

O_6^+
 O_6^-



O⁶⁺

Bq-2872-III	1938.
-------------	-------

Eriksson H.A.S.

(7, 70)

"Z. Physik", 1938, 109, 762-73.

O₆⁺

кв. мех.
расчет
D₀

14 Б81. Возможные структуры O₆⁺, полученные полуэмпирическим методом ССП—МО. Conway D. C. Possible O₆⁺ structures obtained by a semiempirical SCF—MO method. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 12, 5703—5705 (англ.)

Предложенный ранее (см. РЖХим, 1970, 8Б21) вариант полуэмпирич. метода ССП—МО, учитывающий межмолек. дифференциальное перекрывание, использован для расчета полной энергии диссоциации D_T системы O₆⁺ на 2O₂+O₂⁺. Вследствие расчетных трудностей вариация геометр. параметров была ограничена нек-рыми плоскими конфигурациями. Найдено, что структура O₆⁺ в виде трех эквивалентных фрагментов O₂ (центры тяжести к-рых занимают вершины правильного треугольника) на 5 ккал менее устойчива, чем пять других менее сим. структур, для к-рых D_T ≈ 12 ккал (что составляет ~2/3 опытного значения). Указано, что вероятное основное состояние системы O₆⁺ отвечает S=5/2. Обсуждены соотношения между результатами в рамках различных расчетных приближений.

Е. Шусторович

X. 1970. 14

1969

1969

 O_6^+

59300n Possible O_6^+ structures obtained by a semiempirical SCF-MO method. Conway, Dwight C. (Dep. of Chem., Texas A and M Univ., College Station, Tex.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(12), 5703-5 (Eng). A semiempirical SCF-MO method which considers intermol. differential overlap has been used to compute the total dissocn. energy (to $2O_2 + O_2^+$) for various planar structures of O_6^+ . The 5 more stable structures with dissocn. energies about two-thirds the exptl. value are all possible structures at the potential min. The spins of the 5 " $1\pi_g$ -like" electrons are probably parallel in the O_6^+ ground state. RCJQ

Do

Chrysanthe

ub Mex. pasren

C.A. 1970. 72. 12

$(O_2^+)_3$

1981

Linn S.H., et al.

J. Chem. Phys., 1981,

(J; A.P.) 74, N6, 3348-3352.

( $ceer. O_2^+$; (11))

O_6^{2-}

1986

Bénard Marc,
Laidlaw W. G., et al.

meop.
pacrim.

Chem. Phys., 1986,
103, N1, 43-53.

( Ca , $S_3 N_3^-$; III)

O₆

1990

11 Б1025. • O₆(g): современное состояние вычислительного определения его термодинамики. O₆(g): The present state in computational evaluation of its thermodynamics / Slanina Zdeněk // Thermochim. acta.— 1990.— 173.— С. 171—176.— Англ.

М.П.

На основании результатов неэмпирич. расчета O₆ в двухэкспонентном (DZ) и DZ с поляризац. ф-циями базисах (Blancous C. P., Schaefer H. F. // J. Phys. Chem.— 1988.— 92.— С. 959), согласно к-рых $\Delta E = E_{\pi}(D_{3d}) - E_{\pi}(D_2) = 50$ кДж/моль (DZ), определено соотношение изомеров, а также вклады в энтальпию H, энтропию и теплоемкость C_p в зависимости от T. Показано, что содержание D_{3d} формы изменяется от 100% в интервале 100—500 К до 57% при 3000 К (DZ). Влияние изомеризма на H и S монотонно, в то время как δC_p имеет максимум при ~2000 К.

В. А. Болотин

Х. 1991, № 11

O₆

1992

Xie Yaoming,

Schaefer H.F., III. et al.

ab initio

расчет

структуры

и энергии.

Mol. Phys. 1992,

76(3), 537-46.

( S₆ ; III)

(O₃)₂

1993

ab initio
param

118: 1549/4n A computational study of the ozone dimer. Slanina, Zdenek; Adamowicz, Ludwik (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Atmos. Chem.* 1993, 16(1), 41-6 (Eng). Ab-initio calcns. were done for the ozone dimer by using the second-order Moeller-Plesset perturbation approach with the 6-31G* and 6-31 + G* basis sets (with an evaluation of the basis-set-superposition error and the fourth-order corrections). The min.-energy structure exhibited C_s symmetry (with some patterns resembling the structure of the water dimer). The calcd. dimerization energy varied between -13 and -1 kJ/mol. Monomer-dimer shifts in the vibrational frequencies were rather small (about 10 cm⁻¹ or less), while the intermol. frequencies varied between 30 and 120 cm⁻¹. The ozone dimer could influence some spectral observations under atm. conditions.

C.A. 1993, 118, N16

(103)2

1993

→ 18 Б1042. Квантово-химический расчет димера озона.
A computational study of the ozone dimer /Slanina Z.,
Adamowicz L. //J. Atmos. Chem. — 1993. — 16, № 1. — С.
41—46. — Англ.

Различные модификации неэмпирич. метода Хартри—
Фока с учетом электронной корреляции использованы для
расчета структуры и энергетич. х-к димера молекулы
озона. Установлено наличие только одного минимума
энергии димера, к-рый отвечает структуре, имеющей
одну плоскость симметрии. Найдены энергия образования
димера, к-рая в зависимости от метода расчета изменя-
лась от —13 до —1 кДж/моль, моменты инерции димера
и его собственные частоты колебаний. Рассчитан также
сдвиг собственных частот мономера в связанном состоя-
нии. Отмечено, что наличие димеров озона может за-
метно исказить оптич. х-ки атмосферы. В. И. Ролдугин

М. А.

Х. 1993, № 18.

$O_2 - O_2 - O_2$

1998

McDowell, Sean A.C.,

cmp-pa,
mlo/pen.
pacem.

J. Chem. Soc., Faraday
Trans. 1998, 94 (5),
623 - 627.

(Cell. $H_2 - H_2 - \bullet H_2$; III)

QW, 40057

1999

F: cyclic-O₆⁺, trans-O₆⁺

P: 3 131:65078 Infrared spectra of cyclic-O₆⁺ and trans-O₆⁺ in solid neon and argon. Zhou, Mingfei; Hacaloglu, Jale; Andrews, Lester (Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901, USA).

J. Chem. Phys., 110(19), 9450-9456 (English) 1999
Charged transient species in the O system were trapped in solid Ar and Ne using electron impact, Townsend discharge, and laser-ablation methods. T previously

identified O3-, O4-, and O4+ species are obsd. in these expts. Absorptions at 1435.0 and 1429.5 cm^{-1} in solid Ne are characterized as cyclic-O6+ and trans-O6+, resp., from annealing behavior, isotopic substitution, multiplet structure in mixed 16O2+18O2 expts., and d. functional calcns. Cyclic-O6+ is obsd. at 1416.1 cm^{-1} in solid Ar, a smaller displacement than found for cyclic-O4+ in solid Ar.