

O₃ (di)

XI 996

(1965)

Clough Sh. A., Kneizys. F. X.,
AD 628059, Avail. CR. STJ,
86 pp, 1965

ca 1964

20

O₃

Спектр,

линии.

рост,

вращат.

анализ

8 Д135. Кориолисово взаимодействие между основными колебаниями озона ν_1 и ν_3 . Clough Shepard A., Kneizys Francis X. Coriolis interaction in the ν_1 and ν_3 fundamentals of ozone. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 5, 1855—1861 (англ.)

Изучен ИК-спектр высокого разрешения озона ($^{16}\text{O}_3$) в области $1000\text{—}1150\text{ см}^{-1}$. Проводится анализ вращательной структуры полос ν_1 ($1103,16\text{ см}^{-1}$) и ν_3 ($1043,1\text{ см}^{-1}$). Наблюдаемые аномалии в этой области спектра — отклонение характеристик полос ν_1 и ν_3 от соответствующих характеристик полос типа В и А-свидетельствует о сильном кориолисовом взаимодействии между колебаниями ν_1 и ν_3 . Для нахождения положения и интенсивности отдельных вращательных линий полос ν_1 и ν_3 проводится численная диагонализация оператора колебательно-вращательной энергии с учетом члена пер-

1966

1091

XI - 1601

ф. 1966. 89

вого порядка $iY_{13}P_y$, соответствующего кориолисовому взаимодействию, и члена второго порядка $-X_{13}(P_xP_t + P_zP_x)$, соответствующего второй производной от элемента I_{xz} тензора инерции по норм. координатам, который дает существенный вклад в энергию из-за малости разности $\nu_1 - \nu_3 \cong 60 \text{ см}^{-1}$. Вычисленное распределение интенсивности находится в удовлетворительном согласии с эксперим. данными. Используя центробежные постоянные, найденные для основного состояния, авторы получили следующие значения для вращательных постоянных уровней ν_1 и ν_3 и коэф. взаимодействия X_{13} и Y_{13} : $A_1 = 3,557$, $B_1 = 0,4427$, $C_1^* = 0,3926$; $A_3 = 3,500$, $B_3 = 0,4412$, $C_3^* = 0,3910$, $Y_{13} = 0,468$, $X_{13} = 0,0098 \text{ см}^{-1}$.

М. Алнев

1966

O₃
 Aug. 1966

Coriolis interaction in the ν_1 and ν_3 fundamentals of ozone. Shepard A. Clough and Francis X. Kneizys (Air Force Cambridge Res. Labs., Bedford, Mass.). *J. Chem. Phys.* 44(5), 1855-61 (1966)(Eng). The ν_1 and ν_3 vibration rotation spectrum of $^{16}\text{O}_3$ in the 9.0- μ region has been analyzed. The 2 vibrational states are coupled through a Coriolis term, $iY_{13}P_y$, and a 2nd-order distortion term, $-X_{13}(P_xP_x + P_zP_z)$, in the Hamiltonian. The interaction has been treated by numerically diagonalizing the secular determinant for the 2 states with the coupling included. The effect of the interaction on the intensities has been considered

and absorption contours calcd. in satisfactory agreement with expt. With the distortion parameters fixed to the ground-state values the following consts. have been obtained: $\nu_1 = 1103.15_7$, $A_1 = 3.556_9$, $B_1 = 0.4427_2$, $C_1^* = 0.3926_2$, $\nu_3 = 1042.09_6$, $A_3 = 3.500_4$, $B_3 = 0.4412_5$, $C_3^* = 0.3909_7$, $Y_{13} = -0.46_6$, and $X_{13} = 0.009_8 \text{ cm.}^{-1}$. The value of the dipole-moment ratio, $(\partial M_z / \partial Q_3 |_0 Q_3) / (\partial M_z / \partial Q_1 |_0 Q_1)$, is 10.0 ± 1.5 .
 RCJQ

C.A. 1966. 64. 8

10591h-10592a

X1-1601

16
03

BQ-XI-16.24

1966

23775h The upper electronic state of the $^{16}\text{O}_3$ molecule. Bryon T. Darling and Chung-Wang Lui (Univ. Laval, Quebec, Can.). *J. Mol. Spectrosc.* 21(2), 146-55(1966)(Eng). The configuration of the O_3 mol. in the excited electronic state assoc. with the Huggins' bands is predicted: the transition is $^1A_1 \rightarrow ^1B_2$. For the electronic ground state the known form of the kinetic energy operator together with the known mol. configuration alone produce a convergence of the levels of the ν_3 vibration, which predicts a value of the 3rd harmonic $3\nu_3$ in very good agreement with the observed value of Wilson and Badger. The calcn. is given in detail. RCKP

C.A. 1967-66.6

¹⁶O₃

ВЗР-Х1-1624

1986

20 Б108. Верхнее электронное состояние молекулы ¹⁶O₃. Darling Byron T., Lui Chung-Wang. The upper electronic state of the ¹⁶O₃ molecule. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 2, 146—155 (англ.)

Энергия качательных колебаний молекулы озона в ее основном электронном состоянии определяется формулой $E_n = 524 + 1054,137 n - 11,234 n^2$. Последний коэффициент почти совпадает с коэффициентом в формуле для частот ультрафиолетового спектра озона, полученной ранее (Яковлева А., Кондратьев В. Physik. Z. Sowjetunion, 1936, 9, 106). Отсюда следует, что расстояние между последовательными уровнями в возбужден-

ν_i
и, н.

см. наст.

D₀

X-1967-20

ном состоянии 1B_2 может быть найдено по формуле $\Delta\nu = 620 - 32 \nu_3'$ см⁻¹. Частоты колебаний в этом состоянии равны: $\nu_1' = 600$, $\nu_2' = 347$ и $\nu_3' = 620$ см⁻¹. По этим частотам и с помощью формулы Бэджера вычислена длина связи 1,477 Å и валентный угол 92°59'. Силовая постоянная колебания ν_3' равна 22 872 см⁻¹. Энергия диссоциации 0,55 эв. Из свойств симметрии волновых функций возбужденного состояния выведены правила отбора для электронно-колебательных матричных элементов дипольного момента.

М. А. Ковнер

1603

ВУ-ХИ-1624

1966

√ 9 д 56. Верхнее электронное состояние молекулы $^{16}\text{O}_3$. Darling Byron T., Lui Chung-Wang. The upper electronic state of the $^{16}\text{O}_3$ molecule. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 2, 146—155 (англ.)



Энергия качательных колебаний молекулы озона в ее основном электронном состоянии определяется ф-лой $E_n = 524 + 1054,137n - 11,234n^2$. Последний коэф. почти совпадает с коэф. в ф-ле для частот ультрафиолетового спектра озона, полученной Яковлевой и Кондратьевым (Phys. Z., Sowjetunion, 1936, 9, 106). Эта ф-ла должна быть отнесена именно к качательным колебаниям. Из нее следует, что расстояние между последовательными уровнями в возбужденном состоянии 1B_2 может быть найдено по ф-ле $\Delta\nu = 620 - 32n_3'$ см⁻¹. Частоты колебаний в

ф. 1987. 92

9 —
1,383 + 0,936

этом состоянии равны: $\nu_1' = 600$, $\nu_2' = 347$ и $\nu_3' = 620 \text{ см}^{-1}$. По этим частотам и с помощью ф-лы Беджера вычислены длина связи 1,477 Å и валентный угол 92°59'. Силовая постоянная колебания ν_3' равна 22872 см⁻¹. Из свойств симметрии волн. ф-ций возбужденного состояния выведены правила отбора для электронно-колебательных матричных элементов дипольного момента. Энергия диссоциации этого состояния равна 0,55 эв.

М. А. Ковнер

11 Б200. Вращательные спектры поглощения некоторых молекул типа асимметричного волчка. Часть I. Озон и двуокись серы. Gebbie H. A., Stone N. W. B., Topping G., Gora E. K., Clough S. A., Kneizys F. X. Rotational absorption of some asymmetric rotor molecules. Part I. Ozone and sulfur dioxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 1, 7—24 (англ.)

Исследованы вращательные спектры поглощения озона и двуокиси серы в дальней ИК-области с помощью интерферометра с разрешением $0,25$ и $0,12$ $см^{-1}$. При помощи значений молек. параметров, полученных из МКВ-спектров O₃ и SO₂ вычислены контуры линий и сопоставлены с наблюдаемыми их контурами. Показано, что контуры линий O₃ в области $15-92$ $см^{-1}$ и SO₂ в области до 76 $см^{-1}$, вычисленные с учетом центробежных поправок 2-го порядка, удовлетворительно согласуются с наблюдаемыми. Значительные отклонения вычисленных

1966

(X)

XI-1707

187

O₃

X. 1967. II

и наблюдаемых контуров для SO_2 в области выше 76 см^{-1} приписаны центробежным поправкам 4-го порядка. Комбинируя МКВ-данные с данными ИК-спектров вычислены значения вращательных и центробежных постоянных SO_2 . Получено приближенное выражение для вращательной энергии SO_2 с учетом некоторых поправок 4-го порядка в предельном случае симм. волчка (для значений $K-J$), аналогичное соответствующим выражениям для H_2O и двухатомных молекул. Эта аналогия рассмотрена в рамках приближенной полуклассич. теории центробежного растяжения.

М. Алиев

1966

O₃

SO₂

вращ.
спектр
расчет

12 Д241. Вращательный спектр некоторых молекул типа асимметричного волчка. Ч. I. Озон и двуокись серы. Gebbie H. A., Stone N. W. B., Topping G., Goga E. K., Clough S. A., Kneizys F. X. Rotational absorption of some asymmetric rotor molecules. Part I. Ozone and sulfur dioxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 1, 7—24 (англ.)

Теоретически и экспериментально исследованы вращательные спектры озона (I) и двуокиси серы (II). Спектры получены с помощью интерферометра с разрешением 0,25 и 0,12 см⁻¹. Для I эксперимент и расчеты хорошо согласуются с данными, полученными в микроволн. области. В случае II между расчетом и экспериментом наблюдается расхождение при частотах выше 76 см⁻¹.

XI-1707

ф. 1966. 122

10

Согласие достигается при введении коррекции, учитывающей центробежные искажения высоких порядков. Уточнены значения молекулярных вращательных констант путем учета центробежных возмущений шестого и восьмого порядка. Развита полуклассич. теория центробежных возмущений высокого порядка для симметричных трехатомных молекул, которая позволила интерпретировать некоторые эмпирич. результаты. Библ. 19 назв.
И. Рудявская

1966

Rotational absorption of some asymmetric rotor molecules.
 I. Ozone and sulfur dioxide. H. A. Gebbie, N. W. B. Stone, G. Topping (Basic Phys. Div., Natl. Phys. Lab., Teddington, Engl.), E. K. Gora, S. A. Clough, and F. X. Kneizys. *J. Mol. Spectry.* 19(1), 7-24(1966)(Eng). Far-ir spectra of O_3 and SO_2 have been obtained interferometrically with a resolution of 0.25 and 0.12 cm^{-1} , resp. In the case of O_3 , agreement with predictions based on previously published microwave data has been confirmed. For SO_2 , the far-ir data indicate the need of taking higher-order centrifugal distortion corrections into consideration. Joint use of the far-ir and of published microwave data has made it possible to det. an improved set of mol. rotation const. including 4 6th- and 1 8th-order centrifugal distortion parameters. A semiclassical theory of higher-order centrifugal distortion effects is developed which permits interpretation of some of the empirical results obtained in terms of the usual harmonic valence force const. Agreement between observed and calcd. contours is improved further by inclusion of plausible line-width variations in the calcns. High internal consistency is obtained.

RCKP

O_3
 SO_2

чуррп u.k.

+Lus

C.A. 1966. 64. 6
7534h - 7535a

1707
X1-12

⊗

¹⁶O₃

1966

20 Б107. Проникновение через барьер в молекуле ¹⁶O₃. Часть II. Lui Chung—Wang, Darling
Bygon T. Barrier penetration in the ¹⁶O₃ molecule.
Part II. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 2, 130—145
(англ.)

XI-1277

Рассмотрены туннельные эффекты в качательных колебаниях молекул озона (координата Ψ). Уравнение Шредингера решено с потенциальной функцией $V=k\Psi^2/2$ и для интервала $0 \leq \Psi \leq \pi/3$. Для решения применен метод Венцеля — Крамерса — Бриллюена, и волновые функции выражены через функции Бесселя. Для значений квантового числа 0—15 найдены уровни энергии и точки поворота. Эти величины вычислены также в приближении Ланжера. Высота барьера равна 1,04 эв. Расщепление уровней энергии мало в сравнении со значениями самих энергий. Сравнение обоих приближенных методов позволило установить границы их применимости.

М. А. Ковнер

x. 1967. 20

1603

1966

9 Д55. Проникновение через барьер в молекуле $^{16}\text{O}_3$.
 Ч. II. Lui Chung - Wang, Darling Byron T. Bar-
rier penetration in the $^{16}\text{O}_3$ molecule. Part II. «J. Molec.
 Spectrosc.», 1966, 21, № 2, 130—145 (англ.)

Молекула озона характеризуется тремя эквив. положениями равновесия. Колебания относительно этих положений описываются тремя координатами u , z , χ , соответствующими валентному, деформационному и качательному колебаниям. В этих переменных составлен гамильтониан. Ур-ние Шрёдингера решено при постоянных u , z с потенц. ф-цией $V = k\chi^2/2$ и для интервала $0 \leq \chi \leq \pi/3$. Для решения применен метод ВКБ, и волн. ф-ции выражены через ф-ции Бесселя. Для значений квантового числа 0—15 найдены уровни энергии и точки поворота. Эти величины вычислены также в приближении Ланжера. Высота барьера равна 1,04 эв. Расщепление уровней энергий очень мало в сравнении со значениями самих энергий. Сравнение обоих приближенных методов позволило установить границы их применимости.
 Ч. I см. РЖФиз, 1964, 4Д76. М. А. Ковнер

XI-1277

ф. 1967. 99

1986

03

6708h Barrier penetration in the $^{16}\text{O}_3$ molecule. Chung-Wang Lui and Byron T. Darling (Univ. Laval, Quebec, Can.). J. Mol. Spectrosc. 21(2), 130-45(1966)(Eng). The positions and splittings of the energy levels are calcd. for the χ mode of vibration of the $^{16}\text{O}_3$ mol. under an assumed potential energy. For small values of χ this mode is the usual rocking mode of sym. triat. mols. With increasing χ the mol. passes through a potential barrier and at $\chi = 2\pi/3$ returns to the original configuration, but with a cyclic permutation of the O atoms. RCKP

X1-1277

C.A. 1987: 66.2

O₃

(X1-1278)

1986

70462p The infrared absorption bands of ozone. David
Jenkins McCaa (Ohio State Univ., Columbus). *Univ. Micro-*
films (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-10,027, 150 pp.; *Diss.*
Abstr. B 27(5), 1575(1966)(Eng). SNDC

C.A. 1987. 66. 16.

1966

03
Peple I.A., Segal G.A.

(u.u)
Ив.мет.
раскрт
J. Chem. Phys., 1966, 44,
N 9, 3289-3296.

сст ВМЗ; III

O₃

XI-2219

1966

12 Д197. Молекулярная фотоэлектронная спектроскопия. Ч. V. Озон. Radwan T. N., Turner D. W. Molecular photoelectron spectroscopy. Part V. Ozone. «J. Chem. Soc.», 1966, A, № 1, 85—86 (англ.)

(7) Получен энергетич. спектр фотоэлектронов в O₃, облученном резонансной линией He (585 Å). Приведены значения 5 ионизационных потенциалов, приписываемых озону ($12,3 \pm 0,1$; $12,52 \pm 0,05$; $13,52 \pm 0,05$; $16,4-17,4$; $19,24 \pm 0,1$ эв). Результаты сравнены с данными для NO₂. Ч. IV см. A-Jaboury M. I., May D. P., Turner D. W., «J. Chem. Soc.», 1965, 6350. В. Ревнич

ф. 1966. 122

1966

X1-2219

O₃ (15)

Molecular photoelectron spectroscopy. V. Ozone. T. N. Radwan and D. W. Turner (Imp. Coll., London). *J. Chem. Soc., Inorg., Phys., Theoret.* 1966(1), 85-6(Eng); cf. CA 64, 2754a. The photoelectron energy spectrum of ozone, measured by using He resonance line photons, has been used to derive 5 ionization potentials smaller than 21.21 ev. Comparison is made with the related results for NO₂. RCGF

C.A. 1966. 64.5

5934 f

1966

O₃

1 Д521. Разложение озона атомами O(¹D). Snelling David R., Baiamonte Vernon D., Bair Edward J. Decomposition of ozone by O(¹D). «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 11, 4137—4144 (англ.)

С помощью метода импульсного фотолиза (длительность вспышки 12 мсек.) исследовано цепное фоторазложение O₃, разбавленного He, Ar или N₂. Образующиеся в первичном акте: O₃ + hν → O₂ + O(¹D) (1) атомы O(¹D) быстро вступают во вторичную реакцию O(¹D) + O₃ → → 2 O₂ (2), константа скорости которой (k_{2a} ≥ 2,3 · 10⁹ л/моль · сек) не зависит от т-ры в интервале 205—298° К. Последующие процессы разложения O₃ много медленнее, характер зависимости их скорости от т-ры, давления инертного газа и состава смесей указывает на

и.ф.

ф. 1967. ПД

возможность участия в разложении O_3 колебательно-возбужденных молекул O_2 , образуемых при реакции (2) и дезактивируемых при столкновениях с частицами разбавляющих газов. В N_2 квантовый выход (Φ) разложения O_3 к концу фотолизирующей вспышки в ~ 2 раза ниже, чем в He или Ar, что объясняется быстрой дезактивацией атомов $O(^1D)$ молекулами N_2 . Зависимости Φ от давления в N_2 , Ar и He сходны. Обсуждается возможный механизм цепного разложения O_3 с участием колебательно-возбужденных молекул.

В. Скурат

Khanna V. M., Besenbruch G.,

Margrave J. L.,

Hob.

J. Chem. Phys., 1967, 46, 2310

62.

O_3 (gas)

v. n.

XI-1279

1967

109632n Infrared absorption bands of ozone. David J. McCaa and John H. Shaw (Ohio State Univ. Res. Found., Columbus). ~~U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform.~~, AD 653195. Avail. CFSTI, 105 pp.(1967)(Eng). Fourteen bands of O₃ at 500-3300 cm.⁻¹ were identified and values of the vibrational-anharmonic consts. detd. The integrated band absorptances of many of these bands were measured from spectra of a 32-m. path of O₃-O₂ mixts. contg. up to 30 atm. cm. O₃ near 25°. The dependences of the band absorptances on O₃ concn. and total pressure are described and the strengths of 9 of the bands are given. The statistical band model describes the behavior of the bands reasonably well for the ranges of exptl. variables used. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rep.* 67(15), 13(1967). TCVL

O₃
(Culler)
W.K.

C. A. 1968. 68. 24

XI-1379

1967

03

6 Д121. Геометрия озона и азидиона в основных и некоторых возбужденных состояниях. Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. Geometry of ozone and azide ion in ground and certain excited states. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 6, 1953—1966 (англ.)

Неэмпирич. методом MO с самосогласованием с использованием базисных наборов из фиксированных групп гауссовских ф-ций рассчитаны потенц. кривые основных и некоторых возбужденных состояний с заполненными оболочками озона и азидиона для 8 значений углов O—O—O и 6 значений углов N—N—N в интервале 60°—180°. Для эксперим. значений валентных углов проведе-

09.1968. 68

⊠

ны также расчеты с расширенными базисными наборами. Получены удовлетворительные значения равновесных углов в рассматриваемых системах. Результаты интерпретированы с помощью схем Малликена и Уолша, рассматривающих связь изменений орбитальных энергий с геометрией молекул. Используемая процедура позволяет детально исследовать потенц. кривые вблизи равновесия.

В. Л. Лебедев

O₃

XI - 1379

1967

copy

103021v Geometry of ozone and azide ion in ground and certain excited states. Sigrid D. Peyerimhoff and Robert J. Buenker (Justus Liebig-Univ., Giessen/Lahn, Ger.). *J. Chem. Phys.* 47(6), 1953-66(1967)(Eng). A series of ab initio S.C.F. M.O. calcs. for ground and various closed-shell excited states of O₃ and N₃⁻ have been carried out with a view toward investigating relationships between the geometries of these states. The calcs. give quant. verification to many of the assumptions made in previous empirical theories dealing with this subject and enlarge the scope of former quant. schemes to include more quant. predictions relative to steepness of potential surfaces of mol. states. Thus, it is shown that the calcd. S.C.F. total energy surfaces of both O₃ and N₃⁻ can be compared quite concisely in terms of a small no. of differentiating orbital-energy curves.

RCJQ

+1

C.A. 1967. 07.22



O₃ (vi, сиреневая)

1967

XI 1447

O₄, (vi)

Гроздовская Т. В., Некрасов И. И.,

Колышуккина И. П.

Исслед. химии, 1964, 41, в. 4, 302-304

Работа о свойствах нормальных красителей
состава и его интрамолекулярной связи
и т. д.



6 10

Рис. Хим., 1967, 135-155

1968

XI 23O₃

111583m Calculated fundamental vibrational frequencies of isotopically substituted ozone. Bain, Ralph L. (Southern Illinois Univ., Edwardsville, Ill.). *Trans. Ill. State Acad. Sci.* 1968, 61(2), 215-16 (Eng). Since O consists of 3 stable isotopes, ¹⁶O, ¹⁷O, and ¹⁸O, 18 different species of O₂ may be formed. By using structural parameters and potential consts. of O₃, the fundamental vibrational frequencies of these 18 species were calcd. The calcd. frequencies agree well with those reported by Pierce in 1956, while by using the sum rule as a check, agreement is ~0.2%.

V. C. Hughes

V_i w_{1010nd}

C.A. 1968. 69. 26

1968

Davies D. W.

O₃

Chem. Phys. Lett., n2(3),
173.

(7)

Ionization potentials
by the complete neglect
of dif-ferential over-
lap.

III

(Coll. BF₃) III

O₃

5 Д275. Коэффициенты поглощения озона в видимой и УФ-областях спектра. Griggs M. Absorption coefficients of ozone in the ultraviolet and visible regions. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 2, 857—859 (англ.) 1968

В связи с различием литературных данных по значениям коэф. поглощения O₃ в видимой и УФ-областях выполнено исследование спектра поглощения озона в области 2000—9000 Å. Описана методика получения абсолютно чистого (100%) O₃ с помощью электрич. разряда напряжением 12 кв внутри дьюаровского сосуда, помещенного в жидкий азот, через который продувается кислород. Приведены значения коэф. поглощения O₃ при т-ре 30° С для систем полос Хартлея (2000—3000 Å), Хаггинса (3000—3600 Å) и Чеппунса (4500—8500 Å). Показано, что в УФ-области справедливы результаты Инн и Танака (Inn E. C. V., Tanaka Y., «J. Opt. Soc. Am.», 1953, 43, 870), в видимой области наиболее близки к истинным данные Вигру (Vigroux E., «Ann. Phys.», 1953, 8, 709). С. Ф. Б.

коэф.
поглощ.

ф. 1969.

52

O₃

Hayes & F., Pfeiffer ¹⁹⁶⁸
g.v.

J. Amer. Chem. Soc., 90(18),
4773.

Possible existence of
double minima in po-
tential energy surfaces
of AB₂-● type molecules.
(see NO₂⁺) III

1968

XI-325

O₃

ИК-спектр

2 Д384. ИК-спектр озона. McCaa D. J., Shaw J. H. The infrared spectrum of ozone. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 25, № 3, 374—397 (англ.)

Исследованы и идентифицированы 14 полос озона в области 500—3300 см⁻¹ и определены постоянные ангармоничности. Измерены интегр. интенсивности ряда полос в спектре озono-кислородной смеси в слое 32 м с конц-ией озона 30 атм·см при 25° С. Изучены концентрационная зависимость интенсивности и влияние полного давления. Приведены интенсивности девяти полос поглощения. Показано, что статистич. модель достаточно хорошо описывает наблюдаемые явления. Библ. 18.

04. 1969. 2Д

O₃

X1-325

1968

91372r The infrared spectrum of ozone. D. J. McCaa and J. H. Shaw (Ohio State Univ., Columbus). J. Mol. Spectrosc. 25(3), 374-97(1968)(Eng). Fourteen bands of O₃ between 500 and 3300 cm.⁻¹ were identified and values of the vibrational anharmonic consts. detd. The integrated band absorptances of many of these bands were measured from spectra of a 32-m. path of O₃-O₂ mixts. contg. up to 30 atm. cm. O₃ near 25°. The dependences of the band absorptances on O₃ concn. and total pressure are described and the strengths of 9 of the bands are given. The statistical band model describes the behavior of the bands reasonably well for the ranges of exptl. variables used. 18 references.

RCKP

C.A. 1968. 68. 20

O₃

XI-325

1968

И.К. Селев

22 Б273. Инфракрасный спектр озона. McSaa D. J., Shaw J. H. The infrared spectrum of ozone. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 25, № 3, 374—397. (англ.)

Измерен и отнесен ИК-спектр озона в области 500—3300 см⁻¹. Определены константы ангармоничности колебаний. Вычислены интегральные интенсивности для большинства полос (длина оптич. пути 32 м, т-ра 25°, 30 атм). Получены зависимости поглощения для ряда полос от концентрации и давления O₃. Показано, что статистич. модель полосы поглощения удовлетворительно описывает наблюдаемые эффекты.

Резюме

X. 1968. 22

O₃

X1-3028

1968

17 B50. Расчеты основных состояний молекул O₃, NO₂⁻, NOF и OF₂ методом Mo ЛКАО с самосоглашением с минимальным базисным набором. Petrongolo Carlo, Scrocco Eolo, Tomasi Jacopo. Minimal-basis-set LCAO-SCF-MO calculations for the ground state of O₃, NO₂⁻, NOF, and OF₂ molecules. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 1, 407-411 (англ.)

Методом Рутана с минимальным базисом из АО слейтеровского типа с использованием слейтеровских и оптимизированных по энергиям изолированных атомов (метод 1) величин орбитальных экспонент рассчитаны волновые функции основных состояний, полные, кинетич. и орбитальные энергии, дипольные моменты; приведены карты полных π-электронных плотностей (метод 1) и проведен анализ заселенностей по Малликену для нелинейных трехатомных молекул O₃, NO₂⁻, NOF и OF₂. В. Л. Лебедев

X. 1968. 17



O₃

XI-471

1968

5777c Raman spectrum of ozone. Selig, H.; Claassen, H. H. (Hebrew Univ., Jerusalem, Israel). *Israel J. Chem.* 1968, 6(4), 499-500 (Eng). The laser excited Raman spectra measured on O₃ (gas phase, 2 and 4 atm.), exhibited 2 highly polarized intense and sharp bands ν_1 and ν_2 at 1103.3 and 702.1 cm.⁻¹ The 3rd fundamental at 1042 cm.⁻¹ (known from the intense ir band) is barely detectable in background noise. The stretching vibrations of O₃ very nearly obey the selection rule for a linear mol.

FBJN

ν_1

C. A. 1969. 70.4

X1-513

1968

O₃

10 Б267. Переходы между колебательными состояниями в микроволновом спектре озона. Такака Такехико, Морино Юнезо. Intervibrational-state transitions in the microwave spectrum of ozone. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 6, 2877—2878 (англ.)

v_i

При исследовании вращательного спектра молекулы озона в области, близко расположенной к возбужденным колебательным состояниям $\nu_1=1$ и $\nu_3=1$, обнаружены 2 слабые линии при $\nu_1=31464,16$ и $\nu_2=11990,37$ Мгц. Разность частот этих линий равна разности частот переходов $18_{2,16} \leftarrow 17_{3,15} \leftarrow (\nu_3=29143,30$ Мгц) и $18_{2,16} \leftarrow 19_{1,15}$ ($\nu_4=9669,57$ Мгц) в состоянии $\nu_1=1$. Отнесение вновь найденных линий выполнено методом двойного резонанса с непрерывной накачкой мощным клистроном на частотах ν_1 , ν_2 и ν_4 .

М. Р. Алиев

X. 1969. 10

1968

X1-513

O₃

5757w Intervibrational-state transitions in the microwave spectrum of ozone. Tanaka, Takehiko; Morino, Yonezo (Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Chem. Phys.* 1968, 49 (6), 2877-8 (Eng). In the course of a recent study on the rotational spectra of ozone in the Coriolis perturbed vibrational states, the $v_1 = 1$ and $v_3 = 1$ states, 2 intervibrational-state transitions at 31,464.16 and 11,990.37 MHz. were found. The frequency difference between these lines is exactly equal to that between the $18_{2,18} \leftarrow 17_{3,15}$ (29,143.30 MHz.) and $18_{2,18} \leftarrow 19_{1,19}$ (9669.57 MHz.) transitions in the $v_1 = 1$ state. Their

(чекер)

C.A. 1969. 70.4

intensities were 10-20% of those of the $18_{2,18} \leftarrow 17_{3,15}$ and $18_{2,18} \leftarrow 19_{1,19}$ transitions, resp. Double resonance expts. were used to exam. their assignment. While the frequency of the pumping radiation was fixed at various values near the resonance frequency of the pumping line ν_p , the signal was recorded by using a conventional Stark modulation technique. When the pumping frequency was tuned exactly to ν_p , the signal decreased in intensity and recovered to full intensity by detuning only 2 MHz. This confirmed the assignment of the 2 transitions $18_{2,18} \leftarrow 17_{3,15}$ and $18_{2,18} \leftarrow 19_{1,19}$ with a common level. Intensity decreases in other cases were observed; the 31,464.16 MHz. transition has a common level with $18_{2,18} \leftarrow 17_{3,15}$ transition, and the 11,990.37 MHz., with $18_{2,18} \leftarrow 19_{1,19}$. The simplest scheme of energy levels consistent with the observed results is one in which a fourth level with $J = 18$ exists 2321 MHz. above the $18_{2,18}$ level. The 2 lines observed are explained as being transitions to this level from the $17_{3,15}$ and $19_{1,19}$ levels in the $v_1 = 1$ state. Detailed calcs. were made by using the rotational consts., Coriolis coupling const., etc.

Raylene Adams Coad

O₃

XI-513

1988

и.в. спектр

5 Д396. Переходы между колебательными уровнями в микроволновом спектре озона. Такака Такехико, Морино Юнезо, Intervibrational-state transitions in the microwave spectrum of ozone. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 6, 2877-2878 (англ.)

Исследованы вращательные спектры озона в колебательных состояниях $\nu_1=1$ и $\nu_3=1$. Обнаруженные переходы при 31464,16 и 11990,37 МГц отождествлены и уточнены с помощью техники метода двойного резонанса.

9. 1969. 59

XI-26

1969

O₃ (мс)
(2)

12 Д322. ИК-спектр поглощения жидкого озона. Barbe Alain, Jouve Pierre. Spectre d'absorption infrarouge de l'ozone liquide. «C. r. Acad. sci.», 1969, 268, № 26, В1723—В1726 (франц.)

Исследован спектр озона, растворенного в жидком аргоне, в области $400-4700 \text{ см}^{-1}$ при $t\text{-ре } 98^\circ \text{ К}$. Озон получен в тлеющем разряде кислорода. Толщина слоя составляла 4 см , толщина варьировалась в зависимости от интенсивности полос. Наблюдены и интерпретированы 21 полоса. Основные частоты расположены при $702,5$, 1033 и $1105,5 \text{ см}^{-1}$. Получены также спектры газообразного озона в слоях от 10 см до 25 м . Вычислены колебательные постоянные молекулы O₃. М. В. Тонков

М. В.

ср. 1969. 122



1969

O₃ (liq.)

X1-26

(75763a) Infrared absorption spectrum of liquid ozone. Barbe, Alain; Jouve, Pierre (Lab. Phys. Mol., Fac. Sci., Reims, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1969, 268(26), 1723-6 (Fr). The ir spectrum of liq. O₃ in liq. Ar at 98°K. has been detd. Bands (21) in the range 400-4700 cm.⁻¹ have been observed and identified. The anharmonicity coeffs. have been detd. with the normal frequencies, allowing recalcn. of all the observed bands. The exptl. and calcd. values are in excellent agreement. DWJF

W =

measured

C.A. 1969. 71. 16

1969

X1-26

O₃

23 Б258. Инфракрасный спектр поглощения жидкого озона. Barbe Alain, Jouve Pierre. Spectre d'absorption infrarouge de l'ozone liquide. «С. г. Acad. sci.», 1969, 268, № 26, В1723—В1726 (франц.)

Исследован ИК-спектр поглощения жидк. озона (I) в жидк. аргоне при 98° в области 400—4700 см⁻¹. В этой же области частот исследован ИК-спектр поглощения газ. I. Рассмотрено отнесение кол. частот I. Определены значения гармонич. частот кол. $\omega_1=1135$, $\omega_2=721,5$ и $\omega_3=1078,5$ см⁻¹ и констант ангармоничности $x_{11}=-4$, $x_2=-1,75$, $x_{33}=-10,80$, $x_{12}=-13$, $x_{13}=-30$, $x_{23}=-18$, хорошо воспроизводящие эксперим. частоты I.

А. Александров

ν_i ;
м.н.;

X. 1969. 23

Dubois I.,

Hib.

J. Molecul. Struct., 1969,
3, 269

63

O₃(205)

M.W.

1969

XI-301

O₃ (T.B.)

01935t Infrared absorption spectrum of solid ozone at 10°K.
 Le Brumant, Jacques; Barbe, Alain; Jouve, Pierre (Lab. Phys.
 Exp. Mol., Fac. Sci., Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris,*
Ser. A, B 1969, 268B(7), 549-51 (Fr). The ir absorption spec-
 trum of O₃ at 10°K. has been redetd. and band positions given
 to ± 0.5 cm.⁻¹ O₃ was obtained by elec. discharge through
 99.999% pure O, and the mixt. was condensed on KBr or AgCl
 at 10°K. Bands at 1023 and 1003 cm.⁻¹ have been attributed
 to mols. contg. 1 atom of ¹⁸O. K. Barnes

UK-
chemis/p

C.A. 1969. 70. 20

O₃ (тв.)

XI-301

1969

8 Д437. ИК-спектр поглощения твердого озона при 10 К. Le Grumant Jacques, Barbe Alain, Jouve Pierre. Spectre d'absorption infrarouge de l'ozone solide à 10° K. «С. г. Acad. sci.», 1969, 268, № 7, В549—В551 (франц.)

Получен ИК-спектр поглощения (3100—600 см⁻¹) твердого озона в кислородной матрице при 10° К. В качестве подложки использовались пластины из КВг или AgCl.

Изучены движение молекул озона в матрице и собствен. спектр поглощения изотопных молекул, содержащих изотоп O¹⁸. Приведены частоты полос и дано их отношение. Частоты определены с точностью ±0,5 см⁻¹.

Е. Рыльцев.

ф. 1969 82

03

XI-364

1969

3 Б163. Определение внутримолекулярной потенциальной функции многоатомных молекул из постоянных колебательно-вращательного взаимодействия. Morigo Yonezo. Intramolecular potential function of polyatomic molecules by vibration-rotation interactions. «Pure and Appl. Chem.», 1969, 18, № 3, 323—338 (англ.)

Рассмотрен метод определения потенциальной функции простых многоатомных молекул в кватертичном приближении из эксперим. данных по частотам колебаний ω_i , постоянным ангармоничности X_{ij} , постоянным $\alpha_i^{A,B,C}$, характеризующим зависимость вращательных постоянных от колебательного состояния, постоянным l -удвоения q_i и дефекту инерции Δ . Приведены ф-лы, выражающие α - и X -постоянные нелинейной молекулы

см. н.

л. н.

X-1970.3

+6



XU₂ через коэф. ангармоничности в норм. координатах K_{ijk} и K_{ijkl} и численные значения коэф. K_{ijk} и K_{ijkl} для молекул O₃, OF₂, SO₂ и SeO₂, полученные из α - и X-постоянных. Приведены также численные значения коэф. ангармоничности f_{ijk} и f_{ijkl} молекул O₃, OF₂, SO₂, SeO₂, OCS и NH₃ во внутренних колебательных координатах и отмечено, что потенциальная функция рассматриваемых молекул лучше всего сходится в этих координатах, а гл. вклад в потенциал дают члены с f_{iii} и f_{iiii} , соотв-щие растяжению валентных связей.

М. Р. Алиев

1969

O₃

XI-364

136595s Intramolecular potential function of polyatomic molecules by vibration-rotation interactions. Morino, Yonezo (Dep. Chem., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *Pure Appl. Chem.* 1969, 18(3), 323-38 (Eng). Doubling consts. of the *l* type in various higher excited states of the triat. mols. O₃, OF₂, SO₂, and SeO₂ were measured. For comparison, the vibrational changes were calcd. by using the potential function based on the valence force model and detd. by using least squares calcns. The values cor. for the 4th order perturbation agree with expt. BVJN

bygone

C.A. 1970. 72. 26

XI - 1525

1969

O₃ (cont. noes.)
Pillai M.G.K., Pillai P.P.,
J. Shivaji Univ., 1969-1970,
(Pub. 1970), 2-3, N4, 6, 41-5



NO.

40423d) Ozone ultraviolet photolysis. I. Effect of molecular oxygen. Biedenkapp, Dieter; Bair, Edward J. (Chem. Dep., Indiana Univ., Bloomington, Indiana). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(12), 6119-25 (Eng). To clarify the role of mol. O in the photolytic decompn. of ozone, measurements of mixts. of ozone with He, N, or O were analyzed by the intermediate quantum yield method which seps. effects due to fast and slow reactions by measuring the fast components shortly after flash photolysis. Anal. of the results gives the following rate consts. (in l./mole-sec): $O_2 + O(^1D) \rightarrow O_2(^1\Sigma_g^+) + O(^3P)$, $k_{4b} = 1.5 \pm 0.8 \times 10^{11}$; $O_2(^1\Sigma_g^+) + O_3 \rightarrow 2O_2 + O(^3P)$, $k_{3b} = 4.0 \pm 0.5 \times 10^9$. The efficiency of the reaction for forming $O_2(^1\Sigma_g^+)$ lies in the range $1.0 \geq \alpha > 0.6$. As a consequence of the high value of (k_{4b}), which was previously neglected, rate consts. reported previously should be revised as follows: $O(^1D) + O_3 \rightarrow 2O_2$, $k_{2a} = 4 \pm 2 \times 10^{10}$; $O(^1D) + N_2 \rightarrow O(^3P) + N_2$, $k_{4a} = 2 \pm 1 \times 10^{10}$; $O(^1D) + Xe \rightarrow O(^3P) + Xe$, $k_{4c} = 5 \pm 2 \times 10^{10}$. The quoted error limits are those which represent the fit of the data to the assumed mechanism with appropriate allowances for uncertainties due to minority processes. RCJQ

O₃

006140113

C.D. 1970. 75.8

1970

O₃

фотолиз

24 Б1091. Фотолиз озона ультрафиолетовым светом.
 I. Влияние молекулярного кислорода. B i e d e n k a r r D.,
 B a i r E d w a r d J. Ozone ultraviolet photolysis. I. The
 effect of molecular oxygen. «J. Chem. Phys.», 1970, 52,
 № 12, 6119—6125 (англ.)

Спектрофотометрическим методом измерена степень
 разложения O₃ в различные моменты времени (3—
 600 мсек) после фотолиза смесей 0,02 мм O₃ с 20 мм N₂,
 O₂ или He импульсом УФ-света длительностью ~ 10 мсек.
 В смесях с N₂ разложение O₃ происходит только во вре-
 мя импульса, тогда как в смесях с O₂ и He оно продол-
 жается и после прекращения облучения. Различие объ-
 яняется тем, что после перв. фотолиза O₃ + hν → O(¹D) +
 + O₂(¹Δ) происходят различные быстрые втор. процессы,



X. 1970.

24

имеющие разную эффективность: например, в присутствии N_2 осуществляется дезактивация: $O(^1D) + N_2 \rightarrow O(^3P) + N_2$. Получены след. значения констант скоростей р-ций (л/моль·сек): $O_2 + O(^1D) \rightarrow O_2(^1\Sigma_g^+) + O(^3P)$ $1,5 + 0,8 \cdot 10^{11}$; $O_2(^1\Sigma_g^+) + O_3 \rightarrow 2O_2 + O(^3P)$ $4,0 \pm 0,5 \cdot 10^9$. Эффективность образования $O_2(^1\Sigma_g^+)$ при взаимодействии $O(^1D)$ с O_2 лежит в интервале $\alpha = 0,6 - 1,0$. Приведены новые оценки констант скоростей по лит. данным (л/моль·сек): $O(^1D) + O_3 \rightarrow 2O_2$ $4 \pm 2 \cdot 10^{10}$; $O(^1D) + N_2 \rightarrow O(^3P) + N_2$ $2 \pm 1 \cdot 10^{10}$; $O(^1D) + Xe \rightarrow O(^3P) + Xe$ $5 \pm 2 \cdot 10^{10}$.

Из резюме

O₃

Brown R. D. ugp. 1970

Ther. chim. acta,
18 (2), 98.

изменчив.
расчет

(см. CO) III

XI - 4258

1970

O₃

6 Б136. Фотоионизация и анализ масс озона. Со-
ok G. R. Photoionization of ozone with mass analysis.
«Recent Develop. Mass Spectroscopy. Proc. Int. Conf.
Mass Spectroscopy, Kyoto, 1969». Tokyo, 1970, 761—763.
Discuss., 763—764 (англ.)

Вакуумный УФ-монокроматор с нормальным паде-
нием луча в сочетании с квадрупольным масс-спектро-
метром использован для исследования абсорбции и
фотоионизации озона. Энергия фотонов (E) изменялась
непрерывно от 12,4 до 20,7 эв с разрешением ~ 2 мв.
При фиксированном значении $E=17,00$ эв, интенсив-
ность основных пиков спектра O_2^+ и O_5^+ возрастала
пропорционально квадрату увеличения давления O_3 .
Возможные механизмы образования этих ионов: 1)
 $O_3 + O_3^+ \rightarrow O_2^+ + 2O_2$ и 2) $O_3 + O_3^+ \rightarrow O_5^+ + O$; константы
скорости р-ций — $1,2 \cdot 10^{-11}$ и $0,1 \cdot 10^{-10}$ см³/сек, соотв.
Из зависимости интенсивности ионов O_2^+ и O_5^+ от
длины волны, при постоянном давлении O_3 , найдено,
что их потенциалы появления совпадают с потенциа-
лом ионизации O_3 (12,67 эв).

М. Туркина

фотоионизация

х. 1975. №6

O₃

XI-4258

1970

3 Д287. Масс-анализ продуктов фотоионизации озона. Cook G. R. Photoionization of ozone with mass analysis. «Recent Develop. Mass Spectroscopy. Proc. Int. Conf. Mass Spectroscopy, Kyoto, 1969». Tokyo, 1970, 761—763. Discuss., 763—764 (англ.)

С помощью квадрупольного масс-спектрометра изучены продукты фотоионизации озона в интервале энергий ионизирующего излучения 12,4—20,7 эв с разрешением около 2 мв. Получены зависимости наиболее интенсивных линий (O₃⁺, O₃H₂⁺, O₅⁺ и O₂⁺) от величины давления озона (5—1000 в ед. 10⁻³ мм рт. ст.) в области ионизации. Помимо O₃⁺, появление остальных ионов связывается с протеканием ионно-молекулярных реакций O₃⁺+O₃→O₂⁺+2O₂⁺ или O₅⁺+O₃, а также возможными процессами перезарядки O₅⁺ на O₃ или колебательно-возбужденных ионов O₂⁺ на O₃. Оцениваются константы скорости некоторых из этих процессов.

Г. А. Вомпе

фотоиониз.
продукты
фотоиониз.

Ф. 1975
N 3

⊗ (+D) и.с + O₃⁺, O₅⁺, O₂⁺

1970

O₃

(48006m) O₂(a¹Δ_g) in the photolysis of ozone, monitored by kinetic absorption spectroscopy in the vacuum ultraviolet. Donovan, Robert J.; Kirsch, L. J.; Husain, David (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1970, 7(4), 453-4 (Eng). The optically metastable singlet state of O₂, O₂(a¹Δ_g), was obsd. and monitored by kinetic absorption spectroscopy in the vacuum uv following flash photolysis of O₃ [p(O₃) = 9.1 N/m²] at room temp. in the presence of He [p(He) = 6.65 kN/m²]. The kinetics show that 7 diffuse bands, with bandheads at 122.90-148.65 nm, can be assigned to absorption in this excited singlet state. The rate const. for the reaction O₂(a¹Δ_g) + O₃ → 2O₂ + O is ≈ 5 × 10⁻¹⁴ cm³/mol.-sec at 300°K. This system can be used for detailed kinetic studies of O₂(a¹Δ_g).

DWJN

Uelvin.

Q. 2. 7. m.

C. A. 1971. 74. 10.

O₃

ВР-Х1-1828а

1970

Di

9 Д338. Исследование поглощения атмосферного озона в области 9—10 мк с помощью спектрометра, установленного на воздушном шаре-зонде. Goldman A., Kyle T. G., Murgray D. G., Murgray F. H., Williams W. J. Long path atmospheric ozone absorption in the 9—10-μ region observed from a balloon-borne spectrometer. «Appl. Opt.», 1970, 9, № 3, 565—580 (англ.)
С помощью спектрометра, установленного на воздушном шаре-зонде измерено поглощение атмосферой сол-

Б. 1970-92

нечного излучения в области 9—10 мк в зависимости от высоты. Полученные данные сравнены с теоретически рассчитанными для основных частот ν_3 и ν_1 колебания озона $^{16}\text{O}_3$. Показано, что «горячие» полосы $\nu_3 + \nu_2 - \nu_2$ и $\nu_3 + \nu_3 - \nu_3$ озона и основная частота ν_3 изотопич. образцов $\text{O}^{16}\text{O}^{18}\text{O}^{16}$ и $\text{O}^{16}\text{O}^{16}\text{O}^{18}$ приписаны основному поглощению для длинных оптич. путей в данном эксперименте (как и $\nu_3 - \nu_1$ и $\nu_3 - 2\nu_2^0$ полос CO_2). Включение этих слабых полос в рассчитанные спектры приводит к хорошему согласию с экспериментом. Библ. 18.

O₃

1970

(53177t) Molecular force field for ozone. Pillai, M. G. Krishna; Pillai, Parameswaran P. (Dep. Phys., Shivaji Univ., Kolhapur, India). *J. Shivaji Univ.* 1969-1970 (Pub. 1970), 2-3(4, 6), 41-5 (Eng). The evaluation of the force consts. for the ozone mol. is made using a modification of the Urey Bradley force field method which takes into account the unpaired electrons. The magnitude of the lone pair-bond pair interaction is greater than that of the bond pair-bond pair interaction. This result is in agreement with the fundamental assumptions made to explain the shapes of inorg. mols.
P. K. Hatton

Chem. NOCI

C. A. 1971. 45. 8

O₃

(XI-446)

1970

46395y Absorption spectrum of the ozone precursor. Riley,
John F.; Cahill, R. W. (Lockhead Palo Alto Res. Lab., Palo
Alto, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(6), 3297-8 (Eng).
The absorption spectrum of O₃ and its precursor were measured
as a function of wavelengths at various times. These spectra
are distinct one from the other; that of the O₃ precursor has
a max. at 310-20 m μ . The half-life for the disappearance of
the precursor at 334, 365, and 405 m μ is 5 μ sec. The precursor
is likely a single species rather than O₃ mols. in vibrationally
excited states.

BGJN

Chlorine
hydrogen

C.A. 1970. 72.22

X1-753

1940

O₃

21 Б235. Начало основной полосы ν_2 озона. Така-
ха Takehiko, Morino Yonezo. Band origin of the
 ν_2 fundamental of ozone. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 33,
№ 3, 552—553 (англ.)

Вычислен контур полосы ν_2 молекулы O₃ с использова-
нием вращательных постоянных, определенных методом
МВ-спектроскопии для основного и возбужденного $\nu_2=1$
колебательных состояний. Учитывались все вращатель-
ные переходы с $J \leq 40$, при этом для учета вклада цент-
робежного растяжения использовались постоянные цент-
робежного растяжения O₃, определенные Пирсом
(РЖХим, 1956, 60784). Вычисленный контур полосы ν_2
для O₃ удовлетворительно согласуется с эксперим. конту-
ром. Из 9 неперекрывающихся между собой линий вра-
щательных переходов, принадлежащих к ветвям RQ_0 и
 PQ_1 полосы ν_2 , найдено начало полосы $\nu_2(\text{средн.}) =$
 $= 700,93 \text{ см}^{-1}$.

А. Александров

М.И.

X. 1940. 21

O₃

XI-753

1970

105429m Band origin of the ν_2 fundamental of ozone. Tanaka, Takehiko; Morino, Yonezo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 33(3), 552-3 (Eng). The rotational structure assignment in the ir spectrum of ozone was reexamd. in order to det. the band origin of the ν_2 fundamental. The band envelope was computed with the rotational consts. detd. by microwave spectroscopy. The computed spectrum is compared with the obsd. spectrum and the ν_2 band origin is detd. as 700.93 cm^{-1} . DYJN

MF-abstract

C.A.

1970.72.20

O₃

М.И.

Сек. И.

ком. с. р. р.

X. 1970.

21

21 Б242. Кориолисово взаимодействие и ангармоническая потенциальная функция озона из микроволновых спектров в возбужденных колебательных состояниях. Такака Takehiko, Morino Yonezo. Coriolis interaction and anharmonic potential function of ozone from the microwave spectra in the excited vibration states. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 33, № 3, 538—551 (англ.)

Исследованы МВ-вращательные спектры O₃¹⁶ в возбужденных колебательных состояниях V₂=1 (1 ≤ J ≤ 26), V₂=2 (0 ≤ J ≤ 19), V₁=1 (0 ≤ J ≤ 19) и V₃=1 (2 ≤ J ≤ 20) в области 8000—70 000 Мгц. Уровни V₁=1 и V₃=1 связаны между собой сильным кориолисовым взаимодействием. Определены вращательные постоянные O₃¹⁶ в возбужденных колебательных состояниях (для учета центробежного растяжения при этом использовались τ-постоянные основного колебательного состояния O₃¹⁶, определенные Пирсом (L. Pierce, «J. Chem. Phys. 1956, 24, 139), варьировалась только по-

глас
← 0
= 781⁶

1970

515

XI

стоянная τ_{aaaa} ($V_1=1$) $A=106625,59$, $B=13272,68$,
 $C=11764,82$, ($V_2=1$) $A=108137,57$, $B=13311,20$, $C=$
 $=11765,17$, ($V_3=1$); $A=104943,79$, $B=13229,59$, $C=$
 $=11726,05$, ($V_2=2$); $A=109795,91$, $B=13272,88$; $C=$
 $11694,26$ Мгц. На основе определенной постоянной ко-
 рриолисова взаимодействия $\varphi_{13}^c=0,60\pm 0,01$ и частот нор-
 мальных колебаний определены силовые коэф. общего
 валентного силового поля O_3 : $F_{11}=7,66\pm 0,14$, $F_{12}=0,59\pm$
 $\pm 0,04$, $F_{22}=1,31\pm 0,04$, $F_{33}=4,67\pm 0,08$ (все в мдин/А). Из
 постоянных колебательно-вращательного взаимодействия
 α_i^A , α_i^B , α_i^C ($i=1, 2, 3$) определены кубич. коэф. в
 разложении потенциальной функции по нормальным ко-
 ординатам. Квартичные коэф. в разложении потенциа-
 льной функции O_3 найдены из колебательных ангармо-
 нич. постоянных O_3 , приведенных в литературе. Приве-
 дены следующие величины кубич. и квартич. коэф. O_3
 (см⁻¹): $k_{111}=-47,6\pm 0,7$, $k_{122}=-24,3\pm 3,6$, $k_{133}=-221,8\pm$
 $\pm 3,7$, $k_{112}=-29,5\pm 1,0$, $k_{222}=-19,2\pm 0,6$, $k_{233}=-59,3\pm 1,7$,
 $k_{1111}=7$, $k_{1122}=-4$, $k_{1133}=22$, $k_{2222}=1$, $k_{2233}=-9$, $k_{3333}=4$.
 Значения кубич. коэф. O_3 даны также во внутренней си-
 стеме координат. Отмечена близость ряда соответствую-
 щих кубич. и квартичные коэф. O_3^{16} , F_2O и SO_2 . Опреде-
 лена равновесная структура O_3 $r_e(0-0)=1,2717\pm$
 $\pm 0,0002$ А, $\theta_e(0-0-0)=116^\circ 47' \pm 2'$. Приведены парамет-
 ры средней структуры O_3 в основном и возбужденных
 колебательных состояниях.

А. Александров

1970

O₃

72936u Coriolis interaction and anharmonic potential function of ozone from the microwave spectra in the excited vibrational states. Tanaka, Takehiko; Morino, Yonezo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 33(3), 538-51 (Eng). Microwave absorption spectra of O₃ were identified in the excited vibrational states with $v_1 = 1$, $v_2 = 1$ and 2, and $v_3 = 1$. In the $v_1 = 1$ and $v_2 = 1$ states, an anomaly owing to a strong Coriolis interaction was obsd. The inertia defect in the Coriolis perturbed states was defined and successfully applied to the anal. The Coriolis coupling const. ζ_{13}^c was detd. to be 0.60, from which the quadratic force consts. were derived. The cubic potential consts. (and 3rd-order force consts.) were detd. from the vibration-rotation interaction consts. obtained. The quartic potential consts. were derived from the vibrational anharmonic consts. by McCaa and Shaw. Close similarities were obsd. among the anharmonic potential consts. of O₃, SO₂, and OF₂. The equil. structure and av. structures in the ground and excited vibrational states were obtained.

575
X17

RCKP

M. N.

C. A. 1970. 72. 14

O₃

1970

11 Д605. Кориолисово взаимодействие и ангармоническая потенциальная функция озона, определенные из микроволновых спектров молекулы в возбужденных колебательных состояниях. Такака Takehiko, Морино Yonezo. Coriolis interaction and anharmonic potential function of ozone from the microwave spectra in the excited vibration states. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 33, № 3, 538—551 (англ.)

Для определения молекулярной структуры равновесного состояния и гармонических и ангармонических силовых постоянных озона измерены и идентифицированы микроволн. спектры поглощения (8—70 кМгц) молекулы в возбужденных колебательных состояниях ($\nu_1=1$; $\nu_2=1$ и 2 , $\nu_3=1$). Для $\nu_1=1$ и $\nu_3=1$ наблюдаются аномалии, связанные с кориолисовым взаимодействием (КВ). Оп-

М. П.
Иссл. Спектр.

Ф. 1970.

119

15751-15751

ределена постоянная КВ, равная 0,60. Из ее значения найдены силовые постоянные 2-го порядка. Из измерения постоянных колебательно-вращательного взаимодействия определены силовые постоянные 3-го порядка. Приведена сравнительная таблица силовых постоянных для молекул O_3 , OF_2 и SO_2 . Определены параметры молекулярной структуры: $r_e(0-0) = 1,2717 \pm 0,0002 \text{ \AA}$, $\theta_e(0-0-0) = 116^\circ 47' \pm 2'$.

Г. П.

X1-518

1970

O₃

18 Б71. Силовые коэффициенты молекул с сильно взаимодействующими колебаниями. Thakur S. N., Rai S. N. Force constants of molecules with strongly coupled vibrations. «J. Mol. Struct.», 1970, 5, № 4, 320—322 (англ.)

Рассмотрено определение силовых коэф. F_{11} , F_{22} , F_{12} общего валентного силового поля для молекул ZX_n в случае сильного кинематич. взаимодействия ($m_z < m_x$) из двух эксперим. частот кол. ν_1 и ν_2 (двумерная задача) при условии наложения дополнительного ограничения, связанного с экстремальными св-вами силовых коэф. (РЖХим, 1970, 3Б56). В кач-ве примера рассмотрены молекулы O_3 , F_2O , Cl_2O , $B^{10}F_3$, $B^{11}F_3$, NF_3 , PCl_3 , $C^{12}F_4$, $C^{13}F_4$. Для получения удовлетворительных значений силового коэф. F_{12}^c экстремальное значение F_{12} , соотв-щее $F_{22} \min$.

Сил. и.

+6

X. 1970. 18



умножалось на множитель $|G_{12}/(G_{11}G_{22}+G_{12}^2)^{1/2}|$. Затем находили «уточненные» значения силовых коэф. F_{11} и F_{22} при использовании равенства $F_{12}=F_{12}^c$. Отмечено удовлетворительное согласие для рассмотренных молекул найденных таким методом коэф. с силовыми коэф. валентного силового поля.

А. Александров

O₃

XI-518

1970

(8864n) Force constants of molecules with strongly coupled vibrations. Thakur, S. N.; Rai, S. N. (Fac. Sci., Banaras Hindu Univ., Varanasi, India). *J. Mol. Struct.* 1970, 5(4), 320-2 (Eng). The force consts. of O₃, F₂O, Cl₂O, ¹⁰BF₃, ¹¹BF₃, NF₃, PCl₃, ¹²CF₄, and ¹³CF₄, were calcd. and compared to the respective generalized valence force field values. In agreement with W. Sawodny (1969), in every case the force consts. F_{11} and F_{12} are very large. The values of F_{12} and F_{22} in the A_1 -species of NF₃ corresponding to $F_{22} = \text{min.}$ are incorrectly given by S.

DWIN

chem.Abst.

C.A. 1970. 73.2



$O_2, O_3, NO, NO_2, NO_3 (Ae^-)$ 11 13 1971 (1971)

Berkowitz J., Chupka W.A., Gutman D.,
J. Chem. Phys., 1971, 55, N6, 2733-
- 2745 (ann.)

Electron affinities of $O_2, O_3, NO,$
 NO_2, NO_3 by endothermic charge
transfer.

Sol. Pers., 1972, 29343 10 6 of 1176
(7)

Brand Y. C. et al.,

Hob.

J. Molecul. Spectrosc., 1971,
40, 616

64

O₃ (703)

u.v.

1941

$$\frac{O_3}{N_2O}$$

матрица

92730 Polyatomic vibrational intensity calculations. Breene, Robert G., Jr. (Phys. Stud. Inc., Morgantown, W. Va.). U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform., AD 1971, No. 722466, 58 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Govt. Rep. Announce. (U.S.) 1971, 71(12), 82. Methods of intensity estn. are developed whereby most of the polyat. mols. of interest to certain aspects of atm. research may be treated. The O_3 mol. is treated, a method for calcg. the matrix element ratios between the first overtone and the fundamental and between the second overtone and the fundamental being developed for nondegenerate vibrations in the course thereof. The N_2O mol. is also treated, a method for analogous matrix element ratios for 2-fold degenerate vibrations being developed in the course of this treatment. HNO_3 and CH_4 intensities are also considered, the matrix element ratios being developed for the 3-fold degenerate case in connection with the latter.

C.A. 1941. IS. 14

1971

O₂
cu sea ob.

Boyd R. J.
Whitehead M.A.

J. Chem. Soc.,

1971, A, 22, 3549.

(Cei. BH) III

Сравнение орбит. период и величин
 поперечных моментов (ЭV).

Система параметров.

М-ля	Орбит.	I	II	III	IV	Желер.
03	a_2	13.45	11.39	13.59	11.51	12, 3
	a_1	14.19	12.12	14.71	12.67	12.52
	b_2	15.16	13.09	14.76	12.67	13.52
	b_1	19.20	17.19	18.74	16.70	16.4 - 17.4
	b_2	19.20	17.24	19.91	17.99	
	a_1	20.10	18.12	19.89	17.88	19.91
	a_1	26.34	25.31	29.48	28.91	
	b_2	36.55	36.08	34.25	33.68	
	a_1	48.21	48.60	41, 46	41.05	

O₃

Deplise X.
Biquere P. A.

1971

Vi

Can. J. Chem., 1971,
49, 213, 2242.

(Can. H₂O₃) III

1941

O₃

323362 Photodissociation of ozone in the Hartley Band. Reactions of atomic oxygen (¹D) and molecular oxygen (¹Σ_g⁺) with ozone and molecular oxygen. Gilpin, R.; Schiff, H. I.; Welge, K. H. (Cent. Res. Exp. Space Sci., York Univ., Toronto, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(3), 1087-93 (Eng). The uv photolysis of O₃ in the presence and in the absence of O₂ has been investigated in the wavelength region ~2375-2625 Å by using flash photolysis and kinetic emission spectroscopy with a time resolution high enough to allow unambiguous identification of photodissocn. products. The production of O(¹D) was established by observing the forbidden ¹D → ³P emission at 6300 Å. The decay of the emission provided a value of the rate const. for the O(¹D)-O₃ reaction of $(2.5 \pm 1) \times 10^{-10} \text{ cm}^2 \text{ mol.}^{-1} \text{ sec}^{-1}$ at 25°. Anal. of the O(¹D) decay showed that the rate of chain reactions in which O(¹D) could be reproduced must be smaller than the O(¹D)-O₃ quenching rate by more than an order of

ponoogie
coy.

C.A. 1941. 45. 12

magnitude. No emission was obsd. from $O_2(^1\Sigma_g^+)$ when O_3 alone was photolyzed, indicating that the primary yield for $O_2(^1\Sigma_g^+)$ production is smaller than $1/20$ of the $O(^1D)$ production. $O(^1D)$ was very efficiently quenched when N_2 and O_2 were added. $O_2(^1\Sigma_g^+)$ was obsd. by the $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^3\Sigma_g^-$ emission when O_3 - O_2 mixts. were photolyzed. The emission disappeared when N_2 was added. The $O_2(^1\Sigma_g^+)$ production and decay rates were measured at various O_3 and O_2 concns. $O_2(^1\Sigma_g^+)$ was formed by energy transfer from $O(^1D)$ to ground state O_2 . The decay of the $^1\Sigma_g^+$ emission provided a value of the rate const. for the O_2 - $(^1\Sigma_g^+)$ - O_3 quenching of $(2.5 \pm 0.5) \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ mol.}^{-1} \text{ sec}^{-1}$. The relative quenching rate of $O(^1D)$ by O_3 and O_2 was ~ 5 , yielding an $O(^1D)$ - O_2 rate const. of $5 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ mol.}^{-1} \text{ sec}^{-1}$ with an uncertainty of a factor of 2. The dependence of the $^1\Sigma_g^+$ emission on the O_2 pressure showed that the primary quantum yield of $O_2(^1\Sigma_g^+)$ is at least 20 times smaller than that of $O(^1D)$, in agreement with the previous result.

$\text{SO}_2, \text{SO}, \underline{\text{O}_3}, \text{O}_2$ (Ei, u. n., paerem) 1971

Hiller I. H., Saunders V. R. " 12
X 2751

Mol. Phys., 1971, 22, N2, 193-201
(AMU.)

A theoretical interpretation
of the bonding, and the
photoelectron and ultra-
violet spectra of sulphur
dioxide.

Publ. Chem., 1972, 8529

10

5

(9)

1971

O₃

15 Б973. Фотолиз озона при ультрафиолетовом облучении. V. Фотохимическое образование O₂(¹Δ_g). Jones I. T. N., Wayne R. P. The photolysis of ozone by ultraviolet radiation. V. Photochemical formation of O₂(¹Δ_g). «Proc. Roy. Soc. London», 1971, A321, № 1540, 409—424 (англ.)

фотолиз

Изучен фотолиз O₃ при 254 нм в проточной системе с использованием в кач-ве носителей He, Ar и N₂. Изучение системы O₂(¹Δ_g → ³Σ_g⁻) при λ = 1,27 мк было единственным детектируемым оптич. излучением продуктов фотолиза. Кинетич. исследования показали, что O₂(¹Δ_g) является первичным продуктом фотолиза O₃ при 254 нм: O₃ + hν → O₂(¹Δ_g) + O(¹D). Найдено, что квантовый выход, Φ, образования O₂(¹Δ_g) близок к 1. Измерения Φ позволяют рассчитать конц-ию O₂(¹Δ_g) в атмосфере на различных высотах и сравнить полученные данные с данными по исследованию конц-ии с помощью ракет. Ч. III см. РЖХим, 1970, 2Б1245. Резюме

X. 1971. 15

(+1)

☒

XI-2720

1941

O₃

10 B271. Спектр озона в миллиметровой области. Lichtenstein M., Gallagher J. J., Clough S. A. Millimeter wave spectrum of ozone. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 40, № 1, 10—26 (англ.)

На двух микроволновых интерферометрах Фабри-Перо, построенных для области миллиметровых волн, исследован вращательный спектр озона в области частот до 320 ГГц. Идентифицированы линии переходов между вращательными уровнями с $J \leq 60$ и $K_a < 9$ в основном колебательном состоянии. Анализ спектра выполнен с учетом эффектов центробежного искажения вплоть до 4-го порядка. Определены значения вращательных постоянных $A = 106536,2813$, $B = 13349,0465$, $C = 11834,5493$ Мгц и 16 постоянных центробежного искажения 2- и 4-го порядков. По эффекту Штарка для 6 переходов измерен дипольный момент O₃ ($0,5324 \pm \pm 0,0024 D$).
М. Р. Алнев

М. П.

РЖХ, 1972, а 10

XI-2720

1971

O₃

156550p Millimeter wave spectrum of ozone. Lichtenstein, M.; Gallagher, J. J.; Clough, S. A. (Martin Marietta Corp., Orlando, Fla.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 40(1), 10-26 (Eng). The microwave transitions of O₃ were obsd. to the frequency of 320 GHz, and the spectrum recalcd. to obtain new rotational consts. for the mol. The Stark effect has been measured for 6 transitions to yield an root-mean-square value of the dipole moment of 0.5324 ± 0.0024 D. Linewidth measurements on 2 rotational transitions have resulted in a halfwidth at half power of 4.63 ± 0.24 MHz/torr.

M. N.

M. S. Creek

G. A. 1971. 75. 26

O₃

XI-2720

1971

1) 4 Д491. Спектр озона в миллиметровой области.
Lichtenstein M., Gallagher J.J., Clough S.A.
Millimeter wave spectrum of ozone. «J. Mol. Spectrosc.»,
1971, 40, № 1, 10—26 (англ.)

В области 50—316 Гц наблюдается вращательный спектр молекулы O₃. Для увеличения чувствительности системы использован интерферометр. Получено 66 добавочных чисто вращательных переходов в основном колебательном состоянии. На 6 переходах измерен эффект Штарка. Вычислены вращательные постоянные. Найдена величина дипольного момента, равная $0,5324 \pm 0,0024$ ед. Дебая. Для нахождения значения ширины линии $2 \Delta\nu/p$ изучены переходы при 118,3 и 110,8 Гц при низком давлении при t -ре 23°C . Получено $2 \Delta\nu/p = 4,63 \pm \pm 0,24$ МГц мм рт. ст.

Г. П.

(м.п.)

Ф. 1972. 42

O₃

Lichtenstein M., Gallagher J. J. 1971

J. Mol. Spectrosc. 1971, 40, 11, 10-26

Мн спектр озона -

Волна-дл 50-320 Гкз. в в кувинг с

Описан метод измерения газа. $\gamma \leq 60$

Испит. материал вак. смазка. $K_A < 9$.


Узел. Цирк-двзг ● и шайбуринг мител

XI - 2720

Вращ. инвариантность в пространстве

$$\begin{aligned}
 H = & AP_x^2 + BP_y^2 + CP_z^2 + \\
 & + T_1 P_x^4 + T_2 P_y^4 + T_3 P_z^4 + T_4 (P_x^2 P_y^2 + P_y^2 P_x^2) + \\
 & + T_5 (P_x^2 P_z^2 + P_z^2 P_x^2) + T_6 (P_x^2 P_z^2 + P_z^2 P_x^2) \\
 & + \Phi_1 P_x^6 + \Phi_2 P_y^6 + \Phi_3 P_z^6 + \Phi_4 (P_x^2 P_y^4 + P_y^4 P_x^2) + \dots + \Phi_{10} \\
 & (P_x^2 P_y^2 P_z^2 + P_z^2 P_y^2 P_x^2).
 \end{aligned}$$

Введены эквив. вращ. инвар. для осн. ссы. O_3 (MHz)

B	xx	13349,0465	$\pm 0,0034$	
C	yy	11834,5493	$\pm 0,010$	
A	zz	106536,1813	$\pm 0,0072$	
T ₁	xxxx	-177,5735	$\pm 0,14 \cdot 10^{-4}$	
T ₂	yyyy	-94,305	$\pm 0,13 \cdot 10^{-4}$	
T ₃	zzzz	-629,8862	$\pm 0,31 \cdot 10^{-2}$	

Данные Hughes
J. Ch. Ph. 1953, 20, 959
не опубликованы

Дун. инв.-Т паке
0,5324 \pm 0,0024%

O₃

1971

39677v Radiation absorption in 4.75-, 9.6-, and 14.2-nm ozone bands. Moskalko, N. I. (USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Fiz. Atmos. Okeana* 1971, 7(7), 808-10 (Russ). Spectral and integral absorption of the O₃ bands are given for pressures 0.0015-10 atm and content $\omega(\text{O}_3)$ 0.002-200 atm-cm. Parameters m_ν , n_ν , and β_ν of the function of spectral transmission $\tau_\nu = \exp[-\beta_\nu \omega^{m_\nu} P^{n_\nu}]$ in bands at 4.75 and 14.2 nm (for resolution 10 cm^{-1}) are given. Integral intensity α was 466, 47, and 38 $\text{cm}^{-2} \text{atm}^{-1}$ for the bands at 9.6, 4.75, and 14.2 nm. K. Volka

C. A. 1972. 76. 8

O₃

kb. mex.
perei

C.A. 1971. 45. 20

(121942r) Self-consistent-field wave functions, energies, multipole moments, diamagnetic susceptibility and shielding tensors, and electric field gradient tensors for nitrogen dioxide and ozone. Rothenberg, Stephen; Schaefer, Henry F., III (Inf. Syst. Des., Oakland, Calif.). *Mol. Phys.* 1971, 21(2), 317-27 (Eng). By using basis sets of "double zeta plus polarization" quality, non-empirical SCF calcs. have been carried out on the ground states of NO₂ and O₃. The computed total energies, -204.0679 and -224.3093 hartree, are the lowest reported to date for these mols. and are estd. to lie ~0.06 hartree above the resp. Hartree-Fock limits. Calcs. were also carried out without *d* (or polarization) functions, and it was detd. that (1) *d* functions are ~3 times more important on the central atom than on the terminal O in both mols. and (2) *d* functions are less important in O₃ than in SO₂. Calculated 2nd moments of the electronic charge distribution and diamagnetic susceptibilities are in good to excellent agreement with expt. for ozone. Dipole moments for both mols. and quadrupole coupling consts. for NO₂ are only in qual. agreement with expt. The calcd. mol. quadrupole moments of O₃ are in poor agreement with the exptl. values. A large no. of mol. properties are predicted for which no exptl. values are presently available.

1971

14922-11

(11) 1102

O₃

Rothenberg S.,
Schaefer H.

1971

paper

Mol. Phys., 1971,
21, ~ 2, 314

● (C₆₀ NO₂)III

1971

03

119281b Analysis of the ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) combination band of ozone. Snider, Donald E. (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). 1971, 129 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 72-4650. From *Diss. Abstr. Int. B* 1972, 32(7), 4139.

ν_i

C.A. 1972. 76. 20

$O, O_2, O_3, O_2^+, O_2^-$ (суккупация) $\bar{\lambda} 2778^{1r}$ 1971

Weisbeck R., Völkner A.,

Z angew. Phys., 1971, 32, N4, 258-

-265 (neu.)

Das Emissionsspektrum der stillen elektrischen Entladung in Sauerstoff von Normaldruck.

Bte Xuv, 1972, 95161

W 10

CO_2 ; CS_2 ; Na_2O ; OCS ;
 HCN ; SO_2 ; O_3 ; H_2O (cur. n.) \bar{X} 3210 1972
11 11

Anderson A. B.,
J. Chem. Phys., 1972, 57, 1110, 1143-
- 4152 (amu.)

Theoretical approach to
potential energy functions
for linear AB_2 and ABC and
bent AB_2 triatomic molecules.

Bull. Pure, 1973, 7594 10



O₃

7 Б239. Спектры комбинационного рассеяния и инфракрасного поглощения и анализ колебательного спектра озона и O¹⁸-замещенных молекул озона, изолированных в аргоновой матрице. Andrews Lester, Spiker Robert C., Jr. Argon matrix raman and infrared spectra and vibrational analysis of ozone and the oxygen-18 substituted ozone molecules. «J. Phys. Chem.», 1972, 76, № 22, 3208—3213 (англ.)

1972

Измерены спектры КР- и ИК-поглощения O₃ и O₃, обогащенного O¹⁸ в Ar матрице при M/A=50 и 200. В спектре КР найдены линии основных колебаний O₃¹⁶: ν_1 1104 см⁻¹, очень сильное; ν_2 701 см⁻¹ сильное, ν_3 1038 см⁻¹, слабое. Наряду с этими линиями в спектре обнаружены также полосы еще 5 изотопич. производных O₃ с O¹⁸. Изотопич. структура полос поглощения обнаружена и в спектре ИК поглощения O₃. Отмечено незначительное отличие частот основных колебаний O₃ в газе и в матрице (максим. 2—3 см⁻¹). Проведен расчет основных колебаний O₃ и определена величина валентного угла O₃: 116.3±4°.

Г. Кузьянц

(ν_1, ν_2, ν_3)

XI-3266

X. 1973. № 7 .

1972

O₃

158277v Argon matrix Raman and infrared spectra and vibrational analysis of ozone and the oxygen-18 substituted ozone molecules. Andrews, Lester; Spiker, Robert C., Jr. (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Phys. Chem.* 1972, 76(22), 3208-13 (Eng). Raman spectra of Ar matrix-isolated O₃ and ¹⁸O-enriched ozones were obtained by using reduced power Ar ion laser excitation. Photodecompn. of ozone was sufficiently moderated to obtain excellent Raman spectra,

(v_i)

with the following ¹⁶O₃ assignments: ν_1 , 1104 cm⁻¹, very strong; ν_2 , 701 cm⁻¹, strong; ν_3 , 1038 cm⁻¹, weak. Infrared spectra provided complementary data: ν_1 , 1105 cm⁻¹, very weak; ν_2 , 704 cm⁻¹, weak; ν_3 , 1040 cm⁻¹, very strong. Potential consts. were calcd. by using vibrational fundamentals for 6 isotopic O₃ mols. An O₃ valence angle of $116.3 \pm 4^\circ$ was calcd. from 4 isotopic ν_3 assignments, in excellent agreement with the microwave value.

C.A. 1972. 77. N 24.

$H_2S, H_2Se, H_2O, SO_2, ClO_2, H_2O, O_3$ (u.n.) 1972
(param) 11 3

Alix A., Bernard Z., \bar{x} 3029 12

Z. Naturforsch., 1972, 27a, 114, 593-
nem 6 6-6ax - 597 (anul.)

Parametric study of functions
of molecular vibrations. IV.

Coriolis coupling constants for
the molecules XY_2 and X_3 (symmetry

Ca 72 Cav) 544 p (9)

Proc Roy Soc, 1972, 18565

O₃

XI-2802

1972

14 Б234. Инфракрасный спектр поглощения газообразного озона. Barbe Alain, Segrain Claude, Douve Pierre. Spectre d'absorption infrarouge de l'ozone gazeux. «С. т. Acad. sci.», 1972, 274, № 9, B615—B618 (франц.)

Исследован ИК-спектр поглощения газ. озона (I) при -110° в области $\sim 400-4025 \text{ см}^{-1}$ с использованием специальной многоходовой кюветы (длина оптич. пути 4 м). Дано отнесение колебательного спектра I. Для полос I типа симметрии A_1 и B_1 наблюдается вращательная структура. На основании анализа спектра определены след. колебательные постоянные. I; $\omega_1=1128,0$, $\omega_2=715,5$, $\omega_3=1092,7$, $X_{11}=-1,6$, $X_{22}=-1,0$, $X_{33}=-12,3$, $X_{12}=-8,3$, $X_{13}=-35,0$, $X_{23}=-17,0 \text{ см}^{-1}$.

А. П. Александров

X. 1972. 14

O₃

XI-2802

1972

Di

u.k.c.

1673n Infrared absorption spectrum of gaseous ozone. Barbe, Alain; Secroun, Claude; Jouve, Pierre (Lab. Phys. Mol., Fac. Sci., Reims, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1972, 274(9), 615-18 (Fr). The ir absorption spectrum (400-4000 cm⁻¹) of gaseous O₃ was obtained at -110° with a 3-m optical-path cell. The 18 bands obsd. were assigned to fundamentals (ν_1 , ν_2 , and ν_3) and combination vibrations, and were used to calc. the mech. anharmonicity const. and zero-order frequencies.

C. A. 1972. 44. 2

Brand Y.C.D., Srikames-
waran K.,

Feb. Chem. Phys. Lett., 1972, 15, 130

65 O₃ (743)

M.N.

0

3

XI-2807

1972

39567] Infrared absorption spectra of isotopic ozone isolated in rare-gas matrixes. Brewer, Leo; Wang, J. Ling-Fai (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(2), 759-62 (Eng). Some of the isotopic O₃ mols. of different combinations of ¹⁶O and ¹⁸O were synthesized and isolated in rare-gas matrixes at 20°K. Their ir absorption bands were identified. The isotope effects are calcd. for sym. as well as unsym. isotopic O₃ mols.

V_i

ИК спектры в
матрице
кристальной среды

С.А. 1972. № 8

588

эммиль

XI-2807

1972

O₃

12 Б227. Спектры инфракрасного поглощения изотопических разновидностей озона, изолированных в матрицах инертных газов. Brewer Leo, Wang J. Ling-Fai. Infrared absorption spectra of isotopic ozone isolated in rare-gas matrices. «J. Chem. Phys», 1972, 56, № 2, 759—762 (англ.)

Измерены спектры ИК-поглощения O₃, изолированного в матрицах Хе и Кг. В экспериментах использовался O₃ с различным содержанием ¹⁶O и ¹⁸O. Отмечено, что при переходе от матрицы в Кг к матрице в Хе наблюдается красное смещение всех трех полос основных кол. O₃. Предложено отнесение полос основных кол. к различным изотопически-замещенным молекулам O₃.
Г. Кузьяни

физолер.
в мат-цах
(Хе и Кг)

ИК-спектр
пошеш.

X. 1972. 12

эммерк 889

18 Б86. Теоретическое исследование возбужденных состояний озона. Hay P. J., Goddard W. A., III. Theoretical results for the excited states of ozone. «Chem. Phys. Lett.», 1972, 14, № 1, 46—48 (англ.)

Обобщенным методом валентных схем и методом взаимодействия конфигураций в гауссовом базисе (РЖХим, 1970, 10Б6) рассчитано основное (1A_1) и низшие возбужденные состояния O_3 . Последние различаются между собой мультиплетностью и пространственной симметрией в конфигурации ядер C_{2v} , и в одноэлектронном приближении характеризуются различным числом π -электронов. Предложена интерпретация спектра O_3 с привлечением возбужденных состояний $^3B_2(4\pi)$, $^1A_2(5\pi)$, $^1B_1(5\pi)$, $^1A_1(6\pi)$ и $^1B_2(4\pi)$. Все эти состояния, за исключением $^1A_1(6\pi)$, отвечают равновесной конфигурации ядер с углом при центральном атоме кислорода около 120° . Для состояния $^1A_1(6\pi)$ равновесное значение этого угла близко к 70° . В этом состоянии озон диссоциирует на возбужденную молекулу $O_2(^1\Delta_g)$ и возбужденный атом $O(^1D)$.

Е. Е. Никитин

1972

5508-1X

O₃

§₁

исп. ср-м

X. 1972.18

1972

40755w Theoretical results for the excited states of ozone.
Hay, P. J.; Goddard, W. A., III (Arthur Amos Noyes Lab.
Chem. Phys., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.).
Chem. Phys. Lett. 1972, 14(1), 46-8 (Eng). On the basis of
ab initio calcns. (configuration interaction and generalized
valence bond), 8 excited states of O₃ are found with vertical
excitation energies < 7 eV. By using these results the various
exptl. transitions are assigned. One state has an equilateral
triangle as the min. energy geometry (1.5 eV above the ground
state).
Raylene Adams Coad

O₃
(log. calc.)

U.S. Dep.
Interior

C.A. 1972, 77, 6

02530y Configuration interaction calculations on ozone and O_3^- . Heaton, Marie M.; Pipano, Aaron; Kaufman, Joyce J.

1972

(Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). *Int. J. Quantum Chem., Symp.* 1972, No. 6, 181-6 (Eng). In a theor. study to choose between the several exptl. values for the vertical electron affinity of O_3 , configuration interaction (CI) calcs. were performed for O_3 and O_3^- . Large Gaussian basis sets and symmetry adapted complex functions were used. To a good approxn., the electron affinity for O_3 should be equiv. to the difference in the calcd. single excitation CI results for O_3 and O_3^- . The difference between natural orbital single excitation CI results for O_3 and O_3^- gave a vertical electron affinity of 2.12 eV. This calcd. value is in excellent agreement with the recent exptl. photodetachment measurements (2.1-2.2 eV). This agreement implied that the equil. geometry of O_3^- was similar to that of O_3 . CI calcs. of the potential curves of O_3 and O_3^- from 114.8 to 118.8° indicate that the equil. geometry of the ion is close to that of the parent mol. Higher excitation CI calcs. were carried out using iterative natural orbitals resulting from lower excitation CI calcs.

O_3
 O_3^-

kb. mex.
jacobin

hess-1x

C.A. 1973.78. N10

O_3

O_3^-

A_1^- ; ч.н

х. 1973

№ 14

(11523.) Расчеты O_3 и O_3^- методом конфигурационного взаимодействия. Heaton Marie M., Pirano A., Kaufman Joyce J. Configuration interaction calculations on O_3 and O_3^- . «Int. J. Quant. Chem.», 1972, Вып. № 6, 181—186 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с итерациями по натуральным орбиталям проведены неэмпирич. расчеты O_3 и O_3^- . Использован базис из сгруппированных гауссовых функций s , p и d типов (4, 2, 1). Обсуждены способы оценки сродства к электрону при расчетах молекул разными методами. Сродство к электрону для O_3 , оцененное как разность между значениями энергии для O_3 и O_3^- , рассчитанными с учетом только однократно

возбужденных конфигураций при равновесной геометрии O_3 ($R=2,415$ ат. ед., $\Theta=116,8^\circ$), найдено расчетным 2,12 эв, что хорошо согласуется с эксперим. оценкой 2,1—2,2 эв. Это согласие указывает на близость равновесных конфигураций O_3 и O_3^- , к-рая подтверждается расчетом по методу ССП потенциальных кривых в интервале $114,8—118,8^\circ$, приводящим к значению $\Theta=117^\circ$ для O_3^- . Этот результат мало меняется при учете конфигурац. взаимодействия, включающем как однократные, так и двукратные возбуждения.

В. Я. Симкин

1972

ХКС-14

(+1)

⊗

1972

XI-3314

7 Д139. Расчеты конфигурационного взаимодействия в O_3 и O_3^- . Heaton Marie M., Pipano Aaron, Kaufman Joyce J. Configuration interaction calculations on O_3 and O_3^- . «Int. J. Quant. Chem.», 1972, Symp. № 6, 181—186 (англ.)

(м.и) С целью получения электронного сродства (ЭС), по методу ССП выполнены расчеты основных состояний молекул O_3 и O_3^- с учетом конфигурац. взаимодействия и использованием большого гауссовского базиса. Предполагается идентичность геометрич. параметров O_3 и O_3^- . Учет одиночных возбуждений практически не влияет на энергию O_3 , но понижает энергию O_3^- и дает

Ф. 1973. № 7

верхний предел ЭС. Расчеты без учета одиночных возбуждений дают нижний предел ЭС. Хорошее согласие среднего ЭС с эксперим. данными означает действительную близость геометрич. характеристик O_3 и O_3^- , что подтверждается непосредственным вычислением валентного угла ($\approx 117^\circ$) при длине связи 2,415. Представлены результаты расчетов с учетом двойных для O_3 и некоторых из тройных для O_3^- возбуждений, необходимых для уточнения ЭС, но значительно увеличивающих объем вычислений.

Б. С. Рябов


H_2O ; H_2S ; H_2Se ; SO_2 ; O_3 (сущ.
иост.) ХТ 3622. 1972

Кредецкий Е. И., Свердлов Л. М.,

сб. "Материалы 1-го Всес. симпози.

по вращательн.; спектрам
молекул, 1969", Баку, 1972, 72-78

(русск.) 10

Расчёт деректов и керуши и посто-
янных колебательн.-вращательн.-
ного взаимодей. ст. вил и их ислав
зависит от  определении сим-
виз носительных.

Физ. Личн., 1973, 185162

10

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

McCain D.C., Palke W.E. XI 2984
J. Chem. Phys., 1972, 56, N10, 4957-
- 4965 (англ.)

Calculation of hyperfine
coupling constants in inorganic
radicals.

РР72
Zh. Fiz. Khim., 1972, 21524

Ученый
взнос
10-6 руб. (Ф)

O₃ (nc)

1972

64611t General properties of the infrared spectra of liquid ozone and its reaction product with atomic hydrogen in the form of a peroxide-radical condensate. Nekrasov, L. I.; Yagodovskaya, T. V. (Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1972, 46(11), 2702-5 (Russ). Ir spectra of liq. O₃ prepd. from an O glow discharge plasma and peroxide radical condensates prepd. by bombardment of O₃ with at. H were recorded and compared with calcd. data for O₄; the agreement of most exptl. and calcd. bands showed that O₄ is formed simultaneously with O₃ during low-temp. condensation of O₂ plasma. Wladyslaw S. Brud

chemp

C. A. 1973. 78 N10

O₃

1972

X1-3332

→ 170866u Upper state rotational constants for the ~~($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$)~~ combination band of ozone. Snider, D. E.; Shaw, J. H. (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 44(2), 400-2 (Eng). By using a rigid rotor model, the upper (111) state rotational consts. for the ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) combination band of O₃ were detd. as $A' = 3.55557$, $B' = 0.43683$, $C' = 0.38462$ cm⁻¹ and $\nu_0 = 2785.236$ cm⁻¹. Good agreement between the obsd. and calcd. line positions in both the upper and lower states suggest that the centrifugal distortion consts. are similar in both states and that no strong perturbations are present. Good agreement was obtained between exptl. band intensities and those calcd. with a rigid asym. rotor model.

(u, n)

C. A. 1972, 77, N26.

XI-3332

1972

O₃

У 5 Д380. Вращательные константы верхнего состояния для комбинационной полосы ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) озона. Snider D. E., Shaw J. H. Upper state rotational constants for the ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) combination band of ozone. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 44, № 2, 400—402 (англ.)

Выполнены анализ вращательной структуры комбинационной полосы ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) озона при 2785 см^{-1} . Спектры высокого разрешения ($0,07 \text{ см}^{-1}$) получены в 20-м многоходовой кювете, наполненной смесью 98% O₂ + 2% O₃ при общем давл. $\sim 40 \text{ мм рт. ст.}$ Оптич. длина пути не менее 500 м. Точность определения волн. чисел отдельных линий составляла $0,010 \text{ см}^{-1}$. Произведено отнесение 236 вращательных линий для значений $J \leq 26$. Вычислены вращательные константы верхнего состояния (в см^{-1}): $A' = 3,55557$; $B' = 0,43683$; $C' = 0,38462$; $\nu_0 = 2785,236$. Библ. 15. И. Дворников

М.И.

Ф. 1973 N 5

XI-3332

1972.

O₃

10 Б235. Вращательные константы верхнего состояния для комбинационной полосы озона ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$). (Snider D. E. Shaw J. H. Upper state rotational constants for the ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) combination band of ozone. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 44, № 2, 400—402 (англ.)

(ν_i)

Изучен вращательный спектр поглощения озона в области около 2800 см^{-1} . Анализ методом жесткого ротатора подтвердил отнесение полосы $2785,24 \text{ см}^{-1}$ к колебанию ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$). Малая интенсивность полосы 2735 см^{-1} не позволила провести вращательный анализ. Спектр регистрировался вакуумным решеточным спектрометром Эберта с репликой $220 \text{ мм} \times 165 \text{ мм}$ с 75 штрихами/мм и с охлаждаемым детектором PbS. Спектр получался в шестом порядке, спектральное разрешение составляло $0,07 \text{ см}^{-1}$. Сделано отнесение положений 236 линий с $J \leq 26$. Нек-рые линии с более высоким J .

X. 1973. N10

идентифицированы как линии P -ветви, но они выходят из откалиброванной области. Линии R -ветви с $J > 26$ и линии Q -ветви не разрешаются из-за перекрывания. Оценены вращательные константы A' , B' , C' и v_0 верхнего состояния полосы озона ($v_1 + v_2 + v_3$). Выбраны вращательные константы основного состояния, полученные на основании анализа методом жесткого ротатора с малыми значениями J .

Л. С. Гуляева

O₃ (Vi) Snider D. E., AI3082 1972

Diss. Abstr. Int., 1972, B32, N7, 4139
(ann.)

Analysis of the ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) combi-
nation band of ozone.

①

CA, 1972, 76, N20, 119281B

O₃

ommuck 760 | 1972

M. Spoliti, S. Nunziante
Cesaro, and B. Mariti.

geom.
и.к.сп.
в инертн. матр.

for publ. on J. Chem. Phys."

1972

O₃

22 Б922. Фотолиз озона в ультрафиолетовой области. IV. Передача колебательной энергии $O_2^+ + O(^3P)$. Webster Henry, III Bair Edward J. Ozone ultraviolet photolysis. IV. $O_2 + O(^3P)$ vibrational energy transfer. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 12, 6104—6108 (англ.)

Измерена скорость релаксации колебательного возбуждения молекул $O_2^+ (V'' \geq 14)$ в основном состоянии $X^3\Sigma_g^-$ при импульсном фотолизе ($\lambda 2900 \text{ \AA}$) смесей O_3 —Ar. Скорость релаксации пропорциональна конц-ии $O(^3P)$ при условии, что отношение $[O(^3P)]/[O_3]$ не очень мало и может быть характеризовано бимолек. константой скорости k_{ij} . Полученные данные анализируют, исходя из предположения, что k_{ij} , можно записать в виде $K_{10}[1 + \beta(i-1)] \exp[-\gamma(i-j-1)]$, где i и j — квантовые числа соотв. начального и конечного состоя-

X. 1972. 22

ний ($i > j$). β определяет зависимость от энергетич. уровня и γ -зависимость от кратности квантовых переходов. Принимая $k_{10} = 6 \cdot 10^8$ л/моль·сек, получены величины $\beta = 0,04$ и $\gamma = 0$, т. е. $k_{ij} = 6 \cdot 10^8 \cdot [1 + 0,04(i-1)]$ л/моль·сек (напр. $k_{19,j} = 1 \cdot 10^9$ для всех j). Сильное увеличение скорости релаксации с ростом энергетич. уровня объясняется, если принять во внимание многоквантовые переходы (для $\nu'' = 14-19$ скорость релаксации в ~ 100 раз больше, чем скорость релаксации для $\nu'' = 1$, наблюдаемая в опытах с ударными трубами. Учитывая многоквантовые переходы, полученные данные можно согласовать с данными в ударной волне и траекторными измерениями. Сообщ. III. см. РЖХим, 1972, 7Б1260.

А. Шведчиков

Wong S.F., Vorburger T.V., Woo S

1972

Phys. Rev A, 1972, 5, N6, 2598

"Фотоотраб в O_3^- в трубе дрейфа"

$$A_{O_3} = 1.99 \pm 0.10 \text{ эб}$$