

CaOH

huans
CaOH.

Gaydon A. G.

(1955)

Proc. Roy. Soc. London, A 231, 437-45
(1955).

Green and orange band spectra
of CaOH , CaOD , CaO .

CaOH

Lugden T. M., Wheeler R. (1955)

Disc. Farad. Soc. 119, 76

Образование ионов в связи
с присутствием в водородно-
ионно-ионном слое
ионно-земе. Заменено

Ca OH
CaO

Huldt B., Lagerqvist A. 1956

Arkiv Fysik, 1956, 11, 347-356

Французские колонаты
Алифав каавуи и
Фронизия

CaOH

mmccc 8014

1957

Gaydon A.G.

u.n

Mem. Soc. roy. sci Liege
1957, 18, p 507-

Laboratory production and
assignment of  Spectra of
Alkaline earth hydroxide and oxide

Воп-2524-~~XX~~

Оттиск 299/1957

Ca OH
Sc OH

Вейс М.В., Цурбар Н.В.

Оттиска и спектров, 1957, 2, 274.

$D_0(\text{Ca-OH})$ Энергия связи в молеку-
лах Ca OH и Sc OH .

есть оттиск N 299



Ca·OH

(автореферат)

1965

В. Т. Рабова

Д:

Определение энергии диссоциации галогенидов и гидрооксидов щелочноземельных металлов на основании спектроскопического исследования равновесия реакций в плазме

МГУ, Москва, КХН.

CaOH
SrOH
BaOH

Вср - 2750 - IX

1965

D_0

3 Б555. Исследование энергии связи металл — гидроксил в молекулах CaOH, SrOH и BaOH. Рябова В. Г., Гурвич Л. В. «Теплофиз. высоких температур», 1965, 3, № 2, 318—321

На основании спектроскопич. исследования равновесия реакций Ca, Sr и Ba с продуктами сгорания ряда водородовоздушных пламен получены значения энергий диссоциации гидроокисей щел.-зем. металлов, равные соотв. $D_0(\text{Ca—OH}) = (100 \pm 8)$, $D_0(\text{Sr—OH}) = (95 \pm 8)$ и $D_0(\text{Ba—OH}) = (114 \pm 8)$ ккал/моль. Реферат авторов

Л. 1966. 3



CaOH

сентябрь 3030 1967

Белы У. В., Тупков Л. В.

Скелет

ногав

В. У. В.

Докл. А. Н. Сеев, 1967,

173, № 1325-28

CaO, S_2O (молем. вес)

CaOH (сметр. м. н. (1))

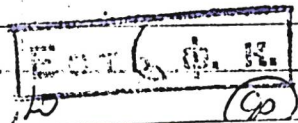
5
IX 45

Brewer L., Lange R.

J. Molec. Spectrosc., 1968, 25, 13, 330-339
(am).

near infrared bands of diatomic
CaO and S_2O .

Pub Chem., 1968, 22 5274



CoOH, $\text{Ca}(\text{OH})_2$, SrOH , $\text{Sr}(\text{OH})_2$,
 BaOH , $\text{Ba}(\text{OH})_2$ (До, Кр)

9
1968

IX 413

Cotton D.H., Jenkins D.R.

Trans. Faraday Soc., 1968, 64, III,
2988-2997 (англ.)

Dissociation energies of gaseous
alkaline earth hydroxides

Pitt Lum., 1969
95911

10

ЕСТЬ М, НО (р)

CaOH, SiOH, BaOH (Do) 1756 1969

Рядова В.Г., Гурвич Л.В.

В.с., Прикладная спектроскопия.
Т.1., М., Наука, 1969, 258-262

Исследование энергии связи металл-
гидроксил в молекулах CaOH, SiOH
и BaOH.

РЖХим, 1969

215775

Ю (Ф) 6

CaOH

unpublished
in primary

Kelly, Padley

1970

(7)

1008-18-300
39-18-168

(251426) Ionization potentials of alkaline earth monohydroxides. Padley, Peter J.; Kelly, Roger (Dep. Chem., Univ. Coll. Swansea, Swansea, Wales). *J. Chem. Soc. D* 1970, (23), 1606-7 (Eng). Ionization potentials of CaOH, SrOH, and BaOH are

5.90, 5.55, and 5.25 eV, resp., as found by applying 2nd-law procedure to results of an electrostatic probe study of Ca, Sr, and Ba reactions in fuel-rich H_2 - O_2 - N_2 flames (temps. 1900-2700°K).

FBJN

C. A. 1971 74.6

+2 m
+1 measured



CaOH

Bq-4756-VIII

1974

(3) 10845s Use of a rotating single probe in studies of ionization of additives to premixed flames. 4. Alkaline earths and uranium. Kelly, R.; Padley, P. J. (Dep. Chem., Univ. Coll. Swansea, Singleton Park/Swansea, Wales). *Trans. Faraday Soc.* 1971, 67(Pt. 5), 1384-96 (Eng). Total pos. ion concns. N ; produced from Ca, Sr, Ba, and U aq. salt-spray additives in fuel-rich, premixed $H_2 + O_2 + N_2$ flames have been quant. examd. For the alk. earths M , the present findings are consistent with the following scheme: $M(OH)_2 + H \leftrightarrow MOH + H_2O$; $MOH + H \leftrightarrow MO + H_2$; $MO + H \leftrightarrow MOH^+ + e^-$. $M(OH)_2$ is the dominant neutral species in the region of measurement. Through a 2nd law procedure, the ionization potentials of CaOH, SrOH, and BaOH are deduced to be 5.9 ± 0.1 , 5.55 ± 0.1 , and $5.25 \pm$

(+3) SrOH
BaOH
☒ HNO_3

C.A. 1974 752

0.1 eV, resp. With U also, the evidence suggests a gaseous scheme, equiv. overall to the above, viz., $\text{UO}_n\text{H}_m + 3\text{H} \leftrightarrow \text{UO}_{n-1}\text{H}_{m-1}^+ + e^- + \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$, with M probably the uranyl species, i.e., $\text{H}_2\text{UO}_4 + 3\text{H} \leftrightarrow \text{HUO}_3^+ + e^- + \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$, with $D_0^\circ(\text{HO-UO}_3\text{H}) + \text{I.P.}(\text{HUO}_3) = 950 \pm 40 \text{ kJ mol}^{-1}$, and $\text{I.P.}(\text{HUO}_3) < 3.9 \text{ eV}$. When any of these metals are present in the flame together with an alkali metal, N_i may be much greater than predicted if the 2 additives behaved independently. This effect is consistent with a catalysis of the alkali metal ionization rate by the 2nd additive; the results reveal the possibility of a heterogeneous as well as a homogeneous route.

СаОМ

ВФ-4756-VIII

1971

у

24 Б1203. Использование вращающегося одиночного зонда для изучения ионизации присадок в пламенах гомогенных смесей. Часть 4. Щелочноземельные элементы и уран. Kelly R., Padley P. J. Use of a rotating single probe in studies of ionization of additives to premixed flames. Part 4. The alkaline earths and uranium. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 5, 1384—1396 (англ.)

+3

+1

III обш.



X. 1971. 24

С использованием методики вращающегося зонда измерены конц-ии положит. ионов в богатых пламенах гомог. смесей $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$ с добавками распыленных р-ров солей Ca, Sr, Ba и U. Предложена схема ионизации щелочноземельной добавки M: $\text{M}(\text{OH})_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{MOH} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{MOH} + \text{H} \rightleftharpoons \text{MO} + \text{H}_2$, $\text{MO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{MOH}^+ + e^-$. $\text{M}(\text{OH})_2$ — преобладающая нейтр. частица. Определены потенциалы ионизации CaOH, SrOH и BaOH, равные $5,9 \pm 0,1$; $5,55 \pm 0,1$ и $5,25 \pm 0,1$ эв соотв. В случае урана вероятно схема $\text{H}_2\text{UO}_4 + 3\text{H} \rightleftharpoons \text{HUO}_3^+ + e^- + \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$; потенциал ионизации HUO₃ $< 3,9$ эв. При введении смеси двух присадок — щел. металла и щел.-зем. наблюдается катализ (гомог. или гетерог.) ионизации 1-го из них вторым.

Е. С. Семенов

CaOH

ВФ - 4134 - И

1972

12 Б1003. Потенциалы ионизации CaOH и SrOH. Hayhurst A. N., Kittelson D. B. The ionization potentials of CaOH and SrOH. «Combust. and Flame», 1972, 19, № 2, 306—308 (англ.)

(3). В богатых по топливу пламенах $H_2-O_2-N_2$ с присадками Ca и Sr масс-спектрометрически при давл. 1 атм измерены конц-ии ионов H_3O^+ , $H_3O^+(H_2O)_n$ с $n \leq 4$, M^+ и MOH^+ , где M — металл. Т-ра пламени изменялась от 2080 до 2570° K. В предположении равновесного протекания р-ции $M^+ + H_2O \rightleftharpoons MOH^+ + H$ (1) в точке отбора пробы оценены стандартные изменения энтропии р-ции (1), и на основании этих оценок определены потенциалы ионизации CaOH и SrOH, равные, соотв., $5,7 \pm 0,3$ и $5,4 \pm 0,3$ эв. Г. И. Скачков

Х. 1973 № 12

(+1)

☒

CaOH

Bep - 4134 - IX

1972

(3)

47945n Ionization potentials of calcium hydroxide and strontium hydroxide. Hayhurst, A. N.; Kittleson, D. B. (Dep. Chem. Eng., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *Combust. Flame* 1972, 19(2), 306-8 (Eng). The reaction $M^+ + H_2O = MOH^+ + H$ takes place with alk. earth metal M in $H_2-N_2-O_2$ flames. Value of the equil. const., enthalpy ΔH and entropy change for this reaction was detd. Ionization potentials for CaOH and SrOH are calcd. to be 5.7 ± 0.3 eV and 5.4 ± 0.3 eV, resp., using values of the std. ΔH for the above reaction at abs. 0 in which it is assumed that the reaction freezes 0.75 ± 0.35 nozzle diams. downstream of the sampling orifice. Graham S. Pearson

C.A. 1973. 78. N 8

(+1) ☒

Салл; Валл; СадН; ВаОН;
Салл₂; Валл₂; СаллОН; ВаллОН (До) 1972

Рябови В. Т. Хитров А. Н. Турбин Л. В.
Темпориз. выс. темп. 1972, 10,
N4, 744-9 (русс.)

Секторское определение
энергий диссоциации молекул.

III. Моноклорид кальция, дихлорид
кальция, моноклорид кальция,
дихлорид кальция, монокло-
рид бария, дихлорид бария,
моноклорид бария, и хлорид
окиси бария.
СА, 1972, 77, 132, 13154410

CaOH

SrOH

(у)

1973

10 Б1175. Механизм и кинетика образования и комбинации ионов, возникающих при добавке щелочно-земельных элементов в пламена $H_2/O_2/N_2$. Hayhurst A. N., Kittelson D. B. Mechanism and kinetics of production and recombination of ions arising from additives of alkaline earth elements in flames of $H_2/O_2/N_2$. «Combust. Inst. Eur. Symp. 1973». London—New York, 1973, 261—265 (англ.)

Масс-спектрометрически измерялись концентрации ионов щел.-зем.-металлов в обогащенных топливом пламенах $H_2/O_2/N_2$, горящих при атмосферном давл. в т-рой области 1820—2570° К. Металлы вносились в пламя в виде водн. р-ров их хлоридов. Были зафиксированы ионы: H_3O^+ и его гидраты, K^+ , $M^+(H_2O)$, MOH^+ и его гидраты до $MOH^+(H_2O)_4$. Энергии гидратации одной молекулы воды составляют для $CaOH^+$ 123 ± 14 кДж/

л. 1975 N 10

☒

(+1)

и пламени

☒

/моль, а для SrOH^+ 112 ± 14 кдж/моль. Определены потенциалы ионизации CaOH и SrOH (550 ± 28 и 520 ± 28 кдж/моль соотв.), а также энергии активации образования MOH^+ по р-ции $\text{MO} + \text{H}$ или $\text{M} + \text{OH} \rightarrow \text{MOH}^+ + e$ (62 ± 15 и 66 ± 15 кдж/моль соотв.). Константы скорости рекомбинации K_r и ионизации K_i в единицах молекула $\text{cm}^3 \cdot \text{сек}^{-1}$ равны: $K_i^{\text{Ca}} = -(10,6 \pm 1,3) - (58 \pm 40) / 2,303 \cdot RT$; $K_i^{\text{Sr}} = -(10,7 \pm 0,8) - (63 \pm 35) / 2,303 \cdot RT$; $K_r^{\text{Ca}}(2000^\circ \text{K}) = 1,2 \cdot 10^{-7,0 \pm 0,4}$; $K_r^{\text{Sr}}(2000^\circ \text{K}) = 7,0 \cdot 10^{-8,0 \pm 0,4}$.

В. Заманский

1973

CaO; SrO; BaO; (Do) 184390
CaOH; SrOH; BaOH (Do) 1747

Kalff P. J., Alkemade C. T. J.,

J. Chem. Phys., 1973, 59, N5, 2572-
-2579 (ann.)

Determination of dissociation
energies for some alkaline
earth (hydro-) oxides in CO/H₂O
flames.

RECEIVED 1974

Proc Xuv, 1974, 75 1095

10, 11 (P) 6

CaOH з Тырбура Л.В. 1973

Тырбура Л.В., Петрова В.Т.,
Хумпов А.Н.,

(70) "Faraday Symposium of the
Chem. Soc.", 1973, N 8, 83-106

Определение жерми гиссодина...



001 34685

CaOH (^{U. M.} ~~on crystal structure~~) 1973
SrOH IX 4234

Van der Huik J., Hollander T.,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans-
fer, 1973, 13, 113, 273-88 (anal.)

Identification of the emitters of
some visible alkaline-earth bands
in flames.

LC
~~for~~ aprimary

ca, 1973, 78, 114, 90604n

CaOH; SrOH (Y) IX 4702 1974

Hayhurst A.N., Kittelson D.B.,

Proc. Roy. Soc. London., 1974, A338,

N1613, 155-173 (anal.) ecro prk.

Ionization of alkaline earth
additives in hydrogen flames.
I. Hydrogen atom concentra-
tions and ion stabilities.

Proc. Roy. Soc. London. 1975. 15999

20

(9)

1974

Cadde Hurk G. Van der, Hollander T.
Alkemade C.Th. G. - G. Quant
N.N. Spectrosc. and Radiat. Transfer.
1974, 14, p. 1167.

CaOH

SrOH

оттиски 2139

1974.

18 Б1034. Исправление к статье «К определению энергий диссоциации некоторых (гидро-) окисей щелочноземельных элементов в CO/N₂O пламенах. Kalfi P. J., Alkemade C. Th. J. Erratum. On «Determination of dissociation energies for some alkaline earth (hydro-) oxides in CO/N₂O flames». «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 4, 1698 (англ.)

Энергии диссоциации CaOH и SrOH, рассчитанные по изменению содержания молек. соединений в пламени CO/N₂O (см. РЖХим, 1974, 7Б1095), содержат ошибку вследствие использования неточных значений моментов инерции CaOH и SrOH. Исправления привели к $D(\text{CaOH}) = 4,44$ эв и $D(\text{SrOH}) = 4,34$ эв, вместо 4,36 и 4,40 эв соответственно.

Г. И. Скачков

(до)

2. 1974 N 18



71-4634-1X
впр - 4634 - дв

CaOH

1974

Румбов. А. И.

м.п.

Автоматический к.р.и.

МГЭ, 1974

CaOH

Оттиск 3431

1975

SrOH

BaCl

флуоресценция
в пламенах

6 Б1187. Молекулярная флуоресценция CaOH, SrOH и BaCl в пламенах. Human H. G. C., Zeegers P. J. Th. Molecular fluorescence of CaOH, SrOH and BaCl in flames. «Spectrochim. acta», 1975, B30, № 6—7, 203—209 (англ.)

Молекулярная флуоресценция CaOH, SrOH и BaCl в аргон-кислород-водородных пламенах зарегистрирована при использовании непрерывного источника возбуждения. Спектры фотовозбуждаемой флуоресценции и собственного испускания пламен с добавками в-в оказались идентичны. Распределение интенсивности флуоресценции в пределах одной полосы не зависит от спектрального распределения интенсивности возбуждающего света, что указывает на то, что до испускания флуоресценции происходит перераспределение поглощенной



X1976 №6

(+1) пламена

(+2) молекулы.

энергии. Путем помещения в пучок возбуждающего света широкополосных фильтров показано, что происходит перераспределение энергии между различными электронными уровнями. Измеренные значения эффективностей молек. и атомной флуоресценции оказались величинами одного порядка.

Резюме

1976

CaOH

Sakurai K., et al
Chem. Phys. Lett., 1976,
39, N3, 442-4.

(срок
химического)

88.4530

(св. CaH) III

1977

CaOH

SrOH

BaOH

91: 217165w Spectrophotometric determination of the dissociation energy of alkaline earth metal hydroxides. Ryabova, V. G.; Gurvich, L. V.; Khitrov, A. N.; Nazarenko, I. I. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). *Vses. Konf. Kalorim., [Rasshir. Tezisy Dokl.]*, 7th 1977, 2, 293-7 (Russ). Akad. Nauk SSSR, Inst. Khim. Fiz.: Moscow, USSR. The dissoen. energies of hydroxides of Ca, Sr, and Ba were measured by the procedure of G. et al. (1973). The resulting values in kcal/mol are, resp., 207, 200, and 214 ± 7 .

(Do)

(+2) ☒

C.A. 1979, 9, N26

CaOH

оттиски 4686

1977

Старовойтов Е. М.

Рябова В. Г. Никитров А. Н.

Гурвич Л. В. Назаренко И. И.

Белль А. В.

теплогидр. бассейнов тесноты;
1977, 15(4), 909-11.

(см. CaO; III)

(Do)

СаQH

1977

Старовоев Е. М.

(до) Являюсь гусем.
на евангелии урени
стечении кхн.

Нати, Уварово, 1977

1978

CaOH

CrO

MnO

C₂

спектр
флуоресц.

(+3)

☒

ф. 1979, N4

4 Д448. Возбуждение молекулярной флуоресценции компонент пламени непрерывным лазером. Blackburn M. B., Mermet J. M., Winefordner J. D. CW-laser excited molecular fluorescence of species in flames. «Spectrochim. acta», 1978, A34, № 9, 847—852 (англ.)

С помощью непрерывного перестраиваемого лазера на красителе исследованы спектры возбуждения (540—640 нм) флуоресценции пяти соединений, образующихся в пламени: SrOH, CaOH, CrO, MnO и C₂. Вращательную структуру линий удалось наблюдать только в спектрах C₂. Указано, что в настоящее время имеются большие трудности в интерпретации структуры спектров.

К. Б.

CaOH
CaOH+

1978.

Jensen D.E; et al.

(Do)

Proc. Roy. Soc. London.
1978, A364(1979) 509-35.

(see CaO; III)

CaOH

оттиск 7004

1978

Kawamura H.

интересна.

продумав
лучше.

в планах.

Bull. Chem. Soc. Japan,

1978, 51 (10) 2873-78.

CaOH
SrOH

флуоресц.
молекул.

⑦19

Ф. 1949, 11

Оттиск 6843 1978

1 Д494. Возбужденная лазером флуоресценция молекул CaOH в пламени «воздух—ацетилен». Weeks S. J., Haraguchi H., Winefordner J. D. Laser-Excited molecular fluorescence of CaOH in an air-acetylene flame. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 19, № 6, 633—640 (англ.)

Изучены спектры флуоресценции и возбуждения флуоресценции (область 480—7000 нм) пламен «воздух—ацетилен», содержащих CaOH и SrOH (конц-ии — 100—5000 мг/мл). Спектры возбуждались импульсным перестраиваемым лазером на красителе ($\lambda_{\text{возб}}(\text{CaOH}) = 554 \text{ нм}$, 623 нм , $\lambda_{\text{возб}}(\text{SrOH}) = 682 \text{ нм}$), накачка осуществлялась азотным лазером, т-ра пламен $\sim 2400^\circ \text{K}$. В спектрах проявлялась флуоресценция молекул CaOH, SrOH, CaCl, SrCl и атомов Na. Дана интерпретация спектра CaOH, наблюдавшиеся в пламенах полосы отнесены к различным переходам систем $B^2\Sigma - X^2\Sigma$ и $A\Pi - X^2\Sigma$. Приведена диаграмма энергетич. уровней. Данные для SrOH находятся в хорошем согласии с результатами проведенных ранее экспериментов.

В. В. Белякова

CaOH
SrOH

enumuck 6843

1948

89: 155074p Laser-excited molecular fluorescence of calcium hydroxide (CaOH) in an air-acetylene flame. Weeks, S. J.; Haraguchi, H.; Winefordner, J. D. (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, Fla.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1978, 19(6), 633-40 (Eng). Pulsed laser-excited mol. fluorescence of CaOH and SrOH in an air-acetylene flame were studied. The spectra were examd. in the wavelength region from ≈ 500 to 700 nm. A preliminary energy level diagram is proposed for CaOH. Results are also given for SrOH.

уловил
презент

(+1) IX



C.A. 1948, 89, N18

CaOH

Оттиски 6843

1978

(секстр)

(2 Б1265.) Возбуждаемая лазером молекулярная флуоресценция CaOH в воздушно-ацетиленовом пламени. Weeks S. J., Nagaguchi H., Winefordner J. D. Laser-excited molecular fluorescence of CaOH in an air-acetylene flame. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 19, № 6, 633—640 (англ.)

Исследованы спектры молек. флуоресценции (Фл) и спектры возбуждения Фл CaOH и SrOH в воздушно-ацетиленовом пламени. Спектры Фл изучали в диапазоне от 480 до 680 нм. Источником возбуждения служил импульсный перестраиваемый лазер на красителе, накачиваемый импульсным лазером на N₂. Приведены предв. данные о диаграмме энергетич. уровней системы переходов $B^2\Sigma - X^2\Sigma$ и дублетной системы $A^2\Pi - X^2\Sigma$ молекулы CaOH.

В. Е. Скурат

Х. 1979 IV а

Ca-OH

1981

8 Б784. Термодинамические свойства молекул моногидроокисей щелочноземельных элементов в газовой фазе. Murad Edmond Thermochemical properties of the gaseous alkaline earth monohydroxides. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 8, 4080—4085 (англ.)

В т-рном интервале 1660—2000 К с помощью масс-спектрометра, оборудованного Мо эффузионной ячейкой, в к-рую осуществлялся напуск H_2 , исследованы след. газофазные равновесия: $Ca + H_2O = CaOH + H$ (1), $Ca + H_2O = CaO + H_2$ (2), $Sr + H_2O = SrOH + H$ (3), $Sr + H_2O = SrO + H_2$ (4) и $BaOH + H = BaO + H_2$ (5). По 3-му и 2-му (величина в скобках, ккал/моль) законам вычислены ΔH_0^0 этих р-ций: $25,9 \pm 3$ ($27,9 \pm 9,5$), $21,9 \pm 5$, $26,2 \pm 3$ ($16,2 \pm 9,6$), $20,6 \pm 3$ ($18 \pm 17,9$) и $-26,3 \pm 3$ ($-26,5 \pm 2,7$) для (1)—(5), соотв. Полученные результаты позволили рассчитать $D_0^0(Ca-OH) = 92 \pm 4$, $D_0^0(Sr-OH) = 91,8 \pm 4$, $D_0^0(Ba-OH) = 107 \pm 4$ ккал/моль. Из крит. анализа лит. данных и собст-

Do;

⊠
(+2)

X. 1982, 19, № 8

венных измерений рекомендована величина $D_0^0(\text{SrO}) = 98 \pm 3$. Измерены Пт ионизации $(IP) \text{ MgOH } (7,5 \pm 0,3 \text{ эВ})$, $\text{CaO } (7,6 \pm 0,5)$, $\text{CaOH } (5,55 \pm 0,2)$, $\text{SrO } (7,0 \pm 0,2)$, $\text{SrOH } (5,1 \pm 0,2)$, $\text{BaO } (6,8 \pm 0,2)$ и $\text{BaOH } (4,35 \pm 0,2)$. Обсужден характер хим. связи в молекулах MO и MOH ($M = \text{Mg, Ca, Sr, Ba}$). Приведена сводная таблица величин $D_0^0(\text{MO})$, $D_0^0(\text{M-OH})$, $D_0^0(\text{MO-H})$, ΔH_0^0 (обр. MOH, газ.), $IP(\text{MO})$, $IP(\text{MOH})$, $D_0^0(\text{M}^+-\text{O})$, $D_0^0(\text{MO-H}^+)$, $D_0^0(\text{M}^+-\text{OH})$ и $D_0^0(\text{MO}^+-\text{H})$.

В. В. Чепик

$D_0(\text{MO}), I(\text{MO})$

$D_0(\text{M}^+-\text{O}), D_0(\text{MO-H}^+)$

($M = \text{Ca, Sr, Ba}$)

(+9u)



CaOH

1981

95: 176745x Thermochemical properties of the gaseous alkaline earth monohydroxides. Murad, Edmond (Air Force Geophys. Lab., Hanscom AFB, MA 01731 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(8), 4080-5 (Eng). The dissociation energies $D^{\circ}_0(\text{Ca-OH})$, $D^{\circ}_0(\text{Sr-OH})$, and $D^{\circ}_0(\text{Ba-OH})$ were measured by using high-temp. mass spectrometry. By passing $\text{H}_2(\text{g})$ over $\text{CaO}(\text{s})$, $\text{SrO}(\text{s})$, and $\text{BaO}(\text{s})$ in a Mo Knudsen cell, gas-phase equilibria involving $\text{CaO}(\text{g})$, $\text{CaOH}(\text{g})$, $\text{SrO}(\text{g})$, $\text{SrOH}(\text{g})$, $\text{BaO}(\text{g})$, and $\text{BaOH}(\text{g})$ were studied. These results yielded $D^{\circ}_0(\text{Ca-OH}) \approx D^{\circ}_0(\text{Sr-OH}) = 92 \pm 4$ kcal/mol and $D^{\circ}_0(\text{Ba-OH}) = 107 \pm 4$ kcal/mol. In addition, the appearance potentials were measured. Other important properties are derived from these measurements. Bonding in the alk. earth monoxides and monohydroxides is discussed briefly.

D_0 ; AP;

Y, SHF


(+2)

SrOH , BaOH

C.A. 1981, 95, N20.

CaOH
CaOD

От. 16170

1983

8 Д800. Лазерная спектроскопия переходов А—Х в CaOH и CaOD. Laser spectroscopy of the A—X transitions of CaOH and CaOD. Hilborn Robert C. Qingshi Zhu, Harris David O. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 73—91 (англ.)

Методом индуцированной лазером флуоресценции в области длин волн 625 и 600 нм исследована колебательная и вращательная структура переходов А→Х в молекулах CaOH и CaOD. Идентифицированы переходы с низколежащих колебательных уровней состояний А и Х и проведен детальный вращательный анализ полос (0,0,0)—(0,0,0). Структура спектров свидетельствует о том, что в основном и возбужденном состояниях молекула CaOH (CaOD) линейна. Определены молекулярные постоянные для состояний $A^2\Pi$ и $X^2\Sigma$. Проведен предварительный анализ эффекта Реннера—Теллера в полосах (0,1,0)—(0,1,0) и определен параметр Реннера ϵ для состояния $A^2\Pi$ ($\epsilon=0,073$). Библ. 39. А. В. Н.

М. П., коммент.
структура

Ф. 1983, 18, № 8

CaOH

От. 16170

1983

13 Б138. Лазерная спектроскопия перехода $A-X$ в $CaOH$ и $CaOD$. Laser spectroscopy of the $A-X$ transitions of $CaOH$ and $CaOD$. Hilborn Robert C., Qingshi Zhu, Harris David O. «J. Mol Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 73—91 (англ.)

С использованием перестраиваемых лазеров на красителях измерены спектры возбуждения и флуоресценции низкого и высокого разрешения молекул $CaOH$ и $CaOD$, образующихся в газовой фазе при р-ции атомов Ca с молекулами H_2O или D_2O в атмосфере Ar при низком давл. в проточной системе. В спектрах возбуждения низкого разрешения в области 626 и 600 нм наблюдаются секвенции кантов P -ветвей с $\Delta v_i = 0$ ($i=1, 2, 3$) и $\Delta v_i = +1$ перехода $A^2\Pi-X^2\Sigma$ соотв. Расщепление кантов объяснено спин-орбитальным взаимодействием в возбужденном состоянии $A^2\Pi$ ($A \sim 67$ см $^{-1}$). При возбуждении в области одного из кантов секвенции $\Delta v_i = 0$ в спектрах флуоресценции наблюдается колебательная структура. Проведен анализ наблюдаемой колебательной

и.п., колебтр,
структура

(4) ☒

Х. 1983, 19, N 13

структуры и рассчитаны постоянные $\omega_1 + 1/2x_{13}$, x_{11} , x_{12} и $2\omega_2 + 12x_{22} + x_{23}$ в основном состоянии CaOH и CaOD (см^{-1}): 622,6(10) и 613,6(10), $-3,1(10)$ и $-2,6(10)$, $-10,3(20)$ и $-5,3(10)$, 689,0(20) и 492,0(40) соотв., а также постоянные $\omega_1 + 1/2x_{13}$ и $2\omega_2 + 12x_{22} + x_{23}$ в состоянии $A^2\Pi$: 637,7(20) и 623,3(20), 702,0(40) и 497,0(40) соотв. С высоким разрешением измерены спектры возбуждения в области перехода $(000) \rightarrow (000)$ CaOH и CaOD . Анализ наблюдаемой вращательной структуры проведен в предположении линейной конфигурации молекул в состояниях $^2\Pi$ и $^2\Sigma$. Определены след. вращательные параметры для CaOH (см^{-1}): состояние $X^2\Sigma - B_0 = 0,334506(8)$, $D_0 = 4,39(5) \times 10^{-7}$, $\gamma_0 = 0,0013$, состояние $A^2\Pi - T = 15997,8715(3)$, $A = 66,1508(5)$, $B_0(1/2) = 0,339796(8)$, $B_0(3/2) = 0,342900(8)$, $D_0(1/2) = 3,91(5) \times 10^{-7}$, $D_0(3/2) = 4,68(5) \times 10^{-7}$, $p = -0,04371(3)$. Проведен предв: анализ вращательной структуры полосы $010 \rightarrow 010$ и оценен параметр взаимодействия Реннера—Теллера в возбужденном состоянии $A^2\Pi$, равный 0,073 (I). Вычислены параметры равновесной ядерной конфигурации CaOH (A): состояние $X^2\Sigma - r_e(\text{CaO}) = 1,976$, $r_e(\text{OH}) = 0,930$, состояние $A^2\Pi - r_e(\text{CaO}) = 1,956$, $r_e(\text{O—H}) = 0,923$. Полученные значения сравнены с данными для родств. молекул KOH , CaF , CaO и OH .

С. Б. Осин

CaOH
CaOD

[Om. 16170]

1983

(A²Π-X²Σ)

' 98: 62579c Laser spectroscopy of the A-X transitions of calcium hydroxide (CaOH and CaOD). Hilborn, Robert C.; Qingshi, Zhu; Harris, David O. (Quantum Inst., Univ. California, Santa Barbara, CA 93106 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(1), 73-91 (Eng). The A-X transitions of gas phase CaOH and CaOD, produced in a low-pressure flow system, were studied by low- and high-resoln. laser spectroscopy. The vibrational structure of the low-lying vibrational levels of both the A and X states were detd. A detailed rotational anal. of the (0, 0, 0)-(0, 0, 0) bands of the A-X system is presented. The spectra are well described by a ²Π-²Σ model, where the mol. is linear in both states. A preliminary anal. of the (0, 1, 0)-(0, 1, 0) bands indicates that the Renner parameter ε of the A²Π electronic state is 0.073(1).

C. A. 1983, 98, N8.

1983

 $D_0^0(\text{Ca}^+-\text{OH})$ $\text{CaOH}(g)$

99: 129150x Abstraction reactions of calcium(1+) and strontium(1+) ions. Murad, Edmond (Air Force Geophys. Lab., Hanscom AFB, MA 01731 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(11), 6611-13 (Eng). The endothermic reactions $\text{Ca}^+(\text{O}_2, \text{O}) \text{CaO}^+$, $\text{Ca}^+(\text{CO}_2, \text{CO}) \text{CaO}^+$, $\text{Ca}^+(\text{H}_2\text{O}, \text{H}) \text{CaOH}^+$, $\text{Sr}^+(\text{O}_2, \text{O}) \text{SrO}^+$, and $\text{Sr}^+(\text{H}_2\text{O}, \text{H}) \text{SrOH}^+$ were studied in a tandem mass spectrometer. The measured thresholds yield the dissocn. energies $D_0^0(\text{Ca}^+-\text{O}) = 3.30 \pm 0.1$, $D_0^0(\text{Ca}^+-\text{OH}) = 4.51 \pm 0.15$, $D_0^0(\text{Sr}^+-\text{O}) = 3.07 \pm 0.15$, and $D_0^0(\text{Sr}^+-\text{OH}) = 4.57 \pm 0.1$ eV. These values lead to the ionization potentials of 6.9, 7.0, 5.6, and 5.1 eV for CaO, SrO, CaOH, and SrOH, resp., when combined with auxiliary thermodyn. data. These ionization potentials agree with previous measurements, except for CaO. This discrepancy is briefly discussed.

(+3)  $D_0^0(\text{Sr}^+-\text{O})$ $\text{SrO}(g)$

2) $D_0^0(\text{Sr}^+-\text{OH})$, $\text{SrOH}(g)$
 Ha of.

C.A. 1983, 99, N 16

$$3) \frac{D_0^0(Ca^{+}-0)}{CaD(9)}$$

Сави

1983

14 Б1336. Хемилюминесцентные реакции щелочноземельных металлов с водой и гидразином. Chemiluminescent reactions of alkaline-earth metals with water and hydrazine. Wormsbecher Richard F., Trkula Mitchell, Martner Cecilia, Penn Robert E., Harris David O. «J. Mol Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 29—36 (англ.)

Изучены спектры хемилюминесценции, возникающей при газофазных р-циях щелочноземельных атомов М ($M = \text{Ca, Sr, Ba}$) с молекулами воды и гидразина при давл. 1—3 Торр и т-ре 500—700 К. Испускание в видимой области приписано молекулами MOH и MNH_2 . Детальная идентификация электронных переходов выполнена на основе сравнения с известными спектрами испускания изоэлектронных молекул MF. Это же сравнение позволило определить положение MNH_2 в спектрохим. ряду одновалентных соединений щел.-зем. элементов. Отмечено, что факт эндотермичности нек-рых

спектр

(75)

⊗

х. 1983, 19, № 14.

CaNH₂

SrOH, BaOH

SrNH₂, BaNH₂

р-ций из числа изученных, напр.: $\text{Sr} + \text{H}_2\text{O}$, эмиттер SrOH , свидетельствует скорее всего о сложной динамике элементарных актов и в частности о том, что хемилюминесценция не является результатом прямой р-ции между Sr и H_2O . А. А. Иогансен

CaOH

от. 19024 1984

16 Б1040. Об энергии диссоциации CaOH и LiOH.
On the dissociation energy of CaOH and LiOH. Bau-
schlicher Charles W., Partridge Harry.
«Chem. Phys. Lett.», 1984, 106, № 1—2, 65—68 (англ.)

Оценены энергии диссоциации D_e (MX) гидроксидов MOH ($M=Ca, Li$) с использованием выражения $D_e(MX) = E(M^+) + E(X^-) - E(MX, R_e) - \text{ПИ}(M) + \text{ЭС}(X)$, где R_e — равновесное расстояние M—O, ПИ и ЭС — потенциал ионизации и электронное сродство. Энергии $E(M^+)$, $E(X^-)$ и $E(MX, R_e)$ вычислены неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в большом базисе. Значения ПИ и ЭС взяты из эксперимента. Вычисл. значения

D_e (MX) равны $4,72 \pm 0,06$ и $4,13 \pm 0,07$ эВ, соотв. для $M=Li$ и Ca, эксперимент — $4,53 \pm 0,04$ и $4,23$ эВ. Сопоставлены D_e гидроксидов и оксидов и дано объяснение причин того, что $D_e(M-OH)$ больше, чем $D_e(M=O)$. — Э. Герман

(H) ☒



LiOH

X. 1984, 19, 16.

CaOH

DM. 19024 1984

9 Д71. Об энергии диссоциации CaOH и LiOH.
On the dissociation energy of CaOH and LiOH. Ba-
schlicher Charles W. Jr., Patridge Harry.
«Chem. Phys. Lett.», 1984, 106, № 1—2, 65—68 (англ.)

Энергии диссоциации (ЭД) молекул MOH, M=Ca, Li, на M и OH в основных состояниях найдены исходя из значений потенциалов ионизации атомов M, сродства OH к электрону и ЭД MOH на M^+ и OH^- . Последняя была рассчитана неэмпирич. методом ССП, применимость которого в данном случае обусловлена примерным равенством корреляционной энергии молекулы с ионным типом связи и ее ионных фрагментов. Для достижения необходимой точности в расчетах применены обширные базисы, включающие большое число поляризационных d - и f -ф-ций, и внесены поправки на эффект суперпозиции базисов фрагментов. После учета энергии нулевых колебаний на основании экспериментальных силовых постоянных оценки ЭД D_0 CaOH

расчет D_0 ;

(4) 18

ср. 1984, 18, № 9

и LiOH на нейтральные фрагменты составили $4,13 \pm \pm 0,07$ эВ и $4,72 \pm 0,06$ эВ соответственно. Согласно с экспериментом удовлетворительное; имеющиеся различия приписываются эксперим. погрешностям.

А. В. Зайцевский



CaOH

1984

8 Б4023. Определение радиационных параметров и энергий диссоциации молекул на основании спектрофотометрического изучения равновесия релаксаций в пламенах. Переход $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ CaOH. Беляев В. М., Лебедева Н. Л., Краснов К. С., Гурвич Л. В. «Теплофиз. высок. температур», 1984, 22, № 5, 1008—1011

Для исследования равновесия р-ции $\text{Ca}(\text{г}) + \text{H}_2\text{O}(\text{г}) \rightleftharpoons \text{CaOH}(\text{г}) + \text{H}$ измерялись интенсивности резонансной линии ($\lambda = 422,7$ нм, сила осциллятора $1,75 \pm 0,18$ ат. ед.) и полос при $\lambda = 554$ нм, соотв-щих переходу $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ CaOH. С помощью соотношений, выведенных ранее (см. РЖХим, 1982, 24Б184) рассчитаны энергия связи Ca—OH (395 ± 10 кДж/моль), коэф. Эйнштейна ($3,7 \cdot 10^{-7} \text{ с}^{-1}$), электронный момент (1,8 ат. ед.), сила осциллятора в поглощении для перехода $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ (6,2 ат. ед.). Отмечена близость энергий диссоциации CaOH и SrOH и сходство наборов радиац. постоянных

Do,

(H) X

X. 1985, 19, N 8.

SrOH

для гидроксидов и галогенидов Са и Sr. Последнее объясняется тем, что спектры СаОН, SrОН, как и спектры галогенидов, обусловлены переходами несвязывающего электрона, локализованного на атоме металла.

Г. М. Назин



CaOH

1984

[102: 35795q Determination of radiation parameters and dissociation energies of molecules on the basis of a spectrophotometric study of reaction equilibria in flames. The $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ transition of calcium hydroxide. Belyaev, V. N.; Lebedeva, N. L.; Krasnov, K. S.; Gurvich, L. V. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1984, 22(5), 1008-11 (Russ). The radiation parameters (oscillator strength, Einstein coeff., electronic moment, and transition strength) of the $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ transition of CaOH mol. were detd. from the flame reaction equil. $Ca(g) + H_2O(g) \rightleftharpoons CaOH(g) + H$ using the recently described (B. et al., 1982) method. The reaction equil. was investigated by measuring the luminescence intensities of Ca and CaOH lines at 422.7 and ~554 nm, resp. The dissociation energy of CaOH ($D_0 = 395 \pm 10$ kJ mol⁻¹) was also detd.

Do, meanst.
potomestru

C. A. 1985, 102, N 4

CaOH

1984

100: 182573c Dye laser spectroscopy of the $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ transition of calcium monohydroxide (CaOH). Bernath, P. F.; Kinsey-Nielsen,

S. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 105(6), 663-6 (Eng). The $B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$ transition of CaOH was examd. by the technique of dye laser excitation spectroscopy. The rotational structure of the 000-000 and 100-100 bands was detd.

$B^2\Sigma^+-X^2\Sigma^+$

C.A. 1984, 100, N 22

CaOH

1984

9 Л187. Лазерная спектроскопия $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ перехода в CaOH. Dye laser spectroscopy of the $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ transition of CaOH. Bernath P. F., Kinsey-Nielsen S. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 6, 663—666 (англ.)

С использованием лазера на родаминовых красителях получены спектры флуоресценции в области $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ перехода молекулы CaOH, образующейся в реакции металлич. кальция с водой в парообразной фазе. Проведена расшифровка полос 000—000 и 100—100 и рассчитаны спектроскопич. константы этих переходов. Библ. 22.
Е. П. Смирнов

М. П.

ср. 1984, 18, № 9

CaOH

1984

Святким И. А., Кузнецова Л. А.

спектр,
вероятности
переходов.

Ред. ис. Всес. МТУ. М.-
Ленин. М., 1984. 11 с., Биб-
лиогр. 19 назв. (Рукопись
деп. в ВНИИТИ 23 февр.,
1984, N 1042-84 деп.)

(см. ● CaO; III)

CaOH

1985

Brazier C.R., Bernath
P.F., et al.

волеетр.,
сирукт.,
Vi;

J. Chem. Phys., 1985,
82, N2, 1043-1045.

●
(сир. CrOH; III)

CaOH

1985

11 Л195. Спектроскопия CaOH. Spectroscopy of CaOH. Bernath P. F., Brazier C. R. «Astrophys. J.», 1985, 288, № 1, Pt 1, 373—376 (англ.)

Выполнены спектроскопич. измерения линий CaOH с помощью лазера на красителях в области $\sim 16\,000\text{ см}^{-1}$ с разрешением $\sim 0,001\text{ см}^{-1}$. В результате измерений определены точные значения спектроскопич. констант для состояний $B^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$ и $X^2\Sigma^+$. Определены частоты чисто вращательного спектра CaOH в основном состоянии.

А. Г. К.

и, ил. П;

ср. 1985, 18, и 11

CaOH Langhoff S. R., 1985
Bauschlicher Ch. W., et al.
Comp. Ab Initio Quant.
Chem. Exp. Small Mol. State
u. n. Art. Proc. Symp., Philadelphia,
Pa, 27-29 Aug., 1984. Wor-
drecht e. a., 1985, 357-407.

(cur. LiF; III)

CaOH

1985

5 Л494. Спектроскопия переходов $A-X(100)-(000)$ радикалов CaOH и измерение их вращательной температуры методом возбуждаемой лазером флуоресценции. Laser excitation fluorescence spectroscopy of $A-X(100)-(000)$ transitions of CaOH radicals and measurement of their rotational temperature. Zhu Qingshi, Li Minggang, Zhang Yi, Wang Chonye. «Гуансюэ сюэбао, Acta opt. sin.», 1985, 5, № 8, 756—768 (кит.; рез. англ.)

(м.п.)

С помощью лазера с перестраиваемой длиной волны получены спектры возбуждения флуоресценции $A(100-X(000))$ радикала CaOH в области 600 нм в газовой фазе. Проведено отнесение вращательной структуры и вычислены молекулярные постоянные CaOH в возбужденном состоянии $A^2\Pi_{1/2}$. Измерена вращательная т-ра радикала CaOH, равная $308 \pm 5^\circ \text{ K}$. Е. Н. Т.

с/з 1986, 18, N5

CaOH

1985

лазерный
спектроскоп.

м.п., $A^2\Pi_{1/2}$ c.c.m.

C. A. 1986, 104, N 14.

/ 104: 119068j Laser excitation fluorescence spectroscopy of A-X(100)-(000) transitions of calcium hydroxide (CaOH) radicals and measurement of their rotational temperature. Zhu, Qinghui; Li, Minggang; Zhang, Yi; Wang, Chanye (Dalian Inst. Chem. Phys., Acad. Sin., Dalian, Peop. Rep. China). *Guangxue Xuebao* 1985, 5(8), 765-8 (Ch). The laser excitation fluorescence spectra of CaOH A-X(100)-(000) transitions were investigated. The assignments were made, and the mol. consts. of the $A^2\Pi_{1/2}(100)$ state were derived by least-squares fitting to be $B' = 0.337097(10)$, $D' = 0.377(5) \times 10^{-6}$, and $P = -0.04039(2) \text{ cm}^{-1}$. The rotational temp. of CaOH was also derived from the relative intensities of the rotational lines to be $T_R = 308 \text{ K}$.

CaOH

1985

103: 131599v Laser-induced fluorescence spectroscopy approach of analyzing and identifying overlapping and perturbing bands - the study of $A^2\Pi-X^2\Sigma$ perturbing overtones of calcium hydroxide (CaOH) radical. Zhu, Qingshi; Li, Mingguang; Wang, Chongye; Zhang, Yi; Gong, Jialin; Liu, Julin (Qinghai Inst. Salt Lake, Acad. Sinica, Xining, Peop. Rep. China). *Kexue Tongbao (Foreign Lang. Ed.)* 1985, 30(3), 346-50 (Eng). The transitions of CaOH $A^2\Pi-X^2\Sigma$ $\Delta V_1 = 1$ and $\Delta V_2 = 2$, which appear in the 16,530-16,730 cm^{-1} region and are perturbed by Fermi resonances, were investigated by using 4 different ways of laser-induced fluorescence (LIF) spectroscopy. Preliminary assignments are made. The combined use of the 4 LIF spectroscopic methods greatly aided in analyzing the complicated overlapping and perturbing bands. One of them, the frequency-difference method, is a promising exptl. way for identifying the perturbed energy levels. CaOH is an important free radical in reaction chem., and is isoelectronic with CaF. While the spectroscopy of CaF has been extensively studied, due to the difficulties in the prepn. of CaOH and the limitation of current spectroscopic techniques, the high-resoln. spectroscopy of the $A^2\Pi-X^2\Sigma$ $\Delta V_1 = 0$ bands was investigated only recently, using the LIF spectroscopy technique. A low temp., low pressure flow system of metal vapor entrained in inert gas was used.

($A^2\Pi-X^2\Pi$)
Li. A.

лазерно-
оптический

C. A. 1985, 103, N 16.

CaOH

[OM-23792]

1986

(Do) Bauschlicher Ch. W., Jr.,
Langhoff S. R.,

meopem.
pachem.

J. Chem. Phys. 1986,
84, N2, 901-909.

(see Zick, II)

СадН

(Ом. 37881)

1986

Белеев В.Н.,

Автореферат диссертации
на соискание ученой степе-
ни к. филол.-мат. наук,
Москва, 1986

Δ H+,
Do,
Lo

CaOH

1986

Belyaev V. N., Lebedeva
N. Y., et al.

(7) Issled. Strukturny i Energ.
Molekul Ivanovo 1986,

Ref. Zh. Khim. 141-54
m. 1986, Abstr.
No 24B1184. (cu, CaCl; iii)

СаОН(2) Ямцев В.Н., Лебеде- 1986
ва Н.Л. и др.,

у;
Исследование структуры и
энергетики молекулы.
Межвузовский сборник науч-
ных трудов Ивановского ха-
нско-технологического института,
Иваново, ● 1986,
141-154 (есть в картотеке)

САН
СаОН⁺

Белдев В. Н., 1986

Автореферат диссертации
на соискание ученой сте-
пени к. ф. - и. Наук, Москва,
1986.

Оценка
м. л.,
до, т,
f m n

Определение радиационных
и энергетич. характеристик
молекул оксидов и гидрокси-
дов щелочноземельных ме-
таллов ● методом спек-
трофотометрии плёнкой.

CaOH

1986

лазерно-
спектр
высокого
разреш.

105: 180779d Laser and Fourier transform spectroscopy: diatomics to organometallics. Bernath, P. F. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *AIP Conf. Proc.* 1986, 146(Adv. Laser Sci. - 1), 443-6 (Eng). The high-resoln. visible spectra of CaOH, SrOH and BaOH were analyzed by laser excitation spectroscopy. A large no. of new organometallic free radicals were discovered when Ca, Sr, and Ba vapors react with a wide variety of org. mols. including aldehydes, ketones, alcs., cyanates, cyanides, thioethers, thiols and carboxylic acids. Laser-induced fluorescence provided electronic and vibrational information for these novel species. The Kitt Peak Fourier transform spectrometer was used to detect the vibration-rotation spectra of CuH and NeH⁺, the electronic spectra of MgH and NH and the laser-induced fluorescence spectra of SrOH and C₂N.

SrOH, BaOH, CuH,
NeH⁺, MgH, NH, C₂N
①7

с. А. 1986, 105, N20

CaOH

1986

24 Б1184. Потенциалы ионизации CaOH и CaCl.
Беляев В. Н., Лебедева Н. Л., Краснов К. С., Гур-
вич Л. В. «Исслед. структуры и энерг. молекул». Ива-
ново, 1986, 141—154

По пороговой энергии р-ций $\text{Ca}^+ + \text{H}_2\text{O}(\text{r}) \rightleftharpoons \text{CaOH}^+ +$
 $+ \text{H}$ и $\text{Ca}^+ + \text{HCl}(\text{r}) \rightleftharpoons \text{CaCl}^+ + \text{H}$ определены адиабатич.
Пт ионизации CaOH и CaCl. Из резюме

(9)

(7) X

X. 1986, 19, N 24

CaOH

(Dm. 24069)

1986

Brazier C.R., Ellingboe L.C.,
Kinsey-Nielsen S.,
Bernath P.F.,

(vi)

J. Amer. Chem. Soc.,
1986,  108, N9, 2126-2132.

CaOH

1986

21 Б1276. Ответ на «Замечания по поводу изучения с помощью спектров комбинационного рассеяния термического превращения гидроксида кальция». Answer to «Comment on the Raman Study of the Thermal Transformation of Calcium Hydroxide». Chaix-Pluchery O., Niepce J. C. «J. Solid State Chem.», 1986, 63, № 2, 346—347. (англ.)

X. 1986, 19, N 21

CaOH

[Om. 28643]

1987

Farber M., Srivastava R.N.
et al.,

Do J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 1, 83,
N 11, 3229 - 3236.

CaHO
(CaOH)

Dom. 30490

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, N2, 288.

СаОМ

30353

1988

Краснов К.С.,
Рыжикова Н.В.

и.п.

ОМЦИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. №378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

CaOH

Um 35341

1990

113: 198475b The permanent electric dipole moment of calcium hydroxide (CaOH). Bauschlicher, Charles W., Jr.; Langhoff, Stephen R.; Steimle, Timothy C.; Shirley, Jeffrey E. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(6), 4179-86 (Eng). Theor. calcns. yield elec. dipole moments (μ) of 0.98, 0.49, and 0.11 D at the computed equil. geometries of the $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi$, and $B^2\Sigma^+$ states of CaOH. Thus the pure rotational spectra in these electronic states are expected to be weaker than the corresponding alk. monohalides. This is consistent with our failure to observe the pure rotational spectrum of the $X^2\Sigma^+$ state by microwave-optical double resonance spectroscopy, and is in agreement with our exptl. detn. of $\mu < 1$ D for the $A^2\Pi_{3/2}$ state. However, the vibrational-rotational spectrum is quite strong, since $d\mu/dr$ is quite large in these ionic mols. Using the free-ion polarizabilities, the modified Rittner model predicts a μ value of about -8 D for the $X^2\Sigma^+$ state, which is in error by about 9 D. The theor. values for total dipole moment, as well as contributions from Ca^+ and OH^- , can be reproduced using effective polarizabilities. However, this anal. shows that the effective polarizability of OH^- is a much smaller fraction of the free-ion value than for Ca^+ , because Pauli repulsion restricts the OH^- polarization toward the Ca^+ . Some account of this effect seems to be a prerequisite for the successful application of either Rittner or ligand field models to ionic systems.

спукама,

14,

рацем

C.A. 1990, 113,
N22

САН (от 33798) 1990

Белзев В. Н., Тюткис У. С.
и др.,

Ж. прир. науки, 1990,
64, № 6, 1441-1459.

Потемкина ● сомизагели

соединения MX (M -Ca, Sr, Ba, X-F,
Cl, Br, I, OH, O).

CaOH

(OM 34726)

1990

Ortiz J.V.,

J. Chem. Phys. 1990, 92,
N 11, 6728-6731.

Ground and excited states
of CaCH_3 , CaNH_2 , CaOH and
 CaF through electron propa-

gator calculations.

CaOH

Mestdagh J. M.,
Visticot J. P.,

1991

Энергии
низколежащ.
состояний,
расчет.

Chem. Phys. 1991,
155(1), 79-89.

($A^2\Pi$, $A'^2\Delta$, $B^2\Sigma$)

(см. ● MgOH; III)

CaOH
CaOD

1992

117: 200962 Investigation of excited vibrational levels in the $X^2\Sigma^+$ state of calcium hydroxide and calcium hydroxide-d (CaOH and CaOD) by resolved fluorescence spectroscopy. Coxon, John A.; Li, Mingguang; Presunka, Paul I. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *Mol. Phys.* 1992, 76(6), 1463-75 (Eng). Excited vibrational levels in the $X^2\Sigma^+$ state of CaOH and CaOD were obsd. via dispersion of laser induced fluorescence from selectively populated rotational levels of the A-11 (100) state. The rotational structure of the (100), (200), (300) and (020) levels was analyzed for both mols.; for CaOH, the (400) was also obsd. The $X^2\Sigma^+$ (020) level is split into 2Δ ($l = 2$ and $l = 0$) components with spacings of 24.369 and 17.183 cm^{-1} for CaOH and CaOD, resp. Vibrational term values and rotational constants detd. for all the obsd. levels, and are based on an accuracy of less than 0.05 cm^{-1} for the measured line positions of the fluorescence.

физ. химия
вост. $X^2\Sigma$
спектр пн
опт.

C.A. 1992, 117, N 20

CaOH
CaOD

1992

13 Б1117. Лазерная спектроскопия высокого разреше-

ния перехода $\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$ CaOH и CaOD. Электронно-колебательное взаимодействие и эффект Реннера-Теллера. High resolution laser spectroscopy of the $\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$ transition of CaOH and CaOD: vibronic coupling and the Renner-Teller effect /Jarman C. N., Bernath P. F. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992 .—Columbus (Ohio), 1992 .—С. 99 .—Англ.

$\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$

В голубой области спектра молекул CaOH и CaOD наблюдался (за счет электронно-колебат. вз-вия через деформ. колебание) запрещенный электронный переход $\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$ (полосы (010)—(000) в спектре CaOH; (010)—(000), (020)—(010), (010)—(010), (000)—(010), (010)—(02⁰0) в спектре CaOD). Спектры измерены с высоким разрешением. Проанализирована вращат. структура полос. Для молекулы CaOD в состоянии $\bar{C}^2\Delta(000)$ определена величи-

(4)

Х. 1993, N 13

на $T_0 = 21907,128 \text{ см}^{-1}$, получено значение вращат. постоянной $B = 0,293536 \text{ см}^{-1}$ и постоянной спин-орбитального расщепления $A = 11,4944 \text{ см}^{-1}$. Из анализа состояний $\tilde{C}^2\Delta(020) \mu\Sigma$ и $\tilde{C}^2\Delta(020) k\Sigma$ впервые экспериментально определен параметр Реннера-Теллера, $\hat{g}_4 = 0,03862 \text{ см}^{-1}$.

В. М. Ковба

CaOH
CaOD

1992

№ 10 Б1255. Лазерная спектроскопия высокого разрешения перехода $\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$ CaOH и CaOD: электронно-колебательное взаимодействие и эффект Реннера—Теллера. High resolution laser spectroscopy of the $\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$ transition of CaOH and CaOD: Vibronic coupling and the Renner—Teller effect /Jarman C. N., Bernath P. F. //J. Chem. Phys. .—1992 .—97, № 3 .—С. 1711—1718 .—Англ.

На лазерном спектрометре с использованием лазерного возбуждения в области частот $21\,500 - 22\,750\text{ см}^{-1}$ измерена колебательно-вращательная структура запрещенного электронного перехода $\bar{C}^2\Delta - \bar{X}^2\Sigma^+$ молекул CaOH и CaOD. Снятие запрета перехода достигается за счет электронно-колебательного взаимодействия с изгибной модой. Наряду со спектроскопич. параметрами впервые определен параметр эффекта Реннера—Теллера для $^2\Delta$ -состояния. Библ. 47. С. Н. Мурзин.

д.л.

X.1995, N10

CaOH

CaOD

Exbury

1992

117: 120707s High-resolution laser spectroscopy of the $\tilde{C}^2\Delta-\tilde{X}^2\Sigma^+$ transition of calcium hydroxide and calcium hydroxide-d (CaOH and CaOD): vibronic coupling and the Renner-Teller effect. Jarman, C. N.; Bernath, P. F. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(3), 1711-18 (Eng). The $\tilde{C}^2\Delta-\tilde{X}^2\Sigma^+$ transition of CaOH and CaOD was obsd. in the blue region of the spectrum. This electronically forbidden transition becomes allowed through vibronic coupling with the bending mode. The (010)-(000) band for CaOH and the (010)-(000), (020)-(010), (010)-(010), (000)-(010), and (010)-(020) bands for CaOD were recorded and analyzed at high resolu. The $\tilde{C}^2\Delta(000)$ state of CaOD has a band origin at $21,907.128(1) \text{ cm}^{-1}$, a rotational const. B of $0.293\,536(7) \text{ cm}^{-1}$, and a spin-orbit const. A of $11.4944(5) \text{ cm}^{-1}$. A rotational anal. of the $\tilde{C}^2\Delta(020)\mu\Sigma$ and the $\tilde{C}^2\Delta(020)\kappa\Sigma$ states of CaOD also led to the first exptl. detn. of the Renner-Teller parameter g_4 for a $^2\Delta$ state at $g_4 = -0.038\,62(9) \text{ cm}^{-1}$.

CaOH. CaOD,

M. N.

C. A. 1992, 117, N 12

CaOH

11 Б1175. Лазерная спектроскопия CaOH в области перехода $A^2\Pi(020) \rightarrow X^2\Sigma^+(000)$ и анализ возмущений, связанных с резонансом Ферми между уровнями $A^2\Pi(020)$ и (100) . Laser spectroscopy of the CaOH $A^2\Pi(020) \rightarrow X^2\Sigma^+(000)$ band and deperturbation of the $A^2\Pi(020) \sim (100)$ Fermi resonance /Li Mingguang, Coxon J. A. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992.—Columbus (Ohio), 1992.—С. 119.—Англ.

1992

М.П.

Методом спектроскопии лазерного возбуждения (перестраиваемый лазер на красителе непрерывного действия) измерена и проанализирована вращат. структура полосы $(020) \rightarrow (000)$ перехода $A^2\Pi \rightarrow X^2\Sigma^+$ молекулы CaOH. Анализ полученных данных выполнен совместно с результатами аналогичного рода измерений полосы $(100) \rightarrow (000)$ того же перехода с целью анализа возмущений, связанных с резонансом Ферми между вибронными состояниями $A(100) ^2\Pi$, $A(020) k^2\Pi$ и $\mu^2\Pi$. При этом учитывали также спин-орбитальное вз-вие и вз-вие Реннера—Теллера. В результате получено согласие между эксперим. и рассчитанными положениями линий в спектре с точностью $0,005 \text{ см}^{-1}$.

В. М. Ковба

Х. 1993, N 11

CaOH

1992

118: 89877s Laser spectroscopy of the calcium hydroxide (CaOH) $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ (020)-(000) band: deperturbation of the Fermi resonance, Renner-Teller, and spin-orbit interactions. Mingguang; Coxon, John A. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(12), 8961-7 (Eng). The $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ (020)-(000) band of CaOH has been obsd. using continuous-wave (CW) dye laser excitation, and rotationally analyzed. The measured line positions, in combination with data obtained in the lab. for the $A^2\Pi-X^2\Sigma^+$ (100)-(000) band, have been employed in a global deperturbation of the $A(100)^2\Pi$ and $A(020)^2\Pi$ and $\mu^2\Pi$ vibronic states that simultaneously takes account of Fermi resonance, the Renner-Teller effect, and spin-orbit coupling. All the measured line positions are reproduced to within the measurement accuracy of 0.005 cm^{-1} . The Renner-Teller and Fermi resonance parameters in the CaOH $A^2\Pi$ state have been detd.: $\epsilon\omega_2 = -36.569\text{ 19(97) cm}^{-1}$ and $W_1 = 10.300\text{ 58(54) cm}^{-1}$.

($A^2\Pi-X^2\Sigma^+$)

C.A. 1993, 118, N10

CaOH

1992

12 Б1132. Оптическая спектроскопия CaOH и SrOH в молекулярном пучке. Molecular beam optical spectroscopy of CaOH and SrOH /Steimle T. C., Jung K. Y., Fletcher D. A., Scurlock C. T. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992 .—Columbus (Ohio), 1992 .—С. 119 .—Англ.

Методом оптич. штарковской спектроскопии в сверхзвуковых молек. пучках определены электрич. дипольные моменты (μ) молекул CaOH и SrOH в электронных состояниях $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi_{3/2}$, $A^2\Pi_{1/2}$, $B^2\Sigma^+$. Значения μ для указанных состояний равны, соотв. (в Д): CaOH 1,465; 0,766; 0,836; 0,744; SrOH 1,900; 0,424; 0,590; 0,396. Результаты сопоставлены с данными теор. расчетов. В. М. Ковба

М.П.

⑦

Х. 1993, N 12

CaOH

↑ Om. 36547 ↑

1992

116: 183660w The millimeter-wave spectrum of the calcium hydroxide (CaOH) radical ($X^2\Sigma^+$). Ziurys, L. M.; Barclay, W. L., Jr.; Anderson, M. A. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *Astrophys. J.* 1992, 384(2, Pt. 2), L63-L66 (Eng). The pure rotational spectrum of the calcium hydroxide radical (CaOH) in its $X^2\Sigma^+$ ($v = 0$) ground state was obsd. in the lab. using millimeter/submillimeter direct absorption spectroscopy. CaOH was generated by the reaction of hydrogen peroxide with calcium vapor, produced in a Broida-type oven. Eleven rotational transitions of the species were measured in the range 80-320 GHz to an accuracy of ± 50 kHz. The spin-rotation splitting was readily obsd. in these data. The magnetic hyperfine structure due to the proton spin, however, was sufficiently small that it could not be resolved. The rotational and spin-rotation consts. of CaOH were detd. from a nonlinear least-squares fit to the data, using a $^2\Sigma$ Hamiltonian. These lab. measurements will now allow for an in-depth radio astronomical search for CaOH in interstellar clouds and circumstellar envelopes of late-type stars.

MM CARM

$X^2\Sigma^+$, $v=0$

C.A. 1992, 116, N 18

LabK
LabD Li M., Coxon J.A., 1994

Can. J. Phys., 1994,
72, N 11-12, p. 1200-

M.N. 1205

Секторские резонансные
полости $\lambda/2$ ● $\pi - \chi^2 \Sigma^+ (000) -$

P.A.L. N 20, 1995, 20 B 1253

(000) ражана Сава .

CaOH

1994

121: 45394q A millimeter/submillimeter spectrometer for high resolution studies of transient molecules. Ziurys, L. M.; Barclay, W. L., Jr.; Anderson, M. A.; Fletcher, D. A.; Lamb, J. W. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *Rev. Sci. Instrum.* 1994, 65(5), 1517-22 (Eng). A design is presented for a millimeter/submillimeter direct absorption spectrometer for studies of the pure rotational spectra of metal-bearing free radicals. The spectrometer operates in the frequency range of 65-550 GHz with an instrumental resolu. of 200-1000 kHz and an absorption sensitivity of a few ppm. The instrument utilizes phase-locked Gunn oscillators as the tunable, coherent source of radiation from 65-140 GHz. Higher source frequencies are obtained with Schottky diode multipliers. The gas cell and optics path are designed utilizing Gaussian beam optics to achieve max. interaction between mols. and the mm-wave radiation in the reaction region. Scalar feedhorns and a series of PTFE lenses are used to propagate the source signal. The gas cell is a cylindrical tube 0.5 m in length with a detachable Broida-type oven. The detector for the spectrometer is a helium-cooled InSb hot electron bolometer. Phase-sensitive detection is achieved by FM modulation of the Gunn oscillators and use of a lock-in amplifier. Spectra are recorded by elec. tuning of the Gunn oscillator, which is done under computer control. The millimeter and sub-mm rotational spectra of several free radicals have been obsd. for the first time using this instrument, including CaOH, MgOH, CaH, MgF, and BaOH.

sem. u. cys-
sem. Gaussi
cresmp

(44)

C.A. 1994, 121,
N4

CalH

(Dm. 38030)

1995

Fletcher D. A.,

Andersen M. A., et al.,

J. Chem. Phys., 1995,

102(11), 4334 - 4339.

transam.
chemp

CaOH

[Om. 38 266]

1995

H₂O

Jing Kong and Russell J. Boyd,

группа
в США,
группа
в Германии

J. Chem. Phys., 1995, 103, N23,

10070 - 10073

CaOH has a second linear
structure • H₂O.

CaOH
HCaO

1995

→ 19 Б113. CaOH имеет вторую линейную структуру HCaO. CaOH has a second linear structure HCaO / Kong Jing, Boyd Russell J. // J. Chem. Phys. — 1995. — 103, № 23. — С. 10070—10073. — Англ.

Ограниченным методом ХФ для открытой оболочки и в приближении КВ с учетом одно- и двукратных возбуждений (КВОД) исследована поверхность потенциальной энергии CaOH и определена вторая изомерная линейная форма HCaO с электронным состоянием $^2\Sigma^+$. На уровне КВОД длины связей H—Ca и Ca—O HCaO получены равными 2,021 и 2,002 Å соотв. Рассчитаны также гармонические колебательные частоты CaOH и проведено сопоставление с экспериментальными значениями. Н. С. Библ. 32.

М.А.

Х. 1996, N 19

CaOH
CaOD

1995

122: 172774j High-resolution analysis of the fundamental bending vibrations in the $A^2\Pi$ and $X^2\Sigma^+$ states of CaOH and CaOD: deperturbation of Renner-Teller, spin-orbit and K-type resonance interactions. Li, Mingguang; Coxon, John A. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(7), 2663-74 (Eng). The $\nu_2 = 1$ bending vibrational levels of the $A^2\Pi$ and $X^2\Sigma^+$ states of both CaOH and CaOD were

rotationally analyzed via laser excitation of the $\bar{A}(010) \kappa^2\Sigma, ^2\Delta, \mu^2\Sigma \leftarrow X(010)^2\Pi, (000)^2\Sigma^+$ bands. The estd. measurement accuracy for rotational transitions is 0.0035 cm^{-1} . K-type resonances and level crossings were identified between the $A(010) ^2\Sigma$ and $^2\Delta$ vibronic components, and account for the observation of dramatic intensity anomalies from quantum mech. interference. An effective Hamiltonian was constructed to model the Renner-Teller, spin orbit, and K type resonance interactions in the $A(010)$ vibronic manifold, and to fit all the obsd. bands simultaneously for each isotopomer. The fundamental bending frequencies and Renner-Teller parameters were detd.: $\nu_2(X)$

гефрмация
конфигурация
в

$X^2\Sigma$ и $A^2\Pi$ состоят

C. A. 1995, 122, N 14

= 352.9259(9), $\nu_2(A) = 361.3604(8)$ and $\epsilon\omega_2 = -36.2634(6)$ cm⁻¹ for CaOH: $\nu_2(X) = 266.8398(10)$, $\nu_2(A) = 273.3265(5)$, and $\epsilon\omega_2 = -26.9601(8)$ cm⁻¹ for CaOD. The isotope relations between the fitted mol. consts. of CaOH and CaOD were examd. The spin-rotation const. γ and the centrifugal distortion const. A_D of the spin-orbit coupling were sepd. in the $A^2\Pi(010)$ level owing to the Renner-Teller effect. The equil. bond lengths and force consts. in the $\tilde{X}^2\Sigma^+$ state were derived based on the data of the two isotopomers. The Coriolis coupling consts. were derived from the harmonic force field, and yield calcd. l-type doubling consts. that are in excellent agreement with the exptl. values for both CaOH and CaOD.

1995

F: CaOH

P: 3

2B1224. Анализ фундаментальных деформационных колебаний CaO и CaOD в состояниях $A\{2\}'\Pi$ и $X\{2\}'\Sigma^{+}$ с высоким разрешением: Анализ возмущений Реннера-Теллера, спин-орбитального взаимодействия и резонансов К-типа. High-resolution analysis of the fundamental bending vibrations in the $A\{2\}'\Pi$ and $X\{2\}'\Sigma^{+}$ states of CaOH and CaOD: Deperturbation of Renner-Teller, spin-orbit and K-type resonance interactions / Li M., Coxon J. A. // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 7. - С. 2663-2674. - Англ. Изучены с высоким разрешением спектры возбуждения ФЛ для переходов, включающих уровни $v[2]=1$ состояний $A\{2\}'\Pi$ и $X\{2\}'\Sigma^{+}$ CaO и CaOD. Обработка с эффективным гамильтонианом, учитывающим взаимодействия типа Реннера-Теллера, спин-орбитальное и резонансы К-типа, позволила описать все наблюдаемые линии. Определены соответствующие молекулярные постоянные. Библ. 46.

Р. ж. х. №2, 1996.

CaOH
HCaO

1995

непрям.
расчет
супер-м
и симуляций,
D.C.

124: 127455m CaOH has a second linear structure HCaO. Kong, Jing; Boyd, Russell J. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(23), 10070-3 (Eng). The energy surface of CaOH was studied and an isomer of the form of HCaO with an electronic state of $^2\Sigma^+$ symmetry was found. It is linear with H-Ca and Ca-O bond lengths of 2.021 and 2.002 Å, resp., at the CISD level with a basis set of triple-zeta plus double polarization quality. The overall electronic structure is largely ionic and can be described as $H(1s^2)Ca(4s^0)O(2s^22p_x^22p_y^22p_z^1)(H-Ca^2+O^-)$. The min. on the energy surface is well defined and the harmonic vibrational frequencies were calcd. The O-H bond length and stretching frequency and the bending frequency of CaOH were also calcd. and compared with expt.

C. A. 1996, 124, N 10

[4. 38389]

1996

F: HCaO

P: 3

9B129. [Электронные] {2}'СИГМА'{+}-состояния HBeO, HMgO и HCaO. [Неэмпирическое исследование методом ССП в полном активном пространстве]. The {2}'СИГМА'{+} states of HBeO, HMgO, and HCaO / Kong Jing, Boyd Russell J. // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 11. - С. 4055-4060. - Англ.

РЖХ 1997

H Cal

(OM. 38389)

1996

Jing Kong and Russell F. Boyd,

$2\Sigma^+$ con. J. Chem. Phys., 1996, 104
(11), 4055 - 4059.

The $2\Sigma^+$ states of HHeO,
H MgO and H CaO.

MCAD

1996

Kong Ling, Boyd Russell J.

J. Chem. - Phys., 1996,

de. n.

104, N 11,

C. 4055-4060

(see. MBed

; III).

CaOH

DT 38492

1996

126: 124198k Observation and spectroscopy of high-lying states of the CaOH radical: Evidence for a bent, covalent state. Pereira, R.; Levy, Donald H. (James Franck Institute, University of Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(22), 9733-9739 (Eng), American Institute of Physics. The CaOH radical was produced in a supersonic mol. beam by the reaction of H₂O vapor with laser desorbed Ca. Three new electronic states, the D $^2\Sigma^+$, E $^3\Sigma^+$, and F states were obsd. by laser induced fluorescence and resonance enhanced multiphoton ionization spectroscopy. The D and E states are linear, but the F state is bent, the 1st bent and strongly covalent state of CaOH to be obsd. Vibrational consts. for the D state were detd. and a partially rotationally resolved spectrum provided the rotational const. and a Ca-OH bond length in this state. The D and E states are more strongly bound than the ground state, perhaps indicating some covalent contribution to the bonding: Addnl. vibrational consts. of the ground electronic an optimized delay, a Nd:YAG laser was focused at an intensity of 10^9 – 10^{10} Wcm⁻² onto a rotating metal target placed inside a vacuum chamber. Emissions from three rare gas excimers (Ar₂, Kr₂, and Xe₂) were unambiguously obsd. in the vacuum UV (VUV) spectral region. Time-resolved signals of Kr₂ emission were temporally coincided with a plasma-producing YAG laser pulse, indicating direct prodn. kinetics of Kr₂ by optical radiation from a laser-produced plasma.

check u
cmp-ra

C.A. 1997, 126, 189

CaOH

1997

($\tilde{G}^2\Pi$)

127: 196991g Optical-optical double resonance spectroscopy: The $\tilde{G}^2\Pi$ state of CaOH and CaOD. Hailey, R. A.; Jarman, C.; Bernath, P. F. (Department Chemistry, University Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(2), 669-670 (Eng), American Institute of Physics. The optical-optical double resonance spectra revealed the presence of the $G^2\Pi$ electronic state at 32630.2 cm^{-1} for CaOH and 32628.3 cm^{-1} for CaOD. In addn. to the $G^2\Pi\ v=0$ vibrational level, three other vibronic bands were seen for CaOH and two for CaOD. The absence of the long progression in the bending mode is consistent with a linear structure for the G state. Also some nominally forbidden bands were obsd. The position of the electronic energy level were compared with CaF and with calcd. data.

C. A. 1997, 127, N 14

CaOH
CaD

[Om. 38765]

1997

Hailey R.A., Farman C.
et al.,

M.N. J. Chem. Phys., 1997, 107
(2), 669-...

CaOH

(om. 39573)

1998

структур.
параметры
Di

Wai To Chan; I.P. Ma-
milton,

Chem. Phys. Lett.
1998, 297, 217-224

CaOH

[Om 41492]

2002

Jacek Kopiet[†], Kirk A. Peter-
son,

χ^2 +

robustness of Phys Chem., 2002, A106,
notes.
Freemill, 9595-9599.

ab initio
pairs

CaOH

Om. 41570

2002

X²⁵⁺,

Jacek Koput, Kirk A. Peter-
son,

поперх.
вместе.
freem,
ab initio
pairs

J. Phys. Chem., 2002, A106,
9595-9599.

