К, однако ни одно из предсказанных больцмановских распределений интенсивностей для  $T_{вр.}$  в интервале 50—100 К не согласуется с экспериментом. Отмечено, что  $T_{вр.}$ , измеренные для всех наблюдаемых

X. 1983, 19, N 13



полос  $\text{H}_2\text{O}^+$  ( $54-83\text{ K}$ ), выше, чем соотв. значения для  $\text{N}_2\text{O}^+$  ( $10\pm 1\text{ K}$ ) и  $\text{N}_2^+$  ( $25\pm 1\text{ K}$ ) в аналогичных условиях. Для возбужденного состояния  $\text{H}_2\text{O}$   $T_{\text{вр.}}$  существенно различны для  $K_a'=0$  (в среднем  $62\text{ K}$ ) и  $K_a=1$  (в среднем  $76\text{ K}$ ). В случае П-подполос для компонент П-распределение является бoльцмановским, а для П<sup>+</sup> — отличается от него, причем заселенность высших вращательных уровней значительно ниже, чем это предсказано на основании измерений т-р для П<sup>-</sup>- и  $\epsilon$ -полос. Различие  $T_{\text{вр.}}$  для  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{N}_2\text{O}^+$ ,  $\text{N}_2^+$  обсуждается на базе рассмотрения эффективности вращательно-трансляц. переноса энергии в каждом случае. Показано, что отличие  $T_{\text{вр.}}$  для  $\Sigma$ , П<sup>+</sup>- и П<sup>-</sup>-подполос связано с чисто внутримолек. явлениями, в частности, влиянием вращательной асимметрии на силы линий в квазилинейном возбужденном состоянии А, к-рое ранее не учитывали. Обсуждены возможности используемого метода для измерений вращательных т-р  $\text{H}_2\text{O}$  в астро- и геофизич. экспериментах. С. Б. Осин

Оде  
леж

$H_2O^+$

Om. 16293

1983

7 Д759. Аномальные вращательные распределения в электронном излучении охлажденных в сверхзвуковом пучке ионов  $H_2O^+$  ( $\tilde{A}^2A_1-X^2B_1$ ). Anomalous rotational distributions in electronic emission of supersonically cooled  $H_2O^+$  ( $\tilde{A}^2A_1 \rightarrow \tilde{X}^2B_1$ ). Leutwyler Samuel, Klapstein Dieter, Maier John P. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 3, 441—445 (англ.)

Получен с разрешенной вращательной структурой низкотемпературный спектр флуоресценции ионов  $H_2O^+$  ( $\tilde{A}^2A_1-X^2B_1$ ) при возбуждении электронным ударом молекул воды, добавленных в расширяющуюся в вакуум сверхзвуковую струю He. По измеренным интенсивностям вращательных линий подсистем  $\Sigma$  ( $K_a=0$ ),  $\Pi^-$  и  $\Pi^+$  ( $K_a=1$ ) вычислены распределения заселенностей по вращательным уровням электронно-колебательных состояний  $\tilde{A}^2A_1$ ,  $v_2'=7-13$ . Показано, что вращательные распределения, полученные из интенсивности полос  $\Sigma$  и  $\Pi^-$  могут быть описаны уравнением Больцмана. Наблюдающиеся для полос  $\Pi^+$  отклонения от больцмановского распределения связаны, по мнению авторов, с необходимостью введения поправок на асимметрию возбужден-

спектр,  $\tilde{A}^2A_1$

ср. 1983, 18,  
N 7

ного состояния  $\tilde{A}^2A_1$  в используемые при расчетах теоретич. значения вращательных сил линий. Библ. 15.

Е. Н. Т.



$H_2O^+$

1983

198: 152339d Spectrum of twilight emission  $H_2O^+$  near 6170 Å. Matveeva, O. A. (Inst. Fiz. Atmos., Moscow, USSR). *Geomagn. Aeron.* 1983, 23(1), 152-3 (Russ). Spectra of twilight resonance fluorescence of  $H_2O^+$  near  $\lambda = 6170$  Å are reported. The comparison with a night sky spectra showed that the most intense interference-free  $H_2O^+$  emission line is that at  $\lambda = 6175$  Å. Its intensity represents 10.3% of the total 8-0  $H_2O^+$  band intensity.

спектр  
искусств  
лине

C. A. 1983, 98, N 18.

$H_2O^+$

1983

100: 42392t Franck-Condon factors for water ( $H_2O^+$ ) molecular bands. Shefov, N. N. (Inst. Phys. Atmos., Moscow, USSR). *Planet. Space Sci.* 1983, 31(11), 1371-2 (Eng). Franck-Condon factors for  $H_2O^+$  bands were calcd. They were used to est. the photon scattering coeff.  $g_{8,0}$  for the (8,0) band at 6158 Å.

орактор

Ф. К.

c.A. 1984, 100, N 6

$\text{OH}_2^+$

1984

Feller David, David-  
son Ernest R.

расчёты  
сверх-  
тонкой  
структ.

J. Chem. Phys., 1984,  
80, N 3, 1006-1017.

● (ср.  $\text{H}_2^+$ ; III)

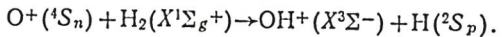
$\text{OH}_2^+$

От 19827

1984

1 D227. Неэмпирическая потенциальная поверхность состояния  $^4\Sigma^-$  линейной системы  $\text{OH}_2^+$ . An ab initio potential energy surface for collinear  $^4\Sigma^- \text{OH}_2^+$ . Hirst David M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1984, 17, № 15, L505—L507 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитана потенц. поверхность состояния  $^4\Sigma^-$  линейной системы  $\text{OH}_2^+$ , описывающая реакцию



потенциальная  
поверхность  
состояние  
 $^4\Sigma^-$ .

Базис включал сгруппированные наборы гауссовых ф-ций [5s4p] на O и [3s] на H, дополненные поляризационными ф-циями типов *d* и *p*. Вековое ур-ние КВ решалось в пространстве 2000 конфигураций, отобранных из полного пространства 1-кратно и 2-кратно возбужденных конфигураций по отношению к хартри-фокской ф-ции. В результате расчета найдено, что потенц. поверхность реакции  $\text{O}^+$  с  $\text{H}_2$  не имеет акти-

ф. 1985, 18, N1.

вакционного барьера, а промежуточный комплекс лежит по энергии на 13,3 ккал/моль ниже реагентов. Полученные характеристики потенц. поверхности  $\text{OH}_2^+$  полностью согласуются с данными расчета этой же поверхности с помощью многочастичной теории возмущений.

А. И. Дементьев





$\text{OH}_2^+$

OM. 19824

1984

101: 137382z An ab initio potential energy surface for collinear  $^4\Sigma^-$  oxoniumyl ion ( $\text{OH}_2^+$ ). Hirst, David M. (Dep. Chem., Univ. Warwick, Coventry, UK CV4 7AL). *J. Phys. B* 1984, 17(15), L505-L507 (Eng). An ab-initio CI calcn. for the collinear potential energy surface for the reaction  $\text{O}(^4S_u) + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH}(^3\Sigma^-) + \text{H}$  showed that there is no activation barrier on the surface, and that there is a well whose depth is at least 13 kcal mol<sup>-1</sup>.

(ab initio  
pacem)

C.A. 1984, 101, N16

$\text{OH}_2^+$

от 19 827

1984

3 Б1019. Неэмпирическая поверхность потенциальной энергии для линейной [системы]  $\text{OH}_2^+$  в состоянии  $^4\Sigma^-$ . An ab initio potential energy surface for collinear  $^4\Sigma^- \text{OH}_2^+$ . Hirst David M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1984, 17, № 15, L505—L507 (англ.)

При линейном расположении ядер рассчитано сечение поверхности потенциальной энергии состояния  $^4\Sigma^-$  для р-ции  $0^+ (^4S_u) + \text{H}_2 (X^1\Sigma_g^+ \rightarrow \text{OH}^+ (X^3\Sigma^-) + \text{H} (^2S_g)$ . Использованы базисные наборы Данинга  $(10s6p2d)/[5s4p2d]$  для О и  $(5s1p)/[3s1p]$  для Н. Ограниченным методом Хартри—Фока получены МО, с помощью к-рых построены волновые функции приближения конфигурац. взаимодействия. Учтены все одно- и двухкратные возбуждения по отношению к исходной конфигурации, и проведен отбор для нескольких пороговых значений с последующей экстраполяцией. На рассчитанной потенциальной поверхности отсутствует барьер, а в окрестности точки с координатами  $R_{\text{OH}} = 1,1 \text{ \AA}$ ,  $R_{\text{HH}} = 1,25 \text{ \AA}$  имеется пологий минимум глу-

М.П., Потенц.  
кривые

Х. 1985, 19, N 3.

биной более 13 ккал/моль (относительно энергии реагентов). Отмечено, что эти результаты согласуются с результатами прежних неэмпирич. расчетов, но отличаются от данных расчетов полуэмпирич. методом двухатомных фрагментов в молекулах, согласно к-рым на рассматриваемой потенциальной поверхности имеется барьер высотой 22 ккал/моль. А. В. Немухин

1985

 $H_2O^+$ 

15 Б1118. Экспериментальное и теоретическое исследование пеннинговской ионизации  $H_2O$  метастабильными атомами  $He(2^3S)$ . Experimental and theoretical study of Penning ionisation of  $H_2O$  by metastable helium  $He(2^3S)$ . Haug B., Morgner H., Staemmler V. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 2, 259—274 (англ.)

Измерен спектр электронов, эмиттированных в результате пеннинговской ионизации (ПИ) молекул  $H_2O$  метастабильными атомами  $He^*(2^3S)$  и проведен детальный анализ положения и формы линий, соотв.  $A^2A_1(3a_1^{-1})$  и  $\tilde{X}^2B_1(1b_1^{-1})$  конечным состояниям  $H_2O^+$ . Неэмпирич. методом ССП с учетом взаимодействия конфигураций для системы  $He^*-H_2O$  проведены расчеты потенциальной поверхности (ПП) и установлена сильная анизотропия последней с областью отталкивания при приближении атома  $He$  к атомам  $H$  в  $H_2O$ .

спектр

X. 1985, 19, N 15

и с областью притяжения при приближении атома He к  $H_2O$  со стороны атома O. Полученные эксперим. данные объяснены на основе рассчитанной ПП тем, что при образовании конечных состояний  $\tilde{X}$  и  $\tilde{A}$  наиболее эффективными являются различные траектории движения атома  $He^*$  по ПП, определяющиеся различной ориентацией МО  $1b_1$  и  $3a_1$ . Установлено, что вероятность ПИ пропорциональна степени перекрывания ионизируемой МО с вакансией на  $1s$ -оболочке  $He^*$ .

О. А. Басченко

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> (om. 27414) 1985

Merzberg G.,

Proc. Indian. Natl. Sci.

(одзор) Acad., 1985, A51, N3,  
495-521.

(Сер. координаты с отменен. Merzberg).

$\text{OH}_2^{2+}$

[Om 22707]

1985

Koch W., Heinrich N.,  
Schwarz H., et al.

ab initio  
pacem

Int. J. Mass Spectrom.  
and Ion Process.,

1985, 67, N3, 305-316.

$H_2O^+$

1985

Saykally Richard J.

вращающ. Chem. Brit., 1985,

спектр. 21, N2, 159, 161.

(обзор)

●  
(см.  $OH^+$ ; III)



$H_2O^{2+}$

1985

8 Б1056. Исследование дважды ионизированных состояний  $H_2O$  методами функции Грина и конфигурационного взаимодействия. A Green's function and configuration interaction investigation on the doubly ionized states of  $H_2O$ . Tarantelli F., Tarantelli A., Sgamellotti A., Schirmer, Cederbaum L. S. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 9, 4683—4690 (англ.). Место хранения, ГПНТБ СССР

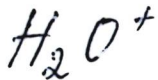
М.П.

Изложено применение метода ф-ции Грина к расчету, дважды ионизированных состояний молекул, названное алгебраич. диаграммным построением (АДП) (Schirmer J., Barth A. «Z. Phys. A.», 1984, 317, 267). Метод АДП 2-го порядка и метод конфигурац. взаимодействия (КВ) с несколькими исходными конфигурациями использованы для расчета большого числа дважды ионизированных состояний молекулы  $H_2O$  в равновесной (для нейтр. молекулы) геометрич. конфигурации. Наибольший из использованных в расчете методом АДП

х. 1987, 19, № 8

базисов включая наборы сгруппированных гауссовых функций  $(13s8p2d1f)/[7s4p2d1f]$  на О и  $(7s1p)/[4s1p]$  на Н. Показано, что результаты расчета методом АДП позволяют удовлетворительно интерпретировать ожеспектры. Отмечена высокая эффективность метода АДП по сравнению с методом КВ. Для одного и того же базиса размерность диагоналируемой матрицы в методе АДП на порядок меньше, чем в методе КВ. Отмечено, что метод АДП является размерносогласованным.

А. А. Сафонов

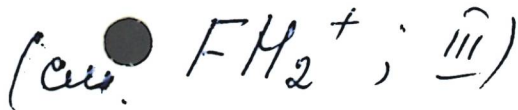


1985

Takahata Yuji.

геометр.,  
структ.

Theor. Chim. acta,  
1985, 67, N 5, 413-424.



$H_2O^{+2}$

1986

Koch W., Heinrich N., et al.

Adv. Mass. Spectrom., 1985.

10th Int. Conf., Swansea,

ser. n. 9-13 Sept., 1985. Pt B. Chiches-  
ter, 1986, 1115-1116.

(corr.  $HO^{+2}$ ; III)

$H_2O^+$

(0m. 26235)

1986

21 Б1170. Фотоэлектронная спектроскопия молекулярных пучков и внутримолекулярная динамика  $H_2O^+$  и  $D_2O^+$  во временном интервале порядка нескольких фсек. Molecular beam photoelectron spectroscopy and femtosecond intramolecular dynamics of  $H_2O^+$  and  $D_2O^+$ . Reutt J. E., Wang L. S., Lee Y. T., Shirley D. A. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 12, 6928—6939 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С разрешением 11 мэВ и использованием резонансной линии He-I в качестве источника возбуждения исследованы фотоэлектронные спектры (ФЭС) сверхзвуковых пучков молекул  $H_2O$  и  $D_2O$ . Для первых двух ионных состояний  $X^2B_1$ ,  $A^2A_1$ ,  $H_2O^+$  и  $D_2O^+$  определены частоты и параметры аугармоничности деформац. и симм. вал. кол. Для всех трех ионных состояний рассчитаны автокорреляц. ф-ции и для  $B^2B_2$ -состояния обнаружена сверхбыстрая потеря когерентности начального волнового пакета за время  $\sim 10^{-14}$  с, вызванная внутримолек. процессами пере-

М.Н.

(7) 10

11.11

X. 1987, 19, № 21 (см  $D_2O^+$ , 14)

носа энергии с участием деф. колебаний. Предложена модель для объяснения безызлучательной релаксации  $\tilde{B}^2B_2$ -состояния, основанная на рассмотрении конич. пересечения потенциальных Пв состояний  $\tilde{B}^2B_2$  и  $\tilde{A}^2A_1$ .  
О. А. Басченко

$H_2O^+$

1986

7 2 Л125. Измерение вращательного спектра катиона воды ( $H_2O^+$ ) методом лазерного магнитного резонанса. Measurement of the rotational spectrum of the water cation ( $H_2O^+$ ) by laser magnetic resonance. Strahan S. E., Mueller R. P., Saykally R. J. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 3, 1252—1260 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом лазерного магн. резонанса с использованием лазеров на  $CH_3OH$ ,  $HCOOH$  и др. молекулах с накачкой от  $CO_2$ -лазера исследован вращательный спектр молекулярного иона  $H_2O^+$ , полученного в разряде переменного тока через смесь  $H_2O$  с гелием. Идентифицирована зеемановская структура 10 вращательных переходов с  $J \leq 6$  в основном колебательном состоянии  $H_2O^+$  основного электронного состояния  $X^2B_1$ . Анализ спектра выполнен с учетом кватертичного центробежного искажения и спин-вращательного взаимодействия. Опре-

(М.П.)

ф. 1987, 18, № 2

делены значения вращательных и центробежных постоянных,  $g$ -факторов и постоянных спин-вращательного взаимодействия:  $A=870548,29$ ,  $B=372223,97$ ,  $C=253986,74$  МГц;  $D_N=25,988$ ,  $D_{NK}=-151,21$ ,  $D_K=-1348,57$ ,  $d_1=-11,117$ ,  $d_2=-1,547$  МГц;  $g_{aa}=-0,00689$ ,  $g_{bb}=-0,00037$ ,  $g_{cc}=0,00050$ ;  $\epsilon_{aa}=-32671,9$ ,  $\epsilon_{bb}=-3433,75$ ,  $\epsilon_{cc}=50,52$  МГц. Вычислены эффективные структурные  $r_0$ -параметры  $\text{H}_2\text{O}^+$ :  $\text{QH}=1,006$  Å,  $\text{HON}=109,8^\circ$ . М. Р. Алиев



$H_2O^+$

[Om. 25966]

1986

Strahan S.E., Mueller R.P.,  
et al.,

(sp. creep) J. Chem. Phys., 1986,  
85, N3, 1252-1260.

$H_2O^+$

1987

У 20 Б1032. Применимость различных процедур франк-кондоновского анализа для получения геометрических конфигураций возбужденных состояний и ионов. Часть 2. Состояния  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  ионов воды и сероводорода. Validity of Franck—Condon analysis procedures for deduction of excited-state and ionic geometries. Part II. The  $X^2B_1$  and  $A^2A_1$  states of hydrogen oxide and hydrogen sulphur. Chau Foo Tim. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 151, 173—189 (англ.)

Метод производящей ф-ции, метод Коона и матричный метод Душинского, основанные на использовании приближения Франка—Кондона, наряду с двумя еще более приближенными методами применены для определения геометрич. параметров ионов  $H_2O^+$ ,  $D_2O^+$  и  $H_2S^+$  в электронных состояниях  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  по колебат. структуре первых двух полос в фотоэлектронных спектрах соотв. молекул. Результаты достаточно хорошо согласуются с эксперим. данными. Обсуждены различные критерии для определения знака изменения равновесных геометрич. параметров при переходе от нейтральной молекулы к ее иону.

В. Б. Павлов — Веревкин

М.А.

2 (+2)

X. 1987, 19, N 20

$H_2O^+$

М.П.

(12)

X.1987, 19, №20

1987

20 Б1032. Применимость различных процедур франк-кондоновского анализа для получения геометрических конфигураций возбужденных состояний и ионов. Часть 2. Состояния  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  ионов воды и сероводорода. Validity of Franck—Condon analysis procedures for deduction of excited-state and ionic geometries. Part II. The  $X^2B_1$  and  $A^2A_1$  states of hydrogen oxide and hydrogen sulphur. Chau Foo Tim. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 151, 173—189 (англ.)

Метод производящей ф-ции, метод Коона и матричный метод Душинского, основанные на использовании приближения Франка—Кондона, наряду с двумя еще более приближенными методами применены для определения геометрич. параметров ионов  $H_2O^+$ ,  $D_2O^+$  и  $H_2S^+$  в электронных состояниях  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  по колебат. структуре первых двух полос в фотоэлектронных спектрах соотв. молекул. Результаты достаточно хорошо согласуются с эксперим. данными. Обсуждены различные критерии для определения знака изменения равновесных геометрич. параметров при переходе от нейтральной молекулы к ее иону.

В. Б. Павлов — Вереvкин



1987

107: 123381k Validity of Franck-Condon analysis procedures for deduction of excited-state and ionic geometries. Part II. The  $X^2B_1$  and  $A^2A_1$  states of hydrogen oxide and hydrogen sulfide. Chau, Foo Tim (Dep. Appl. Sci., Hong Kong Polytech., Hung Hom, Hong Kong). *THEOCHEM* 1987, 36, 173-89 (Eng). The vibrational intensity distributions obsd. in the 1st 2 photoelectron bands of  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{D}_2\text{O}$ , and  $\text{H}_2\text{S}$  were adopted in studying the validity and limitations of different methods for carrying out Franck-Condon anal. These methods include the generating function method, J. B. Coon et al.'s (1962) method, the F. Duschinsky (1937) matrix method, and the 2 approx. methods involving the use of the vibrational quantum no. with the max. intensity as well as vertical and adiabatic ionization potentials within a progression. The geometries deduced for  $\text{H}_2\text{O}^+$  and  $\text{H}_2\text{S}^+$  in the  $X^2B_1$  and  $A^2A_1$  states are in agreement with obsd. values. Various criteria for the prediction of signs for changes in bond lengths and bond angles were discussed. The R. M. Badger's (1934) rule and the electrostatic force model were used to est. quant. the changes in bond length on ionization.

$X^2B_1, A^2A_1$   
смысл

(H) X  
C.A. 1987, 107, N 14



$H_2O^{2+}$

1987

107: 223601a Study of the spectrum and decay of the doubly charged water ion using spin-coupled valence bond theory. Cooper, David L.; Gerratt, Joseph; Raimondi, Mario; Sironi, Maurizio (Dep. Inorg., Phys. Ind. Chem., Univ. Liverpool, Liverpool, UK L69 3BX). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(3), 1666-76 (Eng). Potential-energy surfaces were computed for several low-lying singlet and triplet states of  $H_2O^{2+}$  by using spin-coupled valence bond theory. Wide regions of the surfaces were investigated including all the disocn. processes to  $OH^+ + H^+$  in different states, to  $O + H^+ + H^+$ , and to  $O^+ + H^+ + H$ . The correlation of all these states is very straightforward. The final wave functions are very compact (187 spatial configurations). The electronic structures of the various states were interpreted directly in terms of the spin-coupled orbitals. This makes possible a completely new description of the ion-ion coincidence (PIPICO), Auger, and double-charge-transfer spectra of doubly ionized water.

ромеиз ро-  
верхоств,  
мер. расет

C.A. 1987, 107, ~24

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

1987

108: 45967k: Ab initio computations of the  $\alpha$  vibration-rotation constants for oxoniumyl (H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>). Degli Esposti, Alessandra; Lister, David G.; Palmieri, Paolo; Degli Esposti, Claudio (Ist. Spettrosc. Mol., 40126 Bologna, Italy). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(11), 6772-3 (Eng). Ab initio computations of the quadratic and cubic force fields of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> were made to provide vibration-rotation consts. ( $\alpha$ 's) for the  $\nu_1$  vibration. The quadratic and cubic force fields were obtained by finite difference methods from a set of quantum mech. energies evaluated at the equil. and at distorted mol. geometries. The equil. elec. dipole moment of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> was computed as 2.19 D.

констан.  
трациям.  
ночных;  
ab initio  
трациям

C.A. 1988, 108, N 6

$H_2O^+$

Om 28 754

1987

15 Б1180. Неэмпирические расчеты колебательно-вращательных постоянных  $\alpha$  для  $H_2O^+$ . Ab initio computations of the  $\alpha$  vibration-rotation constants for  $H_2O^+$ . Esposti A. D., Lister D. G., Palmieri P., Esposti C. D. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6772—6773 (англ.)

По теории возмущений Меллера — Плессета 4-го порядка с учетом одно-, двух-, трех- и четырехкратно возбужденных конфигураций рассчитаны точки на потенциальной Пв  $H_2O^+$  вблизи равновесной конфигурации. Полученные результаты использованы для расчета квадратичных и кубич. силовых постоянных, а также колебательно-вращат. постоянных  $\alpha$ .

В. Б. Павлов-Веревкин

М.П.

Х. 1988, 19, № 15

$H_2O^+$

см 28754

1987

7 Д86. Неэмпирические расчеты колебательно-вращательных констант  $\alpha$  для  $H_2O^+$ . Ab initio computations of the  $\alpha$  vibration-rotation constants for  $H_2O^+$ . Esposti Alessandra Degli, Lister David G., Palmieri Paolo, Esposti Claudio Degli. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6772—6773 (англ.)

Представлены результаты неэмпирич. расчетов колебательно-вращательных констант  $\alpha$  для моды  $\nu_1$  иона  $H_2O^+$ . Эти расчеты основаны на полученных методом конечных элементов из квантовомеханич. энергий различных конфигураций иона силовых постоянных 2-го и 3-го порядков. Энергии, в свою очередь, рассчитывались в рамках теории возмущений Меллера-Плессета 4-го порядка с учетом корреляционных поправок. Для определения равновесной конфигурации иона использовалась стандартная программа с базисом 6311 ГФ. Полученные значения параметров равновесной конфигурации ( $r_e = 0,997$  А,  $\theta_e = 109,1^\circ$ ) согласуются с эксперим. данными (1,001 А,  $108,9^\circ$ ). В. М. Стрельчenea

М.П.

Ф. 1988, 18, № 7



$H_2O^{2+}$

1987

1 Д127. Синглет-триплетное расщепление низколежащих электронных состояний  $H_2O^{2+}$  и сравнение с изоэлектронными  $CH_2$  и  $CH_2^{2+}$ . The singlet-triplet splitting of the lowlying electronic states of  $H_2O^{2+}$  and a comparison with isoelectronic  $CH_2$  and  $CH_2^{2+}$ . Frenking Gernot, Koch Wolfram. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 6, 503—508 (англ.)

Представлены результаты расчета с использованием программы ГАУССИАН-82 энергий и геометрий двух низколежащих синглетных (НЛС) и триплетных (НЛТ) состояний дикатиона воды  $H_2O^{2+}$  (I) в хартри-фоковском приближении и с выходом за его рамки на уровне теории Меллера — Плессета. НЛТ состояние симметрии  $^3\Sigma_g^-$  исследовано с помощью спин-неограниченных орбиталей. Показано, что первое возбужденное НЛС состояние I имеет  $^1\Delta_g$  симметрию, причем для его адекватной трактовки требуется учет комплексных орбиталей. С использованием диаграммы Уолша, разностей энергий синглетных и триплетных состояний и углов изгиба I  $CH_2$  и  $CH_2^{2+}$  могут быть истолкованы с помощью разности электроотрицательностей центрального и замещенного атомов.

В. В. Росихин

М. А.

ср. 1988, 18, №1

$H_2O^{2+}$

1987

1 Б4357. Синглет-триплетное расщепление низколежащих электронных состояний  $H_2O^{2+}$  и сравнение с изоэлектронными  $CH_2$  и  $CH_2^{2+}$ . The singlet-triplet splitting of the low-lying electronic states of  $H_2O^{2+}$  and a comparison with isoelectronic  $CH_2$  and  $CH_2^{2+}$ . Frenking Gernot, Koch Wolfram. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 6, 503—508 (англ.)

Проведен квантовохим. расчет низколежащих электронных состояний иона  $H_2O^{2+}$  с использованием численной процедуры GAUSSIAN-82 с комплексными орбиталями. Нижайшее связанное состояние  $H_2O^{2+}$  имеет симметрию  $^3\Sigma_g^-$ ; первое возбужденное состояние является линейным с симметрией  $^1\Delta_g$  и лежит на 46 ккал/моль выше, чем  $^3\Sigma_g^-$ . При помощи диаграмм Уолша различие между синглет-триплетными расщеплениями изоэлектронных  $H_2O^{2+}$ ,  $CH_2$  и  $CH_2^{2+}$  и углами изгиба этих молекул объяснено разными относит. электроотрицательностями центр. и боковых атомов. Л. Ю. Мельников

М.П.

Х. 1988, 19, N 1.

$H_2O^{2+}$ 

Am. 27256

1987

Chemical - mu-  
nuclei - pac-  
generator.

141563a The singlet-triplet splitting of the low-lying electronic states of  $\mu$ -oxodihydrogen(2+) ( $H_2O^{2+}$ ) and a comparison with isoelectronic methylene and  $\mu$ -methanetetrayldihelium(2+) ( $He_2^{2+}$ ). Frenking, Gernot; Koch, Wolfram (Mol. Res. Inst., Palo Alto, CA 94304 USA). Chem. Phys. Lett. 1987, 138(6), 503-8. At the MP2/6-31G(d,p) level of theory using complex basis, the lowest-lying (bound) singlet state of  $H_2O^{2+}$  is the linear  $\Sigma_g^+$  state with an O-H bond distance of 1.199 Å and this state is estd. to be ~46 kcal/mol higher in energy than the lowest-lying  $^3\Sigma_g^-$  state of  $H_2O^{2+}$ . These states are compared to the lowest-lying singlet and triplet states of isoelectronic  $CH_2$  and  $CH_2^{2+}$ . Using Walsh diagrams, the trend in the singlet/triplet gap and bending angles is explained by the relative electronegativities between the central and substituent atoms.

② ⊗

 $CH_2^{2+}$ ,  $CH_2$ 

C.A. 1987, 107, N 16

$\text{H}_2\text{O}^{+ \cdot (2)}$

[Om. 27280 "a"]

1987

Griffiths W. F., Harris F. M.,

оправдание Org. Mass Spectrom.,  
1987, 22, N 8, 559-560

$H_2O^+$

1987

Liu Di Jia, Mo Wing  
Cheung, et al.

бразам.  $J. Chem. Phys.$  1987,  
спектр 87(5), 2442-6.

(см.  $ArH^+$ ; III)

$\text{H}_2\text{O}^+$

lotn. 26576

1987

Sears T. J.,

Библиогр.  
эксперим.  
исследов.

J. Chem. Soc. Faraday  
Trans., 1987, Pt 2, 83,  
N.1, 111-126.

$H_2O^+$

1987

Siddarth P.,  
Gopinathan M. S.

Proc. Indian Acad. Sci.  
Chem. Sci., 1987, 99, N1-2,  
91-98.

u.n.

( cur. HCN; III)

$\text{H}_2\text{O}^+$

DM 2846

1988

6 Л193. ИК-спектроскопия полосы  $\nu_3\text{H}_2\text{O}^+$ . Infrared spectroscopy of the  $\nu_3$  band of  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Dinelli Bianca M., Crofton Mark W., Oka Takeshi. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 1, 1—11 (англ.)

В условиях модулированного электрич. разряда в смеси  $\text{He}:\text{H}_2:\text{O}_2$  (100:1:1) методом разностно-частотной лазерной спектроскопии изучен ИК-спектр поглощения иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ . В области  $3400\text{—}3100\text{ см}^{-1}$  с полушириной линии непрерывно-перестраиваемого лазерного излучения  $\leq 0,001\text{ см}^{-1}$  измерены положения  $\sim 70$  линий колебательно-вращательной структуры полосы  $\nu_3$ . С привлечением литер. данных по оптич. спектру  $\text{H}_2\text{O}^+$  выполнен колебательно-вращательный анализ наблюдаемого спектра, учитывающий спин-вращательное взаимодействие и взаимодействие Кориолиса между  $\nu_3$  и  $\nu_1$ . В результате анализа определены молекулярные постоянные иона для основного и возбужденных,  $\nu_1=1$  и  $\nu_3=1$ , колебательных состояний. Библ. 28. В. К.

М.П.

ф. 1988, 18, № 6



$\text{H}_2\text{O}^+$

DM 28 R16

1988

В 13 Б1304. Инфракрасная спектроскопия полосы  $\nu_3 \text{H}_2\text{O}^+$ . Infrared spectroscopy of the  $\nu_3$  band of  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Dinelli B. M., Crofton M. W., Oka T. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 1, 1—11 (англ.)

В диапазоне  $3100\text{--}3400 \text{ см}^{-1}$  измерен ИК-спектр поглощения иона  $\text{H}_2\text{O}^+$ , обусловленный фундаментальной полосой  $\nu_3$ , сильно возмущенной за счет колебательно-вращат. взаимодействия с  $\nu_1$ . Использовали перестраиваемый лазерный спектрометр разностной частоты и метод детектирования на основе модуляции ионов по скоростям. При анализе использованы данные по оптич. спектрам. Начало полосы  $\nu_3$ , значения  $A''$ ,  $B''$ ,  $C''$ ,  $A'$ ,  $B'$ ,  $C'$  равны (в  $\text{см}^{-1}$ ): 3259,031, 29,037; 12,423; 8,469; 27,850; 12,286; 8,324. Приведены также параметры центробежного искажения, постоянные спин-вращат. взаимодействия. Из анализа возмущений получены начало полосы  $\nu_1$  ( $3213,00 \text{ см}^{-1}$ ) и значения  $A'$ ,  $B'$ ,  $C'$

М.П.

Х. 1988, 19, N 13

(28,405; 12,145; 8,274  $\text{см}^{-1}$ ). Рассчитаны геометрич.  
 параметры и силовое поле молекулы. Значения равно-  
 весных молек. постоянных и параметров колебательно-  
 вращат. взаимодействия (в  $\text{см}^{-1}$ ):  $A_e = 27,7847$ ,  $B_e =$   
 $= 12,6037$ ,  $C_e = 8,7143$ ,  $\alpha_1^A = 0,6316$ ,  $\alpha_2^A = 4,3231$ ,  
 $\alpha_3^A = 1,1869$ ,  $\alpha_1^B = 0,2778$ ,  $\alpha_2^B = 0,0535$ ,  $\alpha_3^B = 0,1370$ ,  
 $\alpha_1^C = 0,1950$ ,  $\alpha_2^C = 0,1503$ ,  $\alpha_3^C = 0,1451$ ,  $R_e = 1,001$  А,  
 $\Theta_e = 108,9^\circ$ . В. М. Ковба

$\text{H}_2\text{O}^+$

(OM 28616)

1988

108: 64933n Infrared spectroscopy of the  $\nu_3$  band of oxoniumyl. Dinelli, Bianca M.; Crofton, Mark W.; Oka, Takeshi (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 127(1), 1-11 (Eng). The  $\nu_3$  band of  $\text{H}_2\text{O}^+$  was detected in absorption at 3100-3400  $\text{cm}^{-1}$  using a tunable difference frequency spectrometer and velocity modulation detection. About 70 transitions were measured and analyzed in a 2-stage fit in order to obtain information on the rotational consts. of both ground and excited vibrational states. Combination differences obtained from our measurements and from the optical spectrum obsd. earlier by H. Lew (1976) were fit using the A-reduced expression of the Hamiltonian and 16 mol. parameters of the ground state: the rotational consts., the centrifugal distortion consts., and the spin-rotation consts. were detd. The band origins of the  $\nu_3$  band ( $\nu_0 = 3253.031(3) \text{ cm}^{-1}$ ) and of the rovibrationally coupled  $\nu_1$  band ( $\nu_0 = 3213.00(9) \text{ cm}^{-1}$ ) were detd. together with the rotational parameters and the spin-rotation consts. of the  $\nu_3$  band and the vibration-rotation interaction const.

(13)

c.A. 1988, 108, n8

$H_2O^+$  [om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti,

J. Phys. and Chem. Ref.

Vi;

Data, 1988, 17, N2, 285.

$H_2O^+$

[30 35 3]

1988

Краснов К.С.,  
Филиппенко Н.В.,

ОНИИТЭХИМ.

д.р.н.

Деп. N 378-ХП-86,

(обзор)

Черкассы, 1988.



$H_2O^{2+}$

1988

Sironi Maurizio,  
Cooper D.L. et al.

et al. Mol. Phys. 1988, 65,  
N1.C. 257-259.

(cell.  $CH_4^{2+}$ ; III)

Н<sub>2</sub>O

1988

Сорокинская В.Е., Ката-  
иженский А.С., Морозов В.П.,

М.А.

Строение и свойства моле-  
кул. Мельчуковский сорник  
научник Трунов, Иванова,  
1988, 59-● 63.

$H_2O^+$ 

Om. 29699

1988

109: 101136y The  $A^2A_1-X^2B_1$  emission system of oxoniumyl and oxoniumyl- $d_2$  produced by helium( $2^3S$ ) Penning ionization of water and water- $d_2$  in a low-pressure helium afterglow. Tsuji, Masaharu; Maier, John P.; Obase, Hiroshi; Nishimura, Yukio (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 147(6), 619-23 (Eng). Penning ionization of  $He(2^3S) + H_2O$  and  $D_2O$  was studied by observing the  $A^2A_1-X^2B_1$  emission system of  $H_2O^+$  and  $D_2O^+$  in a low-pressure flowing afterglow. The vibrational distributions of  $H_2O^+(A)$  and  $D_2O^+(A)$  were consistent with those predicted from Franck-Condon-type vertical excitation. A strong underlying continuum, probably due to high rotational excitation, was found in both spectra.

 $(\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1)$  $\boxtimes \textcircled{H} D_2O^+$ C. A. 1988, 109, N 12.



$H_2O^+$

Ом. 33494, 33551. 1989

17 Б1436. Инфракрасная лазерная спектроскопия полос  $2^1_0$  и  $2^2_1$   $H_2O^+(X^2B_1)$ . Infrared laser spectroscopy of the  $2^1_0$  and  $2^2_1$  bands of  $H_2O^+(X^2B_1)$  / Brown P. R., Davies P. B., Stickland R. J. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 6.— С. 3384—3391.— Англ.

В интервале  $1270-1750\text{ см}^{-1}$  методом диодной лазерной спектроскопии с использованием модуляции ионов по скоростям измерена вращат. структура полос поглощения  $2^1_0$  и  $2^2_1$  молек ионов  $H_2O^+(X^2B_1)$  образующихся в разрядном источнике переменного тока, содержащем смесь  $H_2/O_2/He$  (1:1:100,  $P_{\text{общ.}} \approx 10\text{ мм}$ ). Начала полос соотв. при 1408, 4153 и 1362, 8528  $\text{см}^{-1}$ . Для основного состояния и состояний  $v_2=1$  и 2 рассчитаны и приводятся значения вращат. постоянных, параметров центробежного искажения (включая секстичные члены), параметров спин-вращат. взаимодействия (включая квартирные члены центробежного искажения).

М.А.

X. 1990, N 17

Значения  $\omega_2$ ,  $x_{22}$  и параметров колебательно-вращат. взаимодействия  $\alpha_2^A$ ,  $\alpha_2^B$ ,  $\alpha_2^C \text{H}_2\text{O} + (\text{X})^-$  (в  $\text{см}^{-1}$ ): 1431,198; -22,782; -4,3564; -0,0595; 0,1546. Полученные постоянные сопоставлены с данными неэмпирич. расчетов, результатами исследований  $\text{H}_2\text{O}^+$  методами ИКС высокого разрешения, оптич. спектроскопии (переход  $A \rightarrow X$ ), спектроскопии лазерного магнитного резонанса.

В. М. Ковба



H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

33494, 33551

1989

111: 201323c Infrared laser spectroscopy of the 2<sub>0</sub><sup>1</sup> and 2<sub>1</sub><sup>2</sup> bands of oxoniumyl (H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>) (X<sup>2</sup>B<sub>1</sub>). Brown, Philip R.; Davies, Paul B.; Stickland, Ross J. (Dep. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(6), 3384-91 (Eng). IR laser absorption spectra of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> were recorded in an a.c. discharge using velocity modulation detection. Eighty-five lines of the 2<sub>0</sub><sup>1</sup> fundamental and 20 lines of the 2<sub>1</sub><sup>2</sup> hot band were used to derive rotation, spin-rotation, and distortion parameters for the ground state and the 1st 2 vibrationally excited states of the bending mode. The results were compared with those from anal. of the A-X band system and from rotational and vibration-rotation laser spectra, as well as with recent ab initio results obtained using MRCI wave functions.

lek cramp,

ll-n. b

0CHHON

00CNOXUU

C.A. 1989, 111, N22

$H_2D^+$

1989

Dinelli B.M., et al.,

UK crump

The Infrared Spectrum  
of  $H_2D^+$ .

Eleventh Colloquium On  
High Resolution Molecu-  
lar Spectroscopy, 96

Fiessen, September 18-22,  
1989, A1, 76.

H-OH

1989

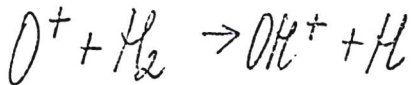
Düren R., Heumann B.,  
et al.

12<sup>th</sup> Int. Symp. on Mol.

Beams, Perugia, May 29-June 2, 1989: Abstr. Pap. Perugia, [1989], C. 345-347.

u. n.

(see. K<sub>u</sub>, HF; III)



1989

15 Б4032. Динамика ион-молекулярной реакции  $O^+(^4S) + H_2(X'\Sigma_g^+) \rightarrow OH^+ + H$  и некоторых ее изотопических вариантов. I. Поверхность потенциальной энергии и предварительный анализ методом квазиклассических траекторий. Dynamics of the  $O^+(^4S) + H_2(X'\Sigma_g^+) \rightarrow OH^+ + H$  ion-molecule reaction and some of its isotopic variants ( $D_2$  and  $HD$ ). I. Potential energy surface and preliminary quasiclassical trajectory analysis / González M., Aguilar A., Gilibert M. // Chem. Phys.— 1989.— 131, № 2—3.— С. 335—346.— Англ.

На основании существующих неэмпирич. расчетов основного электронного состояния коллинеарной системы  $[OH_2]^+$  и существующих эксперим. данных по исследованию динамики р-ции  $O^+(^4S) + H_2(X'\Sigma_g^+) \rightarrow OH^+ + H$  (двумерная диаграмма рассеяния при  $E=4,5$  эВ, кон-

X. 1989, N 15

станта скорости термич. р-ции и отношение скоростей прямого и обратного процесса) построена потенциальная Пв этой р-ции. Использовалась обобщенная параметризация типа Лондона—Эйринга—Поляны—Сато, позволяющая учесть притяжение фрагментов на больших расстояниях.

Е. Е. Никитин





H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

1989

Vervloet M.,

High Resolut. Fourier  
Transform Spectrosc: Sum.  
Pap. High Resolut. Fourier  
Transform Spectrosc. Top.  
Meet., Santa Fe, N.M., Feb  
13-15, 1989. — Washington



(D.C.), 1989, c. 102-103

(all  $N_2^+$ ; III)

$H_2O^+$

DM 33364

1989

pa mem



(+2)

111:143189q A theoretical rotationally resolved infrared spectrum for oxoniumyl ( $H_2O^+$ )( $X^2B_1$ ). Weis, B.; Carter, S.; Rosmus, P.; Werner, H. J.; Knowles, P. J. (Fachbereich Chem., Univ. Frankfurt, D-6000 Frankfurt, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(5), 2818-33 (Eng). Three-dimensional potential energy and elec. dipole moment functions for the electronic ground state of  $H_2O^+$  were calcd. from highly correlated multiconfiguration ref. CI (MRCI) electronic wave functions. The analytic representations of these functions were used in vibrational and perturbational calcs. of the rovibrational absorption spectrum of  $H_2O^+$ . The quartic force fields in normal coordinates were used in the evaluation of the equil. spectroscopic consts. in  $H_2O^+$ ,  $D_2O^+$ , and  $HDO^+$  by perturbation theory. The equil. structure, vibrational band origins, centrifugal distortion consts. and rotational energy levels agree very well with the available exptl. data. Abs. vibrational band intensities were calcd. from the dipole moment functions and were compared with theor. integrated band intensities. The radiative lifetimes of excited vibrational states exhibit mode specific variations. The rotationally resolved room temp. absorption spectra were evaluated ab initio for the pure rotational and the  $\nu_2$ ,  $2\nu_2$ ,  $\nu_1$ ,  $\nu_3$ , and  $3\nu_2$  transitions. The rovibrational elec. dipole transition matrix elements and abs. line intensities are given for the most intense transitions. These data take full account of anharmonicity effects and vibration-rotation coupling.

C.A. 1989, 111,  
N16

111

$H_2D^+$

[D.M. 35847]

1990

Carter S., Sieyer W.,

J. Chem. Phys. 1990, 93,

in press  
in press

N12, 8902-8914.

A variational method for the  
calculation of vibrational  
energy levels of triatomic

molecules using a Hamiltonian  
in hyperspherical coordinates.

H<sub>2</sub>O

1990

13 Б1140. Молекулярные параметры молекул H<sub>2</sub>X (X=O, S, Se, Te). Molecular parameters of H<sub>2</sub>X (X=O, S, Se, Te) / Chopra J. R., Arora U. S., Pandey A. N. // Acta Cien. Indica. Phys.— 1990.— 16, № 4.— С. 193—200.— Англ.

В рамках модели гармонич. валентно-силового поля по эксперим. частотам колебаний с использованием данных по дейтероизомерам рассчитаны силовые постоянные и коэф. влияния для молекул типа H<sub>2</sub>X (X=O (I), S (II), Se (III), Te (IV)) в предположении их линейного строения (Spectroscopy Letters.— 1987.— 20.— С. 537). Полученные силовые поля сравниваются с лит. данными для I-IV, полученных для нелинейных структур. Силовые поля I-IV использованы для расчета средних амплитуд колебаний. Рассчитаны величины магнитной восприимчивости, поляризуемости и длин связей, поперечных сечений для ионизации электронов для линейных молекул I-IV. Рассмотрены корреляции молекул параметров со структурными параметрами I-IV. Г. М. К.

М.П.

IX (73)

X. 1992, N 13

H<sub>2</sub>S, H<sub>2</sub>Se, H<sub>2</sub>Te

$H_2O^+$

(Om 34 471)

1990

113: 103765n Equilibrium structure and potential-energy surface for the water cation. Kauppi, Esa; Halonen, Lauri (Dep. Phys. Chem., Univ. Helsinki, SF-00170 Helsinki, Finland). Chem. Phys. Lett. 1990, 169-5), 393-8 (Eng). Exptl. vibrational and rotational data of the electronic ground state ( $X^2B_1$ ) of  $H_2O^+$  and  $D_2O^+$  are used to derive an equil. structure and a potential-energy surface for the water cation. The vibrational problem is solved variationally with an approx. curvilinear internal-coordinate Hamiltonian. The rotational motion is treated with perturbation theory by using theor. expressions for a consts. Potential-energy parameters are optimized with the nonlinear least-squares method.

расчет  
равновесной  
структуры  
по эксперим.  
данным

(7)  $D_2O^+$

C. A. 1990, 113, N 12

H<sub>2</sub>O

[Im. 36 052]

1991

mm-wave  
теробу  
спектр  
Amaro T.; Scappini F.,  
Chem. Phys. Lett.,  
1991, 182, N2, 93-95

Millimeter-wave spectrum of  
rotationally excited H<sub>2</sub>O.



H<sub>2</sub>O

1991

9 Б1159. Водородная связь, структура и свойства H<sub>2</sub>O и (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>. The hydrogen bond, and the structure and properties of H<sub>2</sub>O and (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>: [Pap.] Int. Symp. Hydrogen Bond Phys., II Ciocco, Barga, 11—14 Sept., 1990. / Buckingham A. D. // J. Mol. Struct.,— 1991.— 250, № 2—4.— С. 111—118.— Англ.

Краткий обзор по проблеме Н-связи, гл. обр. между молекулами воды. Наиболее подробно рассмотрены мономер и димер воды. Оценена эффективность различных подходов к определению геометрии и энергии структур. Сопоставлены эксперим. и неэмпирич. структурные и энергетич. параметры мономеров H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O и H<sub>2</sub>S. Проведено сравнение частот и интенсивностей в ИК-спектрах мономера и димера воды, полученных в приближениях ССП и МП2. Н-связь рассматривается как сильное вандерваальсово взаимодействие, имеющее электростатич. природу. Библ. 41. Ю. В. Новаковская

М.П.

(+2) ~~12~~

Х. 1992, № 9

$H_2O^+$

1991

116: 71053u Observation of the visible absorption spectrum of oxoniumyl ( $H_2O^+$ ). Das, Biman; Farley, John W. (Phys. Dep., Univ. Nevada, Las Vegas, NV 89154 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(12), 8809-15 (Eng). The  $\tilde{A}^2A_1-X^2B_1$  system of  $H_2O^+$  was obsd., using laser absorption spectroscopy in a velocity-modulated discharge. A total of 78 transitions between 14,794 and 15,475  $cm^{-1}$  have been obsd. with an uncertainty (1 SD) of 0.02  $cm^{-1}$ , including 76 transitions in the (0,7,0)-(0,0,0) band and 2 in the (0,8,0)-(0,0,0) band. This species is important for cometary astronomy, and intriguing for mol. physics because of its prominent Renner-Teller interaction. Careful measurements were made of the relative intensities of the absorption lines, which were measured to an accuracy of 13% (1 SD). This is the first observation of the A-X transition in absorption; all previous data were obtained in emission with conventional grating spectroscopy. The transition frequencies of this new data are in good agreement with previous work, and have improved accuracy. The new data have definite rejection of the interfering lines from excited neutral  $H_2$  that plagued previous work. Compared with previous work, the new data have the first quant. measurement of intensities. The ratio of the Franck-Condon factors  $I_8/I_7 = 0.99 \pm 0.43$  was measured for the first time, where  $I_7 = FCF[(0,0',0)-(0,0,0)]$ .

некомплекс  
человек

$\tilde{A}^2A_1-\tilde{X}^2B_1$

C. A. 1992, 116,

N 8

$H_2O^+$

1991

№ 11 Б1128. Наблюдение спектра поглощения  $H_2O^+$  в видимой области. Observation of the visible absorption spectrum of  $H_2O^+$  /Das B., Farley J. W. //J. Chem. Phys. — 1991. — 95, № 12. — С. 8809—8815. — Англ.

Используя лазерную спектроскопию поглощения в разряде с модулированной скоростью исследована система  $\tilde{A}^2\tilde{A}_1 - \tilde{X}^2\tilde{B}_1$   $H_2O^+$ . В поглощении зарегистрировано 78 переходов в области  $14\,794 - 15\,475$   $м^{-1}$ , относящихся к  $(0,7,0) - (0,0,0)$ - и  $(0,8,0) - (0,0,0)$ -полосам. Проведены прецизионные измерения положений ( $0,02$   $см^{-1}$ ) и интенсивностей (13%) наблюдаемых линий. Отмечено хорошее согласие полученных результатов с данными спектров испускания. Измерено отношение факторов Франка—Кондона:  $I_8/I_7 = 0,99 \pm 0,43$ . Отмечается перспективность данного метода для исследований спектра  $H_2O^+$  в области проявления вз-вия Реннера—Теллера. Библ. 41. Е. А. Пазюк

М.А.

Х. 1993, № 11

H<sub>2</sub>O

1991

114: 195448e Photoionization of rotationally cooled water and water-d<sub>2</sub> in the region 650-990 Å. Dehmer, P. M.; Holland, D. M. P. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(5), 3302-14 (Eng). Room temp. and rotationally cooled relative photoionization cross sections for H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O were detd. in the wavelength region 650-990 Å with a wavelength resolu. of 0.06-0.11 Å (~7-12 cm<sup>-1</sup>); the spectra were normalized to the abs. photoionization cross sections detd. by D. H. Katayama et al. (1973)] with lower resolu. A rotational anal. of the II subbands in the (0,6,0) and (0,8,0) bands of the (A<sup>2</sup>A<sub>1</sub>)3db<sub>1</sub> <sup>1</sup>B<sub>1</sub> ← X<sup>1</sup>A<sub>1</sub> Rydberg transition detd. the symmetry of the upper state, in addn., the series was extended to higher principal quantum nos. The anal. of these and other bands was made difficult both by the large natural linewidths of the rotational transitions and by the absence of transitions to rotational levels with N' ≥ 3.

M. A.

C. A. 1991, 114, N20

$\text{OH}_2$

1991

Dixie A. N.

M

Indian J. Pure and Appl.  
Phys. 1991. 29, n1. c.

(cr.  $\bullet$   $\text{BeH}_2$ ; III)

$\text{OH}_2^+$

1991

20 Б1080. О поверхности потенциальной энергии линейного иона  $\text{OH}_2^+(\Sigma^-)$ . On the potential energy surface for collinear  $\text{OH}_2^+(\Sigma^-)$  / Illas Francesc, Bagus Paul S. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 5.— С. 3774—3777.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитана потенциальная ПВ основного электронного состояния  $\Sigma^-$  линейной конфигурации иона  $\text{OH}_2^+$ . Использован базис атомных натуральных орбиталей, аппроксимир. набором сгруппир. гауссовых ф-ций  $(14s9p4d3f)/[5s4p3d2f]$  на О и  $(8s4p3d)/[3s2p1d]$  на Н. Расчеты методом КВ проведены с помощью вариационно-пертурбац. процедуры CIPSI. Для оценки точности методики расчета сопоставлены с данными полного метода КВ результаты расчетов  $\text{OH}$ ,  $\text{OH}^+$ , О и  $\text{O}^+$ . Получена величина энергии коллинеарной р-ции  $\text{O}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$   $\Delta E = -0,30$  эВ (эксперим. значение  $-0,45$  эВ). Сделан вывод, что основной вклад в ошибку величины  $\Delta E$  дал потенциал ионизации О и что ошибка связана с ограниченностью базисного набора, а не разл. конфигурац. взаимодействия.

М.П.

X. / 1991, N 20

А. А. Сафонов

$\text{OH}_2^+$

1991

114:150739; On the potential energy surface for collinear oxoniumyl ( $\text{OH}_2^+$  ( $^4\Sigma^-$ )). Illas, Francesc; Bagus, Paul S.; Rubio, Jaime; Gonzalez, Miguel (Almaden Res. Cent., IBM Res. Div., San Jose, CA 95120-6099 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(5), 3774-7 (Eng). The potential energy surface for collinear  $\text{OH}_2^+$  ( $^4\Sigma^-$ ) has been investigated at the CI level using large primitive basis sets of Gaussian-type orbitals (GTO) and the general at. natural contraction (ANO). The CI calcs. were carried out using the CIPSI algorithm and the accuracy established by comparison with full CI (FCI) test calibrations on the atoms and mol's. of interest in the present work. For the reaction  $\text{O}^+(^4S_u) + \text{H}_2(^1\Sigma_g^+) \rightarrow \text{OH}^+(^3\Sigma^-) + \text{H}(^2S_g)$ , the calcd. value for the energy change of the reaction ( $\Delta E$ ) is -0.39 eV to be compared with an exptl. value of -0.45 eV. The error in  $\Delta E$  arises from the error in the ionization potential of oxygen and does only affect the reactants but not the products, while the discrepancy with the exptl. is limited by the finite size of the basis set and not by truncations on the CI expansion. The collinear  $\text{OH}_2^+$  min. has been found to lie 0.338 eV below the products with an estd. accuracy of 0.01 eV.

( $4\Sigma^-$ )  
not a minimum  
not a minimum  
the minimum  
CA 1991, 114, 3774

$H_2O^+$

1991

6Д134. Неэмпирическое исследование вибронной структуры электронных состояний  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  в  $H_2O^+$ . Ab initio study of the vibronic structure for the  $X^2B_1$  and  $A^2A_1$  electronic states of  $H_2O^+$  / Reuter W., Peric M., Peyerimhoff S. D. // Mol. Phys.— 1991.— 74, № 3.— С. 569—589.— Англ.

Неэмпирическим методом НИК-КВ рассчитана вибронная структура электронных состояний  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  в катионах  $H_2O^+$ ,  $HDO^+$  и  $D_2O^+$ . Подчеркнуто, что достаточно высокий уровень точности расчетов достигнут при явном учете связи между различными степенями свободы, а также при включении эффектов третьего электронного состояния,  $^2B_2$ . Определены поверхности потенц. энергии, структурные параметры, рассчитаны вибронные энергетич. уровни, а также распределения интенсивностей в спектрах поглощения и излучения для переходов, включающих вибронные уровни  $K=0$  и 1. Определены спин-орбитальные расщепления вибронных уровней. Показано, что полученные результаты позволяют интерпретировать многие эксперим. данные.

М.А.

42

ф. 1992, № 6



$H_2O^+$

М.А.

Х. 1992, № 13

1991  
D 13 B1065. Неэмпирическое изучение вибронной структуры электронных состояний  $X^2B_1$  и  $A^2A_1$  иона  $H_2O^+$ . Ab initio study of the vibronic structure for the  $X^2B_1$  and  $A^2A_1$  electronic states of  $H_2O^+$  / Reuter Wil-li, Perić Miljenko, Peyerimhoff Sigrid D. // Mol. Phys.— 1991.— 74, № 3.— С. 569—589.— Англ.

Проведены неэмпирич. расчеты иона  $H_2O^+$  в приближении configuraц. взаимодействия. Использован базис с поляризац.  $d$ - и  $f$ -ф-циями на О. В зависимости от угла НОН оптимизирована длина ОН связи и рассчитаны сечения потенциальных ПВ состояний  $A^2A_1$  и  $X^2B_1$  для симм. и антисимм. валентных координат и деформац. координаты. Вибронные уровни  $H_2O^+$ ,  $HDO^+$  и  $D_2O^+$ , распределения интенсивностей в спектрах поглощения и испускания и спин-орбитальные расщепления вибронных уровней сопоставлены с полученными ранее неэмпирически и на основе расчета по эксперим. потенциальной ПВ. Показано, что нумерацию вибронных уровней состояния  $A^2A_1$ , произведенную по эксперим. данным, следует исправить на единицу. Отмечена необходимость последующего учета эффектов, связанных с наличием третьего электронного состояния  $^2B_2$ .  
Ю. В. Новаковская

H<sub>2</sub>O

Am. 36 476

1991

115: 290022r  $\nu_2$  Band of water (H<sub>2</sub><sup>16</sup>O): line strengths and transition frequencies. Toth, Robert A. (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91109 USA). *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* 1991, 8(11), 2236-55 (Eng). High-resoln. spectra of H<sub>2</sub><sup>16</sup>O were recorded with a Fourier-transform spectrometer covering transitions in the (010)-(000) band from 1066 to 2582 cm<sup>-1</sup>. The measured line frequencies were used along with addnl. data taken from studies at microwave and far-IR frequencies in an anal. to obtain rotational energies of levels in the (000) and (010) states. Measurements of the line strengths were fitted least squares to a model in which the dipole moment matrix elements were represented by as many as 19 expansion coeffs. The results produced computed line strength values that are in excellent agreement, on the av., with the 874 exptl. transitions included in the anal. These results provide a more accurate representation of the line positions and strengths for the (010)-(000) band than are currently available on the HITRAN absorption line parameter compilation.

P<sub>2</sub>, M.A.

C.A. 1991, 115, N 26.

$H_2O^+$

DM 36072

1991

12 Д88. Измерение распределения валентных углов в  $H_2O^+$ . Measurement of the distribution of bond angles in  $H_2O^+$  / Zajfman D., Belkacem A., Graber T., Kanter E. P., Mitchell R. E., Naaman R., Vager Z., Zabransky B. J. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 4. — С. 2543—2547.— Англ.

Обсуждаются результаты прямого наблюдения структуры и деформаций колебаний катиона  $H_2O^+$  с помощью метода «визуализации кулоновского взрыва» (Vager Z., Naaman R., Kanter E. R. // Science.— 1989.— 244.— С. 426). Катион  $H_2O^+$  является идеальным объектом для применения этого метода, поскольку для него имеются многочисленные эксперим. и теоретич. данные о геометрических и частотных характеристиках. Показано, что предлагаемый подход позволяет определить распределения валентных  $H-O-H$  углов  $\Theta$  и извлечь из полученного распределения точные значения  $\Theta_c$ , а также колебательные частоты.

М.А.

ф. 1991, № 12

$H_2O^+$

Om. 36072

1991

114: 171730q Measurement of the distribution of bond angles in oxoniumyl ( $H_2O^+$ ). Zajfman, D.; Belkacem, A.; Graber, T.; Kanter, E. P.; Mitchell, R. E.; Naaman, R.; Vager, Z.; Zabransky, B. J. (Phys. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 94(4), 2543-7 (Eng). A quant. anal. of the bending mode of  $H_2O^+$  is made using the Coulomb Explosion technique. The full extent of the angular distribution is measured and is in good agreement with the previously measured bending frequency. The equil. value for the angle is extd. from the data with high precision and is in excellent agreement with theor. predictions as well as spectroscopic measurements.

$\nu, \angle$

C.A. 1991, 114, N18

$H_2O^+$

DM-36072

1991

2 Б1133. Измерение распределения валентных углов в  $H_2O^+$ . Measurement of the distribution of bond angles in  $H_2O^+$ . / Zajfman D., Belkacem A., Graber T., Kanter E. P., Mitchell R. E., Naaman R., Vager Z., Zabransky B. J. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 4.— С. 2543—2547.— Англ.

Методом кулоновского взрыва определено распределение валентных углов в ионе  $H_2O^+$ . Равновесные значения валентного угла, длины связи Н—О и частоты  $\nu_2$ , полученные обработкой результатов измерения в рамках гармонич. приближения, хорошо согласуются с лит. теор. и эксперим. значениями, что позволило сделать вывод о надежности получаемой методом кулоновского взрыва структурной информации.

В. Б. Павлов-Веревкин

М.П.

Х. 1992, № 2

$H_2O^+$

1992

— 17 Б1174. Инфракрасная спектроскопия и равновесная структура  $H_2O^+$  ( $X^2B_1$ ). Infrared spectroscopy and equilibrium structure of  $H_2O^+(X^2B_1)$  /Huet T. R., Pursell C. J., Ho W. C., Dinelli B. M., Oka T. //J. Chem. Phys. —1992. —97, № 9. —С. 5977—5987. —Англ.

В области  $3100—3600\text{ см}^{-1}$  с высоким разрешением (спектрометр на базе лазера на центрах окраски) измерена и проанализирована вращат. структура полос  $\nu_1$ ,  $\nu_3$  и  $\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$   $H_2O$  [ $X^2B_1$ ]. Ионы  $H_2O^+$  получали в разряде переменного тока через смеси ~~газов~~  $He/H_2O$  или  $He/H_2/O_2$ . При регистрации спектров использовали метод модуляции ионов по скоростям. Приведено положение и отнесение наблюдаемых линий. Значения (в  $\text{см}^{-1}$ ) рассчитанных вращат. постоянных  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ; параметров центробежного искажения  $\Delta_N(\cdot 10^3)$ ,  $\Delta_{NK}(\cdot 10^3)$ ,  $\Delta_K(\cdot 10^3)$ ,  $\delta_N(\cdot 10^3)$ ,  $\delta_K(\cdot 10^3)$ ,  $H_N(\cdot 10^4)$ ,  $H_{NK}(\cdot 10^6)$ ,  $H_K(\cdot 10^6)$ ; параметров спин-вращат. вз-вия  $E_{aa1}$ ,  $E_{bb1}$ ,  $E_{cc1}$ ,  $\Delta_{NK}^s$ ,  $(\cdot 10^3)$ .

М.А.

X. 1993, N 17

$\Delta_k^s (\cdot 10^3)$ : основное состояние; 29,0359; 12,42298;  
 8,46921; 1,015; —5,007; 44,20; 0,3817; 1,795; 0,33; —5,1;  
 151; —1,0882; —0,1130; 0,0032; —0,72; 6,32; состояние  
 $v_1=1$ : 28,3928; 12,19289; 8,29520; 0,987; —4,971; 43,33;  
 0,3750; 1,883; 0,141; —5,1; 151; —1,0732; —0,1130;  
 0,0027; —0,55; 7,37,  $v_0=3212,8598$ ; состояние  $v_3=1$ :  
 27,84879; 12,26881; 8,33146; 1,0077; —5,127; 40,558;  
 0,3732; 1,641; 0,301; —6,13; 131,49; —1,0209; —0,1111;  
 0,0024; —0,719; 5,84;  $v_0=3258,0360$ , постоянная карио-  
 лисова вз-вия  $\xi_{13}^c=0,44277$ . Аналогичного рода данные  
 приведены для уровня  $v_2+v_3$  ( $v_0=3234,2469 \text{ см}^{-1}$ ). Зна-  
 чения равновесных постоянных и параметров колебатель-  
 но-вращат. вз-вия (в  $\text{см}^{-1}$ ):  $A_e=27,789$ ,  $B_e=12,588$ ,  $C_e=$   
 $=8,700$  ( $R_e=0,9992$  А,  $\alpha_e=109,30^\circ$ ),  $\alpha_{1,2,3}^A$  — соотв. 0,6431,  
 —4,3242, 1,1817,  $\alpha_{1,2,3}^B$  — соотв. 0,2301, —0,0535, 0,1542  
 $\alpha_{1,2,3}^C$  — соотв. 0,1740, 0,1504, 0,1378. Рассчитаны и при-  
 водятся параметры квадратичного и кубич. силовых полей  
 $\text{H}_2\text{O}^+$ . Библ. 50.

В. М. Ковба



$H_2O^+$

1992

$(X^2B_1)$

[UK chemist &  
copying]

C.A. 1993, 118, N 8

118: 69151x Infrared spectroscopy and equilibrium structure of oxoniumyl ( $H_2O^+(X^2B_1)$ ). Huet, T. R.; Pursell, C. J.; Ho, W. C.; Dinelli, R. M.; Oka, T. (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(9), 5977-87 (Engl). A color center laser spectrometer along with velocity modulation detection was used to record the absorption spectrum of  $H_2O^+$  produced in an a.c. glow discharge 3180-3390  $cm^{-1}$  with a gas mixt. of He/ $H_2O$ . The predominant role of the reaction of metastable  $Hq$  with  $H_2O$  was obsd. The  $H_2O^+$  ion is also present in the spectra recorded 3100-3600  $cm^{-1}$  with a gas mixt. of He/ $H_2O/O_2$  and some features are illustrated. The  $\nu_1$  and  $\nu_2+\nu_3-\nu_2$  bands are assigned and the previous anal. of the  $\nu_3$  band was extended. The  $\nu_1$  and  $\nu_3$  states were fitted together taking into account the vibration-rotation interaction. The mol. consts. were obtained for the  $\nu_1$  and  $\nu_2+\nu_3$  states and they were improved in the case the  $\nu_3$  and the ground vibrational states. The equil. structure was derived [ $r_e = 0.9992(6)$  Å,  $\theta_e = 109.30(10)^\circ$ ] and the quadratic and cubic force field consts. were evaluated.



$H_2O^+$

1992

5 Д52. Неэмпирическая вращательно-колебательная структура  $C_{2v}$ -изотопов  $H_2O^+$ . Ab initio ro—vibrational structure of the  $C_{2v}$  isotopes of  $H_2O^+$  / Wang F., von Nagy-Felsobuki E. I. // Austral. J. Phys. — 1992. — 45, № 5. — С. 651—669. — Англ.

Расчеты вращательно-колебательной структуры  $C_{2v}$ -изотопов  $H_2O^+$  проведены с использованием вариационного решения гамильтониана Эккарта—Уотсона в норм. координатах и неэмпирич. поверхности потенц. энергии. Проведено отнесение колебательных состояний и там, где возможно сопоставление, получено согласие с экспериментом и с данными неэмпирических вариационных расчетов, проведенных ранее и использовавших другое силовое поле и ядерный гамильтониан во внутренних координатах. Рассчитаны также вращательные уровни основного и первого возбужденного колебательных состояний ионов  $H_2O^+$  и  $D_2O^+$ , согласующиеся с экспериментом.

М.А.

41

ФР 1993, IV5

$H_2O^+$

1992

14 Б1050. Неэмпирическая колебательно-вращательная структура  $C_2$  изотопомеров  $H_2O^+$ . Ab initio ro-vibrational structure of the  $C_2$  isotopes of  $H_2O^+$  /Wang F., von Nagy-Felsobuki E. I. //Austral. J. Phys. — 1992. — 45, № 5. — 651 — 669. — Англ.

С помощью прямого вариационного метода вычислены и представлены в таблицах низшие колебательно-вращательные уровни ( $l \leq 5$ ) изотопомеров молекул иона  $H_2O^+$  в основном электронном состоянии, а также вращательные и кориолисовы постоянные. Для аналитического представления лит. неэмпирических данных по поверхности потенциальной энергии использован метод Паде-аппроксимант. Результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными и вариационными оценками др. авторов.

С. В. Петров

М.П.

X. 1993, N 14

$H_2O^+$

1993

118: 263170t Theoretical spin-rovibronic  $^2A_1(\Pi_u)-^2B_1$  spectrum of the oxoniumyl, oxoniumyl-d, and oxoniumyl-d<sub>2</sub> ( $H_2O^+$ ,  $HDO^+$ , and  $D_2O^+$ ) cations. Brommer, Matthias; Weis, Bernhard; Follmeg, Bernd; Roamus, Pavel; Carter, Stuart; Handy, Nicholas C.; Werner, Hans-Joachim; Knowles, Peter J. (Fachber. Chem. Univ. W-6000 Frankfurt, Germany). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(7), 5222-34 (Eng). Based on extensive ab initio multiconfiguration ref. CI (MRCI) electronic structure calcns., three-dimensional potential energy functions for the  $A^2A_1(\Pi_u)-X^2B_1$  linear/bent Renner-Teller systems of  $H_2O^+$ ,  $HDO^+$ , and  $D_2O^+$  have been generated and used in beyond Born-Oppenheimer calcns. of the spin-rovibronic energy levels by a variational approach. The effects of anharmonicity, rotation vibration, electronic angular momenta, and spin coupling effects have been accounted for. For  $H_2O^+$ ,  $HDO^+$ , and  $D_2O^+$  vibronic band origins for the bending levels to  $K_a = 5$  and for selected stretching and combination levels are given. Almost all exptl. known data have been reproduced with an accuracy better than  $10\text{ cm}^{-1}$  after minor modifications of the ab initio potential energy functions. The calcd. values will facilitate further exptl. assignments. A consistent interpretation of the photoelectron spectra for the different isotopes of water is given. Previous assignments of the bending modes in the  $A^2A_1$  state have been revised by two quantum nos.

$(^2A_1(\Pi_u)^2-B_1)$   
 $v_{\text{ger}}$

ⓧ (2)

C. A. 1993, 118, N 2.6  $HDO^+$ ,  $D_2O^+$

$H_2O^+$

1993

/ 118:134989t The vibrational spectra of molecular ions isolated in solid neon. X. Oxoniumyl, oxoniumyl-d, and oxoniumyl-d<sub>2</sub> ( $H_3O^+$ ,  $HDO^+$ , and  $D_2O^+$ ). Forney, Daniel; Jacox, Marilyn E.; Thompson, Warren E. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). J. Chem. Phys. 1993, 98(2), 841-9 (Eng). When a Ne: $H_2O$ 2:200 sample is codeposited at approx. 5 K with a beam of neon atoms that have been excited in a microwave discharge, new IR absorptions appear close to the gas-phase band centers of the three vibrational fundamentals of  $H_3O^+$ . Detailed isotopic substitution studies confirm this assignment and provide assignments for all of the vibrational fundamentals of  $HDO^+$  and  $D_2O^+$ . When ions are present in the neon matrix, rotation of a significant fraction of the water mols. is inhibited. Electrons produced by the photodetachment of anions, which must be present to maintain overall charge neutrality of the deposit, accelerate nuclear spin equilibration of water in the matrix. As the concn. of  $H_2O^+$  is decreased by capture of the photodetached electrons, the absorptions assigned to nonrotating water are also reduced in intensity. The nature of the other ionic species which may be present in the sample is considered.

UK chemp &  
manuse

(+2) ~~17~~

c.A.1993, 118, N14

$HDO^+$ ,  $D_2O^+$

1993

$\text{H}_2\text{O}^+$   
 $\text{HDO}^+$   
 $\text{D}_2\text{O}$

13 Б1145. Колебательные спектры молекулярных ионов, изолированных в твердом неоне. X.  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{HDO}^+$  и  $\text{D}_2\text{O}^+$ . The vibrational spectra of molecular ions isolated in solid neon. X.  $\text{H}_2\text{O}^+$ ,  $\text{HDO}^+$ , and  $\text{D}_2\text{O}^+$  // J. Chem. Phys. — 1993. — 98, № 2. — С. 841—849. — Англ.

М.А.

Смесь  $\text{Ne}:\text{H}_2\text{O} > 200$  сосаждали при 5 К с пучком атомов Ne, прошедшим через МВ-разряд. Аналогичные эксперименты проведены с  $\text{HDO}$ ,  $\text{D}_2\text{O}$  и  $\text{H}_2^{16}\text{O}$ . В ИК-спектрах полученных матриц, помимо известных полос воды и ее полимеров, наблюдался ряд новых, отнесенных к соотв-щим молекул. ионам. Их присутствие в матрице препятствует свободному вращению молекул воды. Пред. сообщ. см. // J. Chem. Phys. — 1992. — 97, № 3. — С. 1664.

Л. В. Серебренников

X. 1993, N 13

$\text{H}_2\text{O}^+$

1994

Р 10 Б1234. Экспериментальное исследование колебательных времен жизни. Ионы  $\text{H}_2\text{O}^+$  и  $\text{D}_2\text{O}^+$  в основном электронном состоянии ( $\tilde{X}^2B_1$ ). Experimental investigation of vibrational radiative lifetimes:  $\text{H}_2\text{O}^+$  and  $\text{D}_2\text{O}^+$  ions in their ground electronic state ( $X^2B_1$ ) / Heninger M., Lemaire J., Mauclaire G., Fenistein S., Jullien S., Marx R. // J. Chem. Phys. — 1994. — 101, № 3. — С. 1923—1929. — Англ.

М.А.

Р(4)  $\text{H}_2\text{O}^+$

X.1995, N10

H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

[Om. 38 110]

1995

Jonathan Tennyson,  
Bianca M. Dinelli, et al.

кон. ср.  
уражен

J. Mol. Struct. (Thechem)  
1995, 341, 133-140

F: H<sub>2</sub>O<sup>++</sup>

1999

P: 3

132:99606      The H<sub>2</sub>O<sup>++</sup> Ground State Potential  
Energy Surface.      Bunker, P. R.; Bludsky, Ota;  
Jensen, Per; Wesolowski, S. S.; Van Huis, T. J.;  
Yamaguchi, Schaefer, H. F., III      Steacie  
Institute for Molecular Sciences, National Research  
Council of Canada      Ottawa, ON K1A 0R6, Can.

J. Mol. Spectrosc., 198(2), 371-375  
(English) 1999 At the correlation-consistent  
polarized-valence quadruple-zeta complete active  
space SCF 2nd-order CI level of ab initio theory  
(cc-pVQZ CASSCF-S the authors calcd. 129 points on  
the ground electronic state potential en surface of  
the H<sub>2</sub>O dication H<sub>2</sub>O<sup>++</sup>; this calcn. includes the  
energy of X<sup>3</sup>. OH<sup>+</sup> at equil. and the energy of the  
triplet O atom. The authors detd. th parameters in  
an anal. function that represents this surface out

C.A. 2000, 132



to the ( $H^+$ ) and ( $O + 2H^+$ ) dissocn. limits, for bending angles from 70 to 180.degr There is a metastable min. in this surface, at an energy of 43,600  $cm^{-1}$  at the  $H^+ + OH^+$  dissocn. energy, and the geometry at this min. is linear ( $D.\infty.h$ ), with an OH bond length of 1.195 A. On the path to dissocn.  $OH^+$ , there is a saddle point at an energy of 530  $cm^{-1}$  above the min., and geometry at the saddle point is linear ( $C.\infty.Kv$ ) with OH bond lengths 1.121 and 1.489 A. Using the stabilization method, the authors calcd. th lowest resonance on this surface. Relative to the metastable local min. potential energy surface, the position of the lowest resonance for  $H_2O^{++}$ , and  $T_2O^{++}$  is 1977(85), 1473(25), and 1249(10)  $cm^{-1}$ , resp., where the width each resonance (in  $cm^{-1}$ ) is given in parentheses.

---

1999

F: H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>

P: 3

131:327746      Dissociative recombination and excitation  
of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> and HDO<sup>+</sup>.      Je M. J.; Bilodeau, R. C.; Heber,  
O.; Pedersen, H. B.; Safvan, C. P.; Urbain Zajfman, D.;  
Andersen, L. H.      Institute      of      Physics      and

Astronomy, Universi Aarhus      Aarhus      DK-8000,      Den.

Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys., 60(4),  
2970-2976 (English) 1999      Dissociative recombination  
and excitation of H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> and HDO<sup>+</sup> in the vibrational  
ground state have been studied at the heavy-ion storage  
ring Abs. cross sections have been measured in the

energy range from  $\sim 0.1$  meV eV. The total cross sections for dissociative recombination are essentially same for the two mol. ions. Complete branching ratios for all possible p channels in dissociative recombination at  $E=0$  have been detd. Three-part breakup accounts for  $\sim 60\%$  of the recombination events. With  $\text{HDO}^+$ , recomb into  $\text{OD}+\text{H}$  is twice as probable as recombination into  $\text{OH}+\text{D}$ . An isotope eff also evident in the cross sections for dissociative excitation of  $\text{HDO}^+$ , w prodn. is more likely than  $\text{D}^+$  prodn.