

УДК 53.081-536.75

С. И. Котелевский<sup>1</sup>, Ю. Ф. Педаш<sup>1</sup>, В. А. Захожай<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт химии при Харьковском национальном университете,  
61077, Харьков, пл. Свободы, 4

<sup>2</sup>Астрономическая обсерватория Харьковского национального университета,  
61022, Харьков, ул. Сумская, 35

### Молекулярные постоянные и энтальпии образования астрофизически важных соединений. Элементы H, He, C, N, O

*Дана систематическая сводка современных экспериментальных и расчетных данных о молекулярных постоянных соединений элементов H, He, C, N, O, обнаруженных или предполагаемых в атмосферах и оболочках холодных звезд и субзвезд. Приведены наиболее надежные на сегодняшний день значения энтальпий образования этих частиц из атомов и электронов в газообразном состоянии.*

*МОЛЕКУЛЯРНІ КОНСТАНТИ ТА ЕНТАЛЬПІЇ УТВОРЕННЯ АСТРО-  
ФІЗИЧНО ВАЖЛИВИХ СПОЛУК. ЕЛЕМЕНТИ H, He, C, N, O, Котелевський С. І., Педаш Ю. Ф., Захожай В. А. — Подано систематичну  
добірку сучасних експериментальних та розрахункових даних про молекулярні константи сполук елементів H, He, C, N, O, існування яких доведено або припускається у атмосферах та оболонках холодних зірок і субзірок. Наведено найнадійніші на даний час значення ентальпій утворення цих сполук з атомів та електронів у газоподібному стані.*

*MOLECULAR CONSTANTS AND ENTHALPIES OF FORMATION OF  
THE SPECIES IMPORTANT FOR ASTROPHYSICS. THE ELEMENTS H,  
He, C, N, AND O, by Kotelevskii S. I., Pedash Yu. F., Zakhzhaj V. A. —  
We give systematic compilation of the novel data on molecular constants the  
compounds of the H, He, C, N, and O, which are proved or believed to exist  
in the atmospheres and envelopes of cool stars and substellar objects. The  
most reliable currently available reaction enthalpies are given for the reaction  
of the formation of these compounds from atoms and electrons in the gas phase.*

Расчет равновесного химического состава атмосфер и поверхностных слоев небесных тел позволяет существенно дополнить данные астрономических наблюдений и дать им адекватную интерпретацию. В особенности это справедливо для холодных звезд малой массы и субзвезд (коричневых карликов), которые, как предполагают [50], могут составлять значительную часть так называемого «темного вещества» во Вселенной. Эти объекты

излучают преимущественно в ИК-диапазоне спектра, что существенно ограничивает возможности наблюдательной астрономии в исследовании их свойств по сравнению со звездами оптического диапазона. Основным источником информации о поверхностном и внутреннем строении субзвезд в настоящее время является физико-химическое моделирование [49, 138].

Авторы большинства работ, посвященных исследованию химических равновесий в звездных атмосферах [51, 215, 216], проводят расчет равновесного состава приближенными методами, рассматривая вклад элементов второго периода (C, N, O и т. д.) как малое возмущение к системе водород — гелий (массовое соотношение H:He порядка 3:1). Константы равновесий обычно берут из справочников, о необходимости учета того или иного сорта химических частиц судят на основании спектров небесных тел [60, 95, 148, 163, 167, 197, 217].

Во многих случаях, однако, предпочтителен прямой расчет констант равновесия методами статистической термодинамики на основе спектроскопических констант отдельных частиц (молекулярных постоянных) [10]. Это позволяет неограниченно расширять набор частиц по мере появления новых данных о геометрии и энергетике молекул, а также вводить поправки на межчастичное взаимодействие. Статистико-термодинамический расчет констант равновесия, кроме того, избавляет исследователя от необходимости накопления больших массивов значений констант, зависящих от температуры.

Общепризнанными источниками информации о молекулярных постоянных на русском языке являются справочные издания ИВТАН под редакцией Гурвича и др. [11], справочники Смирнова и Радцига [8, 9], а также книги Г. Герцберга [3, 4, 12]. Особо следует выделить капитальный труд М. Хьюбера и Г. Герцберга [12]. Эта монография (англоязычное издание вышло в 1979 году!) до сих пор служит основным источником экспериментальных и теоретических сведений о двухатомных молекулах для многих исследователей.

Однако с момента издания перечисленных книг прошло уже 15–20 лет. За этот период накоплен большой объем новых данных об астрофизически важных соединениях. В небесных телах и в лабораторных экспериментах обнаружены новые молекулы и молекулярные комплексы, свойства которых могут быть оценены в первую очередь на основании точных квантовохимических расчетов *ab initio*. Существенно дополнены и уточнены характеристики нижних возбужденных электронных состояний молекулярных систем. Попытки систематизации новых сведений носят эпизодический характер, хотя к настоящему времени молекулярные константы многих астрохимически важных частиц занесены в базы данных [155, 223].

Проведенный нами систематический поиск позволил отобрать наиболее надежные, на наш взгляд, значения молекулярных постоянных и энтальпий образования соединений пяти наиболее распространенных элементов. Рекомендуемые нами значения приведены ниже со ссылками на первоисточники. Если не указано иное, энтальпии образования получены на основании экспериментальных и расчетных термохимических данных из работ [13, 36, 64–68, 104, 140, 142, 146, 182, 214]. Список частиц включает 14 атомов и атомарных ионов, 30 двухатомных и 83 многоатомных молекул и ионов, а также 11 водородосвязанных димеров с хорошо известными характеристиками. Этот перечень в дальнейшем может быть значительно расширен, прежде всего за счет включения новых ионных форм. Однако данный набор, как свидетельствуют результаты наших расчетов [6, 7], позволяет описать все существенные особенности равновесного состава системы (H + He + C + N + O) в диапазоне температур от нескольких сотен до 20000 К и плотностей от  $10^{-1}$  до  $10^{-8}$  г/см<sup>3</sup>.

Таблица 1. Атомы и атомарные ионы ( $T_e$  — энергия терма,  $p_i$  — статистический вес,  $\Delta H$  — энтальпия образования частицы из атомов и электронов)

| Элемент             | Частица         | Терм              | $T_e$ , $\text{см}^{-1}$ | $p_i$               | $\Delta H$ , кДж/моль | Источник    |         |             |
|---------------------|-----------------|-------------------|--------------------------|---------------------|-----------------------|-------------|---------|-------------|
| H                   | H               | $1s(^2S_{1/2})$   | 0                        | 2                   | 0                     | [8, 9]      |         |             |
|                     |                 | $2p(^2P_{1/2}^0)$ | 82258.921                | 6                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2s(^2P_{1/2}^0)$ | 82258.956                | 2                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p(^2P_{3/2}^0)$ | 82259.286                | 4                   |                       |             |         |             |
|                     | H <sup>+</sup>  | $1s$              | 0                        | 1                   | 1312.10               | [66, 68]    |         |             |
|                     | H <sup>-</sup>  | $1s^2$            | 0                        | 1                   | -72.994               | [8, 9, 214] |         |             |
| He                  | He              | $1s^2(^1S_0)$     | 0                        | 1                   | 0                     | [8, 9]      |         |             |
|                     |                 | $2s(^3S_1)$       | 159856.069               | 3                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2s(^1S_0)$       | 166277.546               | 1                   |                       |             |         |             |
|                     | He <sup>+</sup> | $1s(^2S_{1/2})$   | 0                        | 2                   | 2372.33               | [8, 9]      |         |             |
|                     | He <sup>-</sup> | $^4P(1s2s2p)$     | 0                        | 2                   | 2625.46               | [52, 123]   |         |             |
| C                   | C               | $2p^2(^3P_0)$     | 0                        | 1                   | 0                     | [8, 9]      |         |             |
|                     |                 | $2p^2(^3P_1)$     | 16.4                     | 3                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p^2(^3P_2)$     | 43.4                     | 5                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p^2(^1D_2)$     | 10192.63                 | 5                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p^2(^1S_0)$     | 21648.01                 | 1                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2s2p(^5S_2^0)$   | 33735.20                 | 5                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p3s(^3P_0^0)$   | 60333.43                 | 1                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p3s(^3P_1^0)$   | 60352.63                 | 5                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p3s(^3P_2^0)$   | 60393.14                 | 3                   |                       |             |         |             |
|                     |                 |                   | C <sup>+</sup>           | $2s^22p(^2P_{1/2})$ | 0                     | 2           | 1086.5  | [8, 9, 66]  |
|                     |                 |                   |                          | $2s^22p(^2P_{3/2})$ | 63.42                 | 4           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2s2p^2(^4P_{1/2})$ | 43003.3               | 2           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2s2p^2(^4P_{3/2})$ | 43025.3               | 4           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2s2p^2(^4P_{5/2})$ | 43052.6               | 6           |         |             |
|                     |                 |                   | C <sup>-</sup>           | $2s^22p^3(^4S)$     | 0                     | 4           | -122.23 | [8, 9, 214] |
|                     |                 | N                 | N                        | $2p^3(^4S_{3/2}^0)$ | 0                     | 4           | 0       | [8, 9]      |
| $2p^3(^2D_{5/2}^0)$ | 19224.46        |                   |                          | 6                   |                       |             |         |             |
| $2p^3(^2D_{3/2}^0)$ | 19233.18        |                   |                          | 4                   |                       |             |         |             |
| $2p^3(^2P_{1/2}^0)$ | 28838.92        |                   |                          | 2                   |                       |             |         |             |
| $2p^3(^2P_{3/2}^0)$ | 28839.31        |                   |                          | 4                   |                       |             |         |             |
|                     | N <sup>+</sup>  |                   |                          | $2p^2(^3P_0)$       | 0                     | 1           | 1402.9  | [8, 9, 66]  |
|                     |                 |                   |                          | $2p^2(^3P_1)$       | 48.7                  | 3           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2p^2(^3P_2)$       | 130.8                 | 5           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2p^2(^1D_2)$       | 15316.2               | 5           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2p^2(^1S_0)$       | 32688.8               | 1           |         |             |
| O                   | O               | $2p^4(^3P_2)$     | 0                        | 5                   | 0                     | [8, 9]      |         |             |
|                     |                 | $2p(^3P_1)$       | 158.26                   | 3                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p(^3P_0)$       | 226.98                   | 1                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p(^1D_2)$       | 15867.86                 | 5                   |                       |             |         |             |
|                     |                 | $2p(^1S_0)$       | 33792.58                 | 1                   |                       |             |         |             |
|                     |                 |                   | O <sup>+</sup>           | $2p^3(^4S_{3/2})$   | 0                     | 4           | 1313.4  | [8, 9, 66]  |
|                     |                 |                   |                          | $2p^3(^2D_{5/2})$   | 26808.4               | 6           |         |             |
|                     |                 |                   |                          | $2p^3(^2D_{3/2})$   | 26829.4               | 4           |         |             |
|                     |                 |                   | O <sup>-</sup>           | $2p^5(^2P_{3/2})$   | 0                     | 4           | -141.41 | [8, 9, 214] |
|                     |                 |                   |                          | $2p^5(^2P_{1/2})$   | 180                   | 2           |         |             |

Таблица 2. Двухатомные молекулы ( $T_e$ ,  $p_p$ ,  $\Delta N$  — см. табл. 1;  $\sigma$  — число симметрии терма;  $\omega_e$ ,  $\omega_e \chi_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $D_e$  — молекулярные постоянные). Приблизительные оценки даны в скобках

| Частица         | $\sigma$ | Терм              | $T_e$ , $\text{см}^{-1}$ | $P_i$ | $\omega_e$ , $\text{см}^{-1}$ | $\omega_e \chi_e$ , $\text{см}^{-1}$ | $B_e$ , $\text{см}^{-1}$ | $\alpha_e$ , $\text{см}^{-1}$ | $D_e \cdot 10^5$ , $\text{см}^{-1}$ | $\Delta H$ , кДж/моль | Литературный источник                                    |
|-----------------|----------|-------------------|--------------------------|-------|-------------------------------|--------------------------------------|--------------------------|-------------------------------|-------------------------------------|-----------------------|--|
| $\text{H}_2$    | 2        | $1^1\Sigma^+$     | 0                        | 1     | 4401.21                       | 121.33                               | 60.853                   | 3.062                         | 4710                                | -432.08               | [12, 121, 220]   |
| $\text{H}_2^+$  | 2        | $2^2\Sigma^+$     | 0                        | 2     | 2321.7                        | 66.2                                 | 30.2                     | 1.68                          | 1800                                | 1056.29               | [12]   |
| $\text{H}_2^-$  | 2        | $2^2\Sigma^+$     | 0                        | 2     | (2000)                        | (30)                                 | (20)                     | (0.27)                        | 800                                 | (-250.6);<br>(-88)    | [5, 73, 122, 151, 201]                                   |
| $\text{He}_2^+$ | 2        | $2^2\Sigma^+$     | 0                        | 2     | 1698                          | 35                                   | 7.211                    | 0.224                         | 51                                  | 2154.3                | [53, 55, 56, 112]  |
| $\text{He}_2$   | 2        | $4^1\Pi_g$        | 0                        | 8     | 1797                          | 37.5                                 | 7.611                    | 0.2279                        | 55                                  | 1718.11               | [16, 17, 20, 26, 130, 153, 183]                          |
| $\text{HeH}^+$  | 1        | $1^1\Sigma^+$     | 0                        | 1     | 3228.4                        | 157.71                               | 34.887                   | 2.636                         | 1610                                | 1133.53               | [11, 12, 220]  |
| $\text{HeH}^-$  | 1        | —                 | —                        | —     | —                             | —                                    | —                        | —                             | —                                   | —                     | [35, 130, 203]   |
| $\text{CH}$     | 1        | $X^2\Pi$          | 0                        | 4     | 2860.75                       | 64.44                                | 14.457                   | 0.5365                        | 147                                 | -334.30               | [12, 92, 111, 141]                                       |
|                 | 1        | $a^4\Sigma^-$     | 5985                     | 4     | 3090.9                        | 102.17                               | 15.36                    | 0.723                         | 152                                 |                       |  |
|                 | 1        | $A^2\Delta$       | 23148                    | 4     | 2914.1                        | 81.4                                 | 14.891                   | 0.6354                        | 154                                 |                       |  |
|                 | 1        | $B^2\Sigma^-$     | 26060                    | 2     | 2246.42                       | 225.7                                | 13.48                    | 1.4823                        | 163                                 |                       |  |
|                 | 1        | $C^2\Sigma^+$     | (32021)                  | 2     | 2840.2                        | 125.96                               | 14.603                   | 0.7185                        | 156                                 |                       |  |
| $\text{CH}^+$   | 1        | $X^1\Sigma^+$     | 0                        | 1     | (2739.7)                      | (64)                                 | 14.1776                  | 0.4917                        | 140                                 | 916.74                | [11, 12, 92]   |
|                 | 1        | $a^3\Pi$          | (9200)                   | 6     | 2646                          | 70                                   | 14.048                   | 0.603                         | 140                                 |                       |  |
|                 | 1        | $A^1\Pi$          | (24111)                  | 2     | 1865.35                       | 115.85                               | 11.899                   | 0.9414                        | 200                                 |                       |  |
| $\text{CH}^-$   | 1        | $X^3\Sigma^-$     | 0                        | 3     | (2600)                        | (100)                                | 15.40                    | (0.85)*                       | (216)*                              | -454.12               | [11, 12, 68, 214]  |
|                 | 1        | $a^1\Delta$       | (6828)                   | 2     | (2500)                        | (100)                                | 15.09                    | (0.86)*                       | (220)*                              |                       |  |
| $\text{C}_2$    | 2        | $X^1\Sigma_g^+$   | 0                        | 1     | 1854.783                      | 13.389                               | 1.820013                 | 0.017682                      | 0.6959                              | -605.0                | [11, 12, 62, 76, 144, 147, 150, 162, 178, 184, 222, 224] |
|                 | 2        | $a^3\Pi_u$        | 716.2                    | 6     | 1641.35                       | 11.67                                | 1.63203                  | 0.01666                       | 0.635                               |                       |  |
|                 | 2        | $b^3\Sigma_g^-$   | 6434.27                  | 3     | 1470.45                       | 11.19                                | 1.49852                  | 0.01634                       | 0.622                               |                       |  |
|                 | 2        | $A^1\Pi_u$        | 8391.27                  | 2     | 1608.22                       | 12.055                               | 1.616477                 | 0.016872                      | 0.6494                              |                       |  |
|                 | 2        | $c^3\Sigma_u^+$   | 9227.4                   | 3     | 2040.5                        | 14.18                                | 1.885                    | 0.018                         | 0.64                                |                       |  |
|                 | 2        | $(B^1\Delta_g)$   | 12082                    | 2     | 1407.5                        | 11.48                                | 1.4637                   | 0.01682                       | 0.63188                             |                       |  |
|                 | 2        | $(B^1\Sigma_g^+)$ | 15409                    | 1     | 1424                          | 12.57                                | 1.4810                   | 0.0175                        | 0.68596                             |                       |  |
|                 | 2        | $d^3\Pi_g$        | 20022.5                  | 6     | 1788.22                       | 16.44                                | 1.7527                   | 0.01608                       | 0.674                               |                       |  |
| $\text{C}_2^+$  | 2        | $X^4\Sigma_g^+$   | 0                        | 4     | 1351                          | 12.06                                | 1.4266                   | 0.0176                        | 0.63                                | 565.63                | [11, 149, 150, 222, 224]                                 |
|                 | 2        | $(^2\Delta_g)$    | 4200                     | 4     | 1560                          | 14.0                                 | 1.39                     | 0.0162                        | 0.45                                |                       |  |
|                 | 2        | $a^2\Pi_u$        | 6000                     | 4     | 1632                          | 14.0                                 | 1.662                    | 0.02                          | 0.69*                               |                       |  |

Продолжение табл. 2

| Частица        | $\sigma$ | Терм            | $T_e, \text{см}^{-1}$ | $P_i$ | $\omega_e, \text{см}^{-1}$ | $\omega_e^*, \text{см}^{-1}$ | $B_e, \text{см}^{-1}$ | $\alpha_e, \text{см}^{-1}$ | $D_e \cdot 10^5, \text{см}^{-1}$ | $\Delta H, \text{кДж/моль}$ | Литературный источник                       |
|----------------|----------|-----------------|-----------------------|-------|----------------------------|------------------------------|-----------------------|----------------------------|----------------------------------|-----------------------------|---|
| $\text{C}_2^-$ | 2        | $c^2\Pi_g$      | 6600                  | 4     | 1300                       | (12)                         | 1.88                  | 0.025                      | 1.57*                            |                             |   |
|                | 2        | $A^4\Pi_g$      | 9679                  | 8     | 1911                       | (12)                         | 1.79                  | (0.016)*                   | (0.63)*                          |                             |   |
| $\text{C}_2^-$ | 2        | $d^2\Sigma_g^+$ | 10700                 | 2     | 1530                       | (12)                         | 1.38                  | (0.0146)*                  | (0.45)*                          |                             |   |
|                | 2        | $e^2\Sigma_g^+$ | 13600                 | 2     | 1500                       | (12)                         | 1.36                  | (0.0146)*                  | (0.45)*                          |                             |   |
| $\text{C}_2^-$ | 2        | $B^4\Sigma_u^-$ | 19652                 | 4     | 1508                       | 12.69                        | 1.5474                | (0.0178)*                  | 0.65                             |                             |   |
|                | 2        | $X^2\Sigma_u^+$ | 0                     | 2     | 1781.19                    | 11.672                       | 1.74666               | 0.0165                     | 0.669                            | -922.0                      | [11, 12, 162, 165, 189, 214, 222, 224, 225] |
| $\text{NH}$    | 2        | $A^2\Pi_u$      | 3885.83               | 4     | 1666.4                     | 10.8                         | 1.64305               | 0.016                      | 0.6                              |                             |   |
|                | 2        | $B^2\Sigma_u^+$ | 18391                 | 2     | 1969                       | 14.43                        | 1.87745               | 0.01776                    | 0.684                            |                             |   |
| $\text{NH}$    | 2        | $a^4\Sigma_u^+$ | 19448                 | 4     | 1074                       | 24.68                        | 1.1348                | 0.0035                     | 0.76                             |                             |   |
|                | 1        | $X^3\Sigma^-$   | 0                     | 3     | 3285.27                    | 78.35                        | 16.6993               | 0.649                      | 170.97                           | -330.0                      | [11, 12, 111, 190, 212]                     |
| $\text{NH}^+$  | 1        | $a^1\Delta$     | 12654.9               | 2     | 3188                       | 68                           | 16.43255              | 0.66                       | 167.309                          |                             |   |
|                | 1        | $b^1\Sigma^+$   | 21202                 | 1     | 3352.4                     | 74.24                        | 16.705                | 0.591                      | 160                              |                             |   |
| $\text{NH}^+$  | 1        | $A^3\Pi_u$      | 29807.4               | 6     | 3231.2                     | 98.7                         | 16.6745               | 0.7454                     | 178                              |                             |   |
|                | 1        | $X^2\Pi_r$      | 0                     | 4     | 2903                       | 54.5                         | 15.6925               | 0.41                       | 163                              | 971.0                       | [11, 12, 19, 212]                           |
| $\text{NH}^-$  | 1        | $a^4\Sigma^-$   | 503                   | 4     | 2544                       | 50                           | 15.0523               | 0.42                       | 183                              |                             |   |
|                | 1        | $A^2\Sigma^-$   | 22234.65              | 2     | 1706.9                     | 60.7                         | 11.4554               | 0.6897                     | 201                              |                             |   |
| $\text{N}_2$   | 1        | $B^2\Delta_i$   | 23323.12              | 4     | 2280                       | 43                           | 13.516                | 0.38                       | 200                              |                             |   |
|                | 1        | $C^2\Sigma^+$   | 35024.51              | 2     | 2150.56                    | 73.07                        | 13.2652               | 0.7891                     | 200                              |                             |   |
| $\text{N}_2^+$ | 1        | $X^2\Pi_u$      | 0                     | 4     | 3020.4                     | (60)                         | 16.917                | (0.50)*                    | (212)*                           | -366.09                     | [97, 214]                                   |
|                | 2        | $X^1\Sigma_u^+$ | 0                     | 1     | 2358.57                    | 14.324                       | 1.99824               | 0.017318                   | 0.576                            | -941.65                     | [12]  |
| $\text{N}_2^+$ | 2        | $X^2\Sigma_u^+$ | 0                     | 2     | 2207.00                    | 16.10                        | 1.93176               | 0.01881                    | 0.610                            | 561.6                       | [12, 150]                                   |
|                | 2        | $A^2\Pi_u$      | 9166.95               | 4     | 1903.70                    | 15.02                        | 1.7444                | 0.0188                     | 0.56                             |                             |   |
| $\text{N}_2^-$ | 2        | $B^2\Sigma_u^+$ | 25461.46              | 2     | 2419.84                    | 23.189                       | 2.07456               | 0.024                      | 0.617                            |                             |   |
|                | 2        | $X^2\Pi_g$      | 0                     | 4     | (1968)                     | (10)                         | - (resonance)         | -                          | -                                |                             |   |
| $\text{CN}$    | 1        | $X^2\Sigma^+$   | 0                     | 2     | 2068.435                   | 12.9765                      | 1.89931               | 0.0172687                  | 0.6382                           | -746.48                     | [12, 21, 59, 98]                            |
|                | 1        | $A^2\Pi_u$      | 9240.041              | 4     | 1813.474                   | 12.8272                      | 1.71547               | 0.0173452                  | 0.61534                          |                             | [11, 12, 150, 179, 184]                     |
| $\text{CN}^+$  | 1        | $B^2\Sigma^+$   | 25752.0               | 2     | 2163.9                     | 20.2                         | 1.985                 | 0.023                      | 0.6543                           |                             |   |
|                | 1        | $X^1\Sigma^+$   | 0                     | 1     | 2033.05                    | 16.14                        | 1.8964                | 0.0188                     | 0.7                              | 565.71                      | [11, 12, 101, 178, 199]                     |
| $\text{CN}^+$  | 1        | $a^3\Pi$        | 645                   | 6     | 1682.47                    | 15.25                        | 1.663                 | 0.0195                     | 0.664                            |                             |   |

Окончание табл. 2

| Частица        | $\sigma$ | Терм               | $T_e, \text{см}^{-1}$ | $P_i$ | $\omega_e, \text{см}^{-1}$ | $\omega_e x_e, \text{см}^{-1}$ | $B_e, \text{см}^{-1}$ | $\alpha_e, \text{см}^{-1}$ | $D_e \cdot 10^5, \text{см}^{-1}$ | $\Delta H, \text{кДж/моль}$ | Литературный источник |
|----------------|----------|--------------------|-----------------------|-------|----------------------------|--------------------------------|-----------------------|----------------------------|----------------------------------|-----------------------------|-----------------------|
|                | 1        | $A^1\Pi$           | 8313.6                | 2     | 1688.35                    | 15.12                          | 1.6767                | 0.0191                     | 0.684                            |                             |                       |
| $\text{CN}^-$  | 1        | $X^1\Sigma$        | 0                     | 1     | 2035                       | 13.6                           | 1.8832                | 0.0172                     | 0.617                            | -1119.1                     | [150, 180, 214, 241]  |
| $\text{OH}$    | 1        | $X^2\Pi_i$         | 0                     | 4     | 3737.70                    | 84.8813                        | 18.9108               | 0.7494                     | 193.8                            | -425.89                     | [11, 12, 141, 196]    |
|                |          | $A^2\Sigma^+$      | 32684.1               | 2     | 3178.86                    | 92.917                         | 17.358                | 0.7868                     | 203.9                            |                             |                       |
| $\text{OH}^+$  | 1        | $X^3\Sigma^-$      | 0                     | 3     | 3113.37                    | 78.515                         | 16.7943               | 0.7494                     | 191.744                          | 829.37                      | [11, 12, 68]          |
|                | 1        | $a^1\Delta$        | 16800                 | 2     | 3000                       | 56                             | 16.7                  | 0.464                      | 170                              |                             |                       |
|                | 1        | $A^3\Pi_i$         | 28438.55              | 6     | 2133.65                    | 79.55                          | 13.7916               | 0.8889                     | 224.95                           |                             |                       |
|                |          | $(0^-, 0^+, 1, 2)$ |                       |       |                            |                                |                       |                            |                                  |                             |                       |
| $\text{OH}^-$  | 1        | $X^1\Sigma^+$      | 0                     | 1     | 3555.5932                  | (78.78)*                       | 19.26                 | (0.64)*                    | (226)*                           | -602.23                     | [214]                 |
| $\text{O}_2$   | 2        | $X^3\Sigma_g^-$    | 0                     | 3     | 1580.193                   | 11.981                         | 1.445622              | 0.01593                    | 0.502                            | -493.59                     | [11, 12]              |
|                | 2        | $a^1\Delta_g$      | 7917.54               | 2     | 1509.3                     | 12.9                           | 1.4263                | 0.0171                     | 0.497                            |                             |                       |
|                | 2        | $b^1\Sigma_g^+$    | 13195.07              | 1     | 1432.67                    | 13.934                         | 1.40048               | 0.018169                   | 0.5356                           |                             |                       |
|                | 2        | $c^1\Sigma_u^-$    | 33055.71              | 1     | 794.39                     | 12.736                         | 0.9155                | 0.01391                    | 1.05                             |                             |                       |
| $\text{O}_2^+$ | 2        | $X^2\Pi_g$         | 0                     | 4     | 1905.13                    | 16.28                          | 1.68912               | 0.01958                    | 0.53                             | 671.7                       | [11-13]               |
|                | 2        | $A^4\Pi_{ii}$      | 32913                 | 8     | 1035.53                    | 10.32                          | 1.00432               | 0.01546                    | 0.488                            |                             |                       |
| $\text{O}_2^-$ | 2        | $X^2\Pi_g$         | 0                     | 4     | 1090                       | 8                              | 1.16                  | (0.0121)*                  | (0.527)*                         | 537.1                       | [80, 214]             |
|                | 2        | $a^4\Sigma_u^-$    | 22540                 | 4     | 572                        | 5.6                            | 0.618                 | (0.0081)*                  | (0.289)*                         |                             |                       |
|                | 2        | $A^2\Pi_{ii}$      | 28580                 | 4     | 604                        | 6.0                            | 0.694                 | (0.0093)*                  | (0.366)*                         |                             |                       |
| $\text{CO}$    | 1        | $X^1\Sigma^+$      | 0                     | 1     | 2169.8138                  | 13.28842                       | 1.931281              | 0.0175043                  | 0.612071                         | -1071.77                    | [11, 12]              |
| $\text{CO}^+$  | 1        | $X^2\Sigma^+$      | 0                     | 2     | 2214.24                    | 15.164                         | 1.97720               | 0.01896                    | 0.637                            | 280.4                       | [11-13]               |
|                | 1        | $A^2\Pi_i$         | 20733.15              | 4     | 1562.06                    | 13.532                         | 1.58940               | 0.01942                    | 0.660                            |                             |                       |

\*) Примечание: константы, оцененные на основе модельного потенциала Морзе (формулы см. [11])

Таблица 3. Многоатомные молекулы.  $I_A I_B I_C$  — произведение моментов инерции;  $\nu_j$  — частоты колебаний (указана симметрия или наличие вырождения); для внутреннего вращения:  $V_0$  — оценка барьера вращения;  $I_{пр}$  — приведенный момент инерции волчка (г/см<sup>2</sup>);  $\sigma_m$  — число симметрии волчка относительно оси вращения;  $n_m$  — кратность барьера. Остальные обозначения см. табл. 1 и 2

| Частица                   | $\sigma$ | Терм         | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии  | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $V$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )  | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник         |
|---------------------------|----------|--------------|--------------------------|-------|--|--|---|--------------------------|----------------------------------|
| $\text{H}_3^+$            | 6        | $X^1A_1$     | 0                        | 1     | правильный треугольник; $D_{3h}$ ; $0.8732 \text{ \AA}$<br>{эсп. $0.98 \pm 0.03 \text{ \AA}$ }   | 0.4103   | 3437.5/3178; 2775/2521.3 (E)  | 462.20                   | [83, 89, 152,<br>172, 194]       |
| $\text{H}_3^-$            | 1        | $X^1A_1$     | 0                        | 1     | линейная; $C_{\infty v}$ ; $r_1 = 0.749 \text{ \AA}$ ; $r_2 = 2.875 \text{ \AA}$   | 2.26   | 150; 400 (E); 4400  | -499.19                  | [25, 32, 33, 58,<br>154, 206]    |
| $\text{H}_4^+$            | 2        | $X^2A_1$     | 0                        | 2     | $C_{2v}$ ; $\text{H}_3^+$ + атом H; $R_{1,2} = R_{1,3} = 0.9496 \text{ \AA}$ ;<br>$R_{1,4} = 1.3549 \text{ \AA}$ ; $\theta_{3,1,2} = 52.4^\circ$ | 25.427   | 564; 587; 765; 2319; 2354; 3454   | 459.41                   | [107, 117, 232,<br>246]          |
| $\text{H}_5^+$            | 2        | $X^1A_1$     | 0                        | 1     | $C_{2v}$ ; $\text{H}_3^+$ + молекула $\text{H}_2$  | 68.699   | 533; 787; 846; 1137; 1986; 2223; 3652;<br>4163; $V_0 = 128 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{пр} = 0.2587 \cdot 10^{-40}$ ,<br>$\sigma_m = n_m = 2$  | 32.158                   | [82, 159, 166,<br>237]           |
| $\text{H}_6^+$            | 4        |              | 0                        | 4     | $D_{2d}$ ; $R_1 = 1.045 \text{ \AA}$ ; $R_2 = 0.785 \text{ \AA}$ ;<br>$R_3 = 1.154 \text{ \AA}$  | 153.686  | 365 (E); 783 (E); 904 ( $a_1$ ); 1004 ( $b_2$ );<br>1219 (E); 2089 ( $a_1$ ); 3865 ( $b_2$ ); 3941 ( $a_1$ );<br>$V_0 = 120 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{пр} = 0.2558 \cdot 10^{-40}$ ,<br>$\sigma_m = n_m = 2$ | 2.938                    | [117, 125, 157]                  |
| $\text{HeH}_2^+$          | 1        |              | 0                        | 2     | линейная; $C_{\infty v}$ ; $R(\text{He-H}) = 1.0973 \text{ \AA}$ ;<br>$R(\text{H-H}) = 1.0793 \text{ \AA}$                                       | 5.1680   | 696 (E); 717 (He...H); 2077 (H...H)   | (1300)                   | [90, 188]                        |
| $\text{He}_2\text{H}^+$   | 2        |              | 0                        | 1     | линейная; $D_{\infty h}$ ; $R_1 = R_2 = 0.93 \text{ \AA}$  | 2.4366   | 936 (E); 1126; 1492   | (1100)                   | [24, 113, 128]                   |
| $\text{He}_3^+$           | 2        | $^2\Sigma_g$ | 0                        | 2     | линейная; $D_{\infty h}$ ; $R_1 = R_2 = 1.236 \text{ \AA}$   | 1.369  | 262 ( $E_{1u}$ ); 616 ( $A_{1u}$ ); 898 ( $A_{1g}$ )  | 2136.4                   | [14, 99, 119,<br>205]            |
| $\text{He}_n\text{H}_3^+$ |          |              |                          |       |  |  |   |                          | см. [37]                         |
| $\text{CH}_2$             | 2        | $X^3B_1$     | 0                        | 3     | $C_{2v}$ ; $r_e = 1.0766 \pm 0.0014 \text{ \AA}$ ;<br>$\theta_e = 134.037 \pm 0.045^\circ$   | 6.1563   | 963.1 ( $a_1$ ); 2992 ( $a_1$ ); 3213 ( $b_2$ )   | -753.0                   | [29, 104, 161,<br>173, 239, 240] |
|                           | 2        | $a^1A_1$     | 3243                     | 1     | $C_{2v}$ ; $r_e = 1.107 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 102.4^\circ$  | 13.0068  | 1361 ( $a_1$ ); 2820 ( $a_1$ ); 2864.5 ( $b_2$ )  |                          |                                  |
|                           | 2        | $b^1B_1$     | 11910                    | 1     | $C_{2v}$ ; $r_e = 1.075 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 142^\circ$  | 4.52234  | 955 ( $a_1$ ); 3141 ( $a_1$ ); 3427 ( $b_2$ )   |                          |                                  |
|                           | 2        | $c^1A_1$     | 21010                    | 1     | $C_{2v}$ ; $r_e = 1.068 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 171.9^\circ$  | 0.23110  | 551 ( $a_1$ ); 3260 ( $a_1$ ); 3603 ( $b_2$ )   |                          |                                  |
| $\text{CH}_2^+$           | 2        | $X^2A_1$     | 0                        | 2     | $C_{2v}$ ; $r_e = 1.096 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 140.5^\circ$  | 5.4150   | 793 ( $a_1$ ); 2947 ( $a_1$ ); 3182 ( $b_2$ )   | 251.0                    | [13, 27, 170,<br>171]            |
|                           | 2        | $A^2B_1$     | (6775)                   | 2     | $C_{2v}$ ; $r_e \approx 1.1 \text{ \AA}$ ; $\theta_e \geq 150^\circ$   | (4)  | (500) ( $a_1$ ); (3000) ( $a_1$ ); (3000) ( $b_2$ )   |                          |                                  |

Продолжение табл. 3

| Частица                                    | $\sigma$ | Терм                             | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии  | $I A^1 B^1 C^1 \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $a_j$ ) | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник      |
|--|----------|----------------------------------|--------------------------|-------|--|--|--|--------------------------|-------------------------------|
| CH <sub>2</sub> <sup>-</sup>               | 2        | X <sup>2</sup> B <sub>1</sub>    | 0                        | 2     | C <sub>2v</sub> ; $r_e = 1.122$ Å; $\theta_e = 102.7^\circ$  | 14.073   | 2600 ( $a_1$ ); 1230 ( $a_1$ ); 2700 ( $b_2$ )         | -814.9                   | [68, 214]                     |
| CH <sub>3</sub>                            | 6        | X <sup>2</sup> A <sub>2</sub> '' | 0                        | 2     | D <sub>3h</sub> ; $r_e(\text{CH}) = 1.079 \pm 0.005$ Å   | 49.9   | 3000; 607; 1398 (E); 3162 (E)                          | -1209.18                 | [4, 11, 46, 104,<br>173, 228] |
| CH <sub>3</sub> <sup>+</sup>               | 6        | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub>    | 0                        | 1     | плоская; D <sub>3h</sub> ; $r_e(\text{CH}) = 1.0870$ Å   | 51.0   | 1360 (E); 2900; 3100                                   | -260.0                   | [13, 40, 46,<br>195]          |
| CH <sub>4</sub>                            | 12       | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub>    | 0                        | 1     | T <sub>d</sub> ; T <sub>0</sub> (CH) = 1.09398 ± 0.00001 Å;<br>$r_e(\text{CH}) = 1.0859 \pm 0.0003$ Å                          | 142.5  | 2916.7; 1533.3 (E); 3019.5 (T);<br>1310.76 (T)         | -1642.26                 | [4, 11, 139,<br>213]          |
| C <sub>2</sub> H                           | 1        | X <sup>2</sup> $\Sigma^+$        | 0                        | 1     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.217 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.074$ Å   | 1.4527   | 3612; 389 (E); 1848                                    | -1076.0                  | [11, 62, 158,<br>173]         |
| C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 1        | A <sup>2</sup> Π                 | 3630                     | 4     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.288 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.060$ Å   | 1.3231   | 3500; 500 (E); 1700                                    | (58.7)                   | [62, 120, 243]                |
| C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 1        | X <sup>3</sup> Π                 | 0                        | 4     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.275 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.090$ Å   | 1.3359   | 583 (2); 1636; 3500                                    |                          |                               |
| C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 1        | A <sup>3</sup> $\Sigma^-$        | 2740                     | 3     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.386 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.095$ Å   | 1.1543   | 583 (2); 1636; 3116                                    |                          |                               |
| C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 1        | B <sup>1</sup> Π                 | 9033                     | 2     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.275 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.090$ Å   | 1.3359   |  |                          |                               |
| C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 1        | C <sup>1</sup> Δ                 | 9114                     | 2     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.408 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.101$ Å   | 1.1228   |  |                          |                               |
| C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 2        | d <sup>3</sup> B <sub>1</sub>    | 10240                    | 3     | равнобедренный треугольник; C <sub>2v</sub> ;<br>$r(\text{CC}) = 1.371$ Å; $r(\text{CH}) = 1.355$ Å;<br>∠ CCH = 59.6°          | 851.10   |  |                          |                               |
| C <sub>2</sub> H <sup>-</sup>              | 1        | X <sup>1</sup> $\Sigma$          | 0                        | 1     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CC) = 1.2463 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.0696$ Å   | 1.3943   | 510.5; 1807; 3212                                      | -1363.5                  | [68]                          |
| C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>              | 2        | X <sup>1</sup> $\Sigma_g^+$      | 0                        | 1     | линейная; D <sub>∞h</sub> ; r(CC) = 1.203 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.062$ Å   | 1.1857   | 624 (2); 747 (2); 2008; 3415; 3495                     | -1627.16                 | [34, 135, 139,<br>213]        |
| C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> <sup>+</sup> | 2        | X <sup>2</sup> Π <sub>u</sub>    | 0                        | 2     | линейная; D <sub>∞h</sub> ; r(CC) = 1.26 Å;<br>$r(\text{CH}) = 1.08$ Å   | 1.097  | 697; 710; 505; 741; 1812; 3204; 3285                   | -526.7                   | [13, 127, 198,<br>243]        |
| C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>              | 1        | X <sup>2</sup> A                 | 0                        | 2     | плоская; C <sub>s</sub> ; r(C-C) = 1.36 ± 0.05 Å;<br>$r(\text{C-H}) = 1.08 \pm 0.03$ Å;<br>∠ HCH = 116 ± 5°; ∠ CCH = 130 ± 15° | 3100   | 950; 1000; 1000; 1300; 1400; 1625; 3050;<br>3100; 3150 | -1766.7                  | [11, 65]                      |



Продолжение табл. 3

| Частица                       | $\sigma$ | Терм  | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии  | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $\nu_j$ )   | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник                  |
|-------------------------------|----------|---|--------------------------|-------|--|--|--|--------------------------|---|
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> | 4        | X <sup>1</sup> A                            | 0                        | 1     | плоская; $V_h; r(\text{CC}) = 1.337 \text{ \AA}$ ;<br>$r(\text{CH}) = 1.084 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{CSH} = 121.25^\circ$  | 5.4345 · 10 <sup>3</sup>   | 826; 940.6; 949.3; 1028; 1220; 1342;<br>1443.5; 1623; 2988.65; 3021.2; 3083.19;<br>3104.94   | -2225.51                 | [11, 161]                                 |
| C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> | 1        | X <sup>2</sup> A                            | 0                        | 2     | $C_S; r(\text{CC}) = 1.49 \text{ \AA}$ ; $r(\text{CH}_{\text{sp}^3}) = 1.10 \text{ \AA}$ ;<br>$r(\text{CH}_{\text{sp}^2}) = 1.085 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{CSH} \approx 112^\circ$ ;<br>$\angle \text{H'CH} \approx 120^\circ$ | 1.21 · 10 <sup>4</sup>   | 540; 786; 956; 1138; 1175; 1350; 1366;<br>1440 (2); 2842; 2920; 2987; 3033; 3112;<br>$V_0 = 25 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{np}} = 2.65 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$   | -2370                    | [11, 46, 218]                             |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> | 6        | X <sup>1</sup> A                            | 0                        | 1     | $D_{3d}; r(\text{CC}) = 1.534 \text{ \AA}$ ; $r(\text{CH}) = 1.095 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HCH} = 107.8^\circ$   | 1.868 · 10 <sup>4</sup>  | 821.6 (2); 994.8; 1190 (2); 1379.16;<br>1388.4; 1468.1 (2); 1471.39 (2); 2895.79;<br>2953.7; 2968.69 (2); 2985.35 (2);<br>$V_0 = 1024 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{np}} = 2.62 \cdot 10^{-40}$ ;<br>$\sigma_m = n_m = 3$ | -2786.7                  | [2, 4, 11, 61,<br>219]                    |
| C <sub>3</sub>                | 2        | X <sup>1</sup> $\Sigma_g^+$                 | 0                        | 2     | линейная; $D_{\infty h}; r_e = 1.2945 \text{ \AA}$   | 0.4200   | 1226.5; 63.4 (2); 2040   | -1303.0                  | [42, 106, 144,<br>156, 187, 222]          |
|                               | 2        | a <sup>3</sup> $\Pi_u$                      | 16930                    | 6     | линейная; $D_{\infty h}; r_e = 1.298 \text{ \AA}$  | 0.4169   | 1154; 505 (2); 1450  |                          |   |
|                               | 2        | b <sup>3</sup> $\Pi_g$                      | 23400                    | 6     | линейная; $D_{\infty h}; r_e = 1.2863 \text{ \AA}$   | 0.4245   | 1303; 345 (2); 1700  |                          |   |
|                               | 2        | A <sup>1</sup> $\Pi_u$                      | 24676                    | 2     | линейная; $D_{\infty h}; r_e = 1.305 \text{ \AA}$  | 0.4124   | 1085.8; 307.9 (2); 541   |                          |   |
| C <sub>3</sub> <sup>+</sup>   | 1        | X <sup>2</sup> $\Sigma$                     | 0                        | 2     | линейная; $C_{\infty v}; r_1 = 1.230 \text{ \AA}$ ; $r_2 = 1.381 \text{ \AA}$  | 0.4022   | 1980; 271 (2); 1097  | (-180.0)                 | [143, 164, 168,<br>169, 187, 222,<br>226] |
|                               | 2        | X <sup>1</sup> <sup>2</sup> B <sub>2</sub>  | 141                      | 2     | нелинейная; $C_{2v}; r_e = 1.323 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 69.0^\circ$  | 5654.8   | 1590; 592; 1094  |                          |   |
|                               | 2        | a <sup>4</sup> A <sub>2</sub> '( $\Delta$ ) | 6049                     | 4     | нелинейная; $C_{2v}; r_e = 1.401 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 60.0^\circ$  | 11842  | 1327 (2); 1774   |                          |   |
|                               | 2        | b <sup>2</sup> $\Sigma_g^+$                 | 7478                     | 2     | линейная; $D_{\infty h}; r_e = 1.281 \text{ \AA}$  | 0.4280   | 3926; 248 (2); 1254  |                          |   |
| C <sub>3</sub> <sup>-</sup>   | 2        | X <sup>2</sup> $\Pi_g$                      | 0                        | 4     | линейная; $D_{\infty h}; r_e = 1.323 \text{ \AA}$  | 0.4013   | 399; 231; 1175   | -1495.5                  | [15, 164, 187,<br>210, 214, 222,<br>225]  |
| C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> | 12       | X <sup>1</sup> A <sub>1g</sub>              | 0                        | 1     | $D_{6h}; r_e(\text{CC}) = 1.3914 \pm 0.0010 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CH}) = 1.0802 \pm 0.0020 \text{ \AA}$   | 6.33 · 10 <sup>6</sup>   | 398; 608; 674; 707; 846 (2); 967 (2); 990<br>(2); 995; 1010; 1037; 1146; 1178; 1309<br>(2); 1350; 1482; 1599 (2); 3056 (2); 3057;<br>3064 (2); 3073  | -5463.3                  | [4, 85, 91, 104,<br>129]                  |
| NH <sub>2</sub>               | 2        | X <sup>2</sup> B <sub>1</sub>               | 0                        | 2     | $C_{2v}; r_e = 1.0245 \text{ \AA}$ ; $\theta_e = 103.3^\circ$  | 8.353  | 3219 (a <sub>1</sub> ); 1497 (a <sub>1</sub> ); 3301 (b <sub>2</sub> )   | -711.24                  | [30, 175, 214,<br>238]                    |

Продолжение табл. 3

| Частица                                    | $\sigma$ | Терм                          | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии   | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )  | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник    |
|--|----------|-------------------------------|--------------------------|-------|---|--|---|--------------------------|-----------------------------|
| NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>               | 2        | A <sup>2</sup> A <sub>1</sub> | 11070                    | 2     | C <sub>2v</sub> ; $r_e = 1.005$ Å; $\theta_e = 140.5^\circ$   | 2.805<br>(2.23)  | 3325 ( $a_1$ ); 633 ( $a_1$ ); 3700 ( $b_2$ )   | 363.6                    | [68, 171]                   |
|  | 2        | X <sup>2</sup> B              | 0                        | 3     | C <sub>2v</sub> (изозл. CH <sub>2</sub> ); $r_e = 1.023$ Å; $\theta_e = 150^\circ$  | (8.376)  | 775; 3340; 3500   |                          |                             |
| NH <sub>2</sub> <sup>-</sup>               | 2        | d <sup>1</sup> A              | 10300                    | 1     | C <sub>2v</sub> ; $r_e = 1.035$ Å; $\theta_e = 109^\circ$   | 8.606  | 1500; 3350; 3400  | -785.7                   | [40, 44, 214,<br>241]       |
|  | 2        | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub> | 0                        | 1     | C <sub>2v</sub> (изозл. H <sub>2</sub> O); $r_e = 1.028$ Å;<br>$\theta_e = 101.9^\circ$   |  | 3121.93 ( $a_1$ ); 1400 ( $a_1$ ); 3190.29 ( $b_2$ )  |                          |                             |
| NH <sub>3</sub>                            | 3        | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub> | 0                        | 1     | пирамида; C <sub>3v</sub> ; $r_e(\text{NH}) = 1.0116$ Å;<br>$\angle \text{HNH} = 106.7^\circ$   | 51.35  | 3336.68; 950.42; 1626.75 (2); 3443.77 (2)   | -1157.84                 | [11, 181]                   |
| NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>               | 6        | X <sup>2</sup> A''            | 0                        | 2     | плоская; D <sub>3h</sub> (изозл. CH <sub>3</sub> );<br>$r_e(\text{NH}) = 1.0241$ Å  | 35.66  | 903; (1500); 3150; (3300)   | -175.6                   | [40, 68]                    |
|  | 12       | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub> | 0                        | 1     | T <sub>d</sub> (изозл. CH <sub>4</sub> );<br>$r_e(\text{NH}) = 1.021 \pm 0.002$ Å   | 98.25 (100)  | 3250; 1430 (3); 1700 (2); 3350 (3)  | -699.3                   | [11, 40, 109,<br>139, 181]  |
| N <sub>2</sub> H <sup>+</sup>              | 1        | X <sup>1</sup> $\Sigma$       | 0                        | 1     | линейная; C <sub><math>\infty</math>v</sub> (изозл. C <sub>2</sub> H);<br>$r(\text{NN}) = 1.0973$ Å; $r(\text{NH}) = 1.0336$ Å  | 1.5543   | (800) (2); 2258; 3234   | (-130)                   | [13, 40, 136,<br>137, 230]  |
| N <sub>2</sub> H <sub>2</sub> trans        | 2        | X <sup>1</sup> A <sub>g</sub> | 0                        | 1     | C <sub>2h</sub> ; $r(\text{NN}) = 1.252 \pm 0.002$ Å;<br>$r(\text{NH}) = 1.028 \pm 0.005$ Å;<br>$\angle \text{NNH} = 106.5 \pm 0.5^\circ$   | 1.4623 · 10 <sup>3</sup>   | 1289; 1316; 1529; 1583; 3120.3; 3131  | -1166.1                  | [11, 68, 116,<br>145]       |
|  | 2        | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub> | 0                        | 1     | C <sub>2v</sub> ; $r(\text{NN}) = 1.24 \pm 0.02$ Å;<br>$r(\text{NH}) = 1.028$ Å; $\angle \text{NNH} = 115.5 \pm 3^\circ$  | 1.46 · 10 <sup>3</sup>   | 1100; 1390; 1470; 1670; 3040; 3090  | -1130                    | [11]                        |
| N <sub>2</sub> H <sub>2</sub> 1, 1         | 2        | X <sup>3</sup> A <sub>2</sub> | 0                        | 3     | C <sub>2v</sub> ; $r(\text{NN}) = 1.28 \pm 0.02$ Å;<br>$r(\text{NH}) = 1.03 \pm 0.02$ Å; $\angle \text{NNH} = 122 \pm 3^\circ$  | 1.58 · 10 <sup>3</sup>   | 1200; 1360; 1485; 1580; 3330; 3380  | -1094                    | [11]                        |
|  | 2        | d <sup>1</sup> A <sub>1</sub> | 700                      | 1     | (C <sub>2v</sub> )<br>плоская; C <sub>S</sub>   | (1.25 · 10 <sup>3</sup> )<br>(2.22 · 10 <sup>3</sup> )   | 1100; 1500; 1700; 2000; 3250; 3450  |                          |                             |
| N <sub>2</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup> | 1        | X <sup>1</sup> A'             | 0                        | 1     |   | 7200   | 1021; 1053; 1077; 1278; 1634; 1925; 3275;<br>3311; 3363 (PM3, масшт.)   | -622                     | [11, 68]<br>(геом. PM3)     |
| N <sub>2</sub> H <sub>4</sub>              | 2        | X <sup>1</sup> A              | 0                        | 1     | C <sub>2</sub> ; $r_e(\text{NN}) = 1.449$ Å; $r_e(\text{NH}) = 1.021$ Å;<br>$\angle \text{HNH} = 106^\circ$ ; $\angle \text{NNH} = 112^\circ$   |  | 780; 937.2; 1098; 1275 (2); 1587; 1628;<br>3280; 3314; 3325; 3350; V <sub>0</sub> = 1500 см <sup>-1</sup> ;<br>$I_{\text{гг}} = 1.46 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = 1$ ; $n_m = 2$                           | -1696.11                 | [1, 11, 57, 61,<br>77, 133] |
|  | 1        | X <sup>1</sup> A              | 0                        | 1     | $r_e(\text{NN}) \approx 1.47$ Å; $r_e(\text{NH}) = 1.02$ Å;<br>$r_e(\text{N}^+\text{H}) = 1.025$ Å; $\angle \text{HNH} \approx$<br>$\angle \text{HNH}^+ \approx 111^\circ$ ; $\angle \text{H}_{\text{опт}}\text{N}^+\text{N} \approx 114^\circ$ ;<br>$\angle \text{H}_{\text{сост}}\text{N}^+\text{N} \approx 107^\circ$ ; $\angle \text{HN}^+\text{H} \approx 110^\circ$ | 1.093 · 10 <sup>4</sup>  | 802; 973; 1009; 1138; 1196; 1546; 1604;<br>1704; 1711; 3200; 3230; 3250; 3340; 3400;<br>V <sub>0</sub> = 1000 см <sup>-1</sup> ; I <sub>гг</sub> = 2.65 · 10 <sup>-40</sup> ;<br>$\sigma_m = 3$ ; $n_m = 2$ | -1257.8                  | [57]                        |

Продолжение табл. 3

| Частица                                      | $\sigma$ | Терм                                       | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии  | $I A^1 B^1 C^1 \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )                           | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник   |
|--|----------|--|--------------------------|-------|--|--|--|--------------------------|----------------------------|
| HNCN   | 1        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | линейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.1532 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CH}) = 1.0650 \text{ \AA}$  | 1.4849   | 2096.29; 713.46 (2); 3311.38   | -1268.17                 | [11, 54, 139,<br>213, 230] |
| HNC  | 1        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | линейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.1684 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NH}) = 0.9970 \text{ \AA}$  | 1.512  | 2024; 464 (2); 3653  | -1098.04                 | [179, 213, 230]            |
| HNCN <sup>+</sup>                            | 1        | X <sup>2</sup> Π                           | 0                        | 4     | линейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.212 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CH}) = 1.090 \text{ \AA}$  | 1.347  | 1832.3; 696.4 (2); 3215.3  | 45.33                    | [57]                       |
| HNC <sup>+</sup>                             | 1        | X <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>              | 0                        | 2     | линейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.138 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NH}) = 1.016 \text{ \AA}$  | 1.579  | 3602.8; 618 (2); 2238.5  | 59.78                    | [57]                       |
| HNCNH <sup>+</sup>                           | 1        | X <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>              | 0                        | 1     | линейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.144 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NH}) = 1.015 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.080 \text{ \AA}$   | 1.243  | 700; 790; 2161; 3201; 3474   | -602.3                   | [40]                       |
| HCCN   | 1        | X <sup>3</sup> A <sup>1</sup>              | 0                        | 3     | квазилинейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.227 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CC}) = 1.315 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.074 \text{ \AA}$  | 0.3543   | 376; 408; 689; 1123; 1818; 3362  | -1478.4                  | [22]                       |
| CNN  | 1        | X <sup>3</sup> Σ <sup>-</sup> <sub>g</sub> | 0                        | 3     | линейная; $C_{\infty v^2}$ ; $r_e(\text{NN}) = 1.220 \pm 0.01 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CN}) = 1.245 \pm 0.01 \text{ \AA}$  | 0.4284   | 1240; 395 (2); 1420  | (-1253)                  | [11, 209]                  |
|  | 1        | a <sup>1</sup> Δ                           | 3000                     | 2     | линейная; $C_{\infty v^2}$   |  |  |                          |                            |
|  | 1        | b <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>              | 4000                     | 1     | линейная; $C_{\infty v^2}$   |  |  |                          |                            |
| NCN  | 2        | X <sup>3</sup> Σ <sup>-</sup> <sub>g</sub> | 0                        | 3     | линейная; $D_{\infty h}$ ; $r_e(\text{CN}) = 1.232 \text{ \AA}$  | 0.3968   | 1197; 423 (2); 1475  | (-1353)                  | [11, 209]                  |
|  | 2        | a <sup>1</sup> Δ                           | 1500                     | 2     | линейная; $D_{\infty h}$   | (0.4)  |  |                          |                            |
|  | 2        | b <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup> <sub>g</sub> | 2000                     | 1     | линейная; $D_{\infty h}$   | (0.4)  |  |                          |                            |
| NCCN   | 2        | X <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup> <sub>g</sub> | 0                        | 1     | линейная; $D_{\infty h}$ ; $r_e(\text{CC}) = 1.3839 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CN}) = 1.1578 \text{ \AA}$  | 0.1571   | 2330.6; 845.5; 2157.8; 502.8 (2); 233.8 (2)                                      | -2056.85                 | [41, 43, 69]               |
| CH <sub>2</sub> NH                           | 1        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | $C_{2v}$ ; $r_S$ -структура; $r_e(\text{CN}) = 1.273 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NH}) = 1.021 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.09 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HNC} = 110.4^\circ$ ; $\angle \text{HCH} = 117.0^\circ$ ;<br>$\angle \text{NCH}_{\text{cis}} = 125.1^\circ$ ; $\angle \text{NCH}_{\text{trans}} = 117.9^\circ$ ;<br><i>ab initio</i> : $r_e(\text{CN}) = 1.281 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{HNC} = 112^\circ$ | 2930   | 935; 1016; 1035; 1226; 1278; 1863; 3055;<br>3088; 3465 (все PM3)                 | (-1640)                  | [2, 67, 174,<br>176]       |
| CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> | 2        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | $C_{2v}$ (изоэл. C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ); <i>ab initio</i> :<br>$r_e(\text{CN}^+) = 1.282 \text{ \AA}$   | (4980)   | 883; 929; 968; 1085; 1143; 1250; 1562;<br>1806; 2996; 3022; 3429; 3494 (все PM3) | (-1217)                  | [176]                      |

Продолжение табл. 3

| Частица                                      | $\sigma$ | Терм                                       | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии  | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )  | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник                             |
|--|----------|--|--------------------------|-------|--|--|---|--------------------------|--|
| CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>              | 1        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | затормож.; C <sub>2</sub> S; r(CN) = 1.471 Å;<br>r(CH) = 1.099 Å; r(NH) = 1.010 Å;<br>∠ HCH = 108.0°; ∠ HNH = 107.1°;<br>τ = 54.3°               | 1.170 · 10 <sup>4</sup>  | 780; 1044; 1130; 1430; 1473; 1623; 2820;<br>2961; 3361 (все a'); 972; 1335; 1485;<br>2985; 3427 (все a'); V <sub>0</sub> = 685 см <sup>-1</sup> ;<br>I <sub>пр</sub> = 2.62 · 10 <sup>-40</sup> ; σ <sub>m</sub> = η <sub>m</sub> = 3 | -2270.1                  | [2, 79, 193,<br>219, 244]                            |
| CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> | 2        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 0     | C <sub>3v</sub> (изоэл. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> ); r(CN) = 1.507 Å;<br>r(CH) = 1.078 Å; r(NH) = 1.024 Å;<br>∠ HCH = 110.8°; ∠ HNH = 107.4° | 1.714 · 10 <sup>4</sup>  | 1004; 1427; 1534; 2917; 2993; (все a <sub>1</sub> );<br>954; 1265; 1463; 1578; 2963; 3080 (все e);<br>V <sub>0</sub> = 1050 см <sup>-1</sup> ; I <sub>пр</sub> = 2.65 · 10 <sup>-40</sup> ;<br>σ <sub>m</sub> = η <sub>m</sub> = 3    | -1855.1                  | [48, 57, 109,<br>244]                                |
| H <sub>2</sub> O                             | 2        | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub>              | 0                        | 1     | C <sub>2v</sub> ; r <sub>e</sub> (OH) = 0.9576 Å; ∠ HON = 104.51°  | 5.7527   | 1595 (a <sub>1</sub> ); 3657 (a <sub>1</sub> ); 3756 (b <sub>2</sub> )  | -917.76                  | [23, 114, 213]                                       |
| H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>                | 2        | X <sup>2</sup> B <sub>1</sub>              | 0                        | 2     | C <sub>2v</sub> ; r <sub>e</sub> (OH) = 0.9995 Å; ∠ HON = 109.3°   | 7.18   | 1408; 3212; 3259  | 299.9                    | [11, 40, 47,<br>171]                                 |
| H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>                | 2        | X <sup>2</sup> A <sub>1</sub>              | 7886                     | 2     | линейная; D <sub>∞h</sub> ; r <sub>e</sub> (OH) = 0.9884 Å   | 8.628  | (700) (2); (3100); (3480)   | -305.64                  | [11, 31, 39, 40,<br>109, 131, 132,<br>181, 198, 200] |
|  | 3        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | пирамида; C <sub>3v</sub> ; (изоэл. NH <sub>3</sub> );<br>r <sub>e</sub> (OH) = 0.9758 Å; ∠ HON = 111.3°   | 28.7   | 960; 1590 (2); 3490; 3610 (2)   | 395.91                   | [192, 202]   |
| O <sub>2</sub> H <sup>+</sup>                | 1        | X <sup>3</sup> A''                         | 0                        | 3     | C <sub>S</sub> ; r <sub>e</sub> (OO) = 1.237 Å; r <sub>e</sub> (OH) = 1.007 Å;<br>∠ HOO = 118.8°   | 670.014  | 1072; 1362; 3067  |                          |  |
|  | 1        | A <sup>1</sup> A'                          | 1185<br>(1500)           | 1     | C <sub>S</sub> ; r <sub>e</sub> (OO) = 1.215 Å; r <sub>e</sub> (OH) = 1.012 Å;<br>∠ HOO = 109.8°   | 648.802  | 1146; 1362; 3000  |                          |  |
|  | 1        | B <sup>1</sup> A''                         | 9034<br>(9077)           | 1     | C <sub>S</sub> ; r <sub>e</sub> (OO) = 1.242 Å; r <sub>e</sub> (OH) = 1.017 Å;<br>∠ HOO = 112.4°   | 692.595  | 1049; 1294; 2912  |                          |  |
| CO <sub>2</sub>                              | 2        | X <sup>1</sup> Σ <sub>g</sub> <sup>+</sup> | 0                        | 1     | линейная; D <sub>∞h</sub> ; r <sub>e</sub> (CO) = 1.1600 Å   | 0.3902   | 672.9 (2); 1353.8; 2396.5   | -1597.91                 | [11, 139]  |
| CO <sub>2</sub> <sup>+</sup>                 | 2        | X <sup>2</sup> Π <sub>3/2</sub>            | 0                        | 4     | линейная; D <sub>∞h</sub> ; r <sub>e</sub> (CO) = 1.1768 Å   | 0.3804   | 443.5; 488.1; 1255; 1469  | -267.4                   | [11, 13]   |
|  | 2        | X <sup>2</sup> Π <sub>1/2</sub>            | 159.7                    | 4     | (то же)  | (0.3804)   | 484.3; 552.5; 1255; 1469  |                          |  |
| C <sub>2</sub> O                             | 1        | X <sup>3</sup> Σ <sup>-</sup>              | 0                        | 3     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; r(CO) = 1.370 Å;<br>r(CO) = 1.370 Å  | 0.3851   | 381 (2); 1074; 1978   | -1290.6                  | [11, 209, 214]                                       |
|  | 1        | A <sup>1</sup> Δ                           | 4000                     |       |  |  |   |                          |  |
|  | 1        | B <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>              | 6500                     |       |  |  |   |                          |  |
|  | 1        | C <sup>3</sup> Π                           | 11650                    |       |  |  |   |                          |  |

Продолжение табл. 3

| Частица                         | $\sigma$ | Терм                                       | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии  | $I A' B' C' \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )  | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник        |
|---------------------------------|----------|--|--------------------------|-------|--|---|---|--------------------------|---------------------------------|
| HCO                             | 1        | X <sup>2</sup> A'                          | 0                        | 2     | C <sub>S</sub> ; $r_e(\text{CH}) = 1.119 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CO}) = 1.177 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HCO} = 124.6^\circ$  | 432.2   | 1080.76; 1868.17; 2434.48   | -1131                    | [4, 11, 214,<br>221]            |
|                                 | 1        | A <sup>2</sup> A''                         | 9294                     | 2     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; $r_e(\text{CH}) = 1.370 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CO}) = 1.198 \text{ \AA}$   | 1.3246  | 802 (2); 1813; 3316   |                          |                                 |
| HCO <sup>+</sup>                | 1        | X <sup>1</sup> Σ <sub>g</sub> <sup>+</sup> | 0                        | 1     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; $r_e(\text{CH}) = 1.0973 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CO}) = 1.1047 \text{ \AA}$   | 1.498   | (972) (2); 2184; 3089   | -345                     | [40, 221, 230,<br>231]          |
| НОС <sup>+</sup>                | 1        | X <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>              | 0                        | 1     | линейная; C <sub>∞v</sub> ; $r_e(\text{OH}) = 0.9897 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CO}) = 1.1595 \text{ \AA}$   | 1.4820  | (100) (2); 1924; 3268   | (-167)                   | [40, 231]                       |
| HCO <sup>-</sup>                | 1        | X <sup>1</sup> A'                          | 0                        | 1     | C <sub>S</sub> ; $r_e(\text{CH}) = 1.216 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CO}) = 1.238 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HCO} = 109.8^\circ$  | 797.6   | 1200; 1650; 1355  | -1163                    | [214, 221]                      |
| H <sub>2</sub> CO               | 2        | X <sup>1</sup> A <sub>1</sub>              | 0                        | 1     | плоская; C <sub>2v</sub> ; $r_e(\text{CO}) = 1.2033 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CH}) = 1.1005 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{HCH} = 116.18^\circ$   | 1.5874  | 1191; 1299; 1529; 1778; 2978; 2997  | -1494.73                 | [11, 40, 139,<br>160, 213]      |
| H <sub>2</sub> CON <sup>+</sup> |          |  | 0                        | 0     | плоская; C <sub>s</sub> (изоэл. H <sub>2</sub> CNH);<br>$r_e(\text{CO}) = 1.256 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.087$ ;<br>1.090 $\text{ \AA}$ ; $r_e(\text{OH}) = 0.993 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{OCH}_1 = 121.8^\circ$ ; $\angle \text{OCH}_{2,3} = 115.3^\circ$ | 3.004 · 10 <sup>3</sup>   | 1078; 1364; 1494; 1659; 2985; 3177; 3481  | -888                     | [40, 63]                        |
| CH <sub>3</sub> O               | 3        | X <sup>2</sup> E<br>(X <sup>2</sup> A')    | 0                        | 2     | C <sub>s</sub> (слегка искаженная C <sub>3v</sub> ); $r_e(\text{CO}) =$<br>1.386 $\text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.096 \dots 1.101 \text{ \AA}$  | 5.058 · 10 <sup>3</sup>   | 1050; 1250 (2); 1450; 1470 (2); 2900;<br>3000 (2)   | -1581.4                  | [11, 63, 102,<br>105]           |
| CH <sub>2</sub> OH              | 1        | X <sup>2</sup> A                           | 0                        | 2     | C <sub>1</sub> ; $r_e(\text{CO}) = 1.373 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}_1) = 1.086 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CH}_2) = 1.080 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{OH}) = 0.970 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{COH} = 108.5^\circ$   | 4.091 · 10 <sup>3</sup>   | 482; 550; 1090; 1184; 1280; 1530; 2915;<br>3637   | -1608.6                  | [11, 63, 218]                   |
| CH <sub>3</sub> O <sup>+</sup>  | 3        | <sup>3</sup> A <sub>1</sub>                | 0                        | 3     | C <sub>3v</sub> ; $r_e(\text{CO}) = 1.309 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.119 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HCO} = 108.3^\circ$   | 4.390 · 10 <sup>3</sup>   | 916; 964; 1136; 1197; 1250; 1700; 2700;<br>2800; 3600 (все PM3)   | -546                     | [63]                            |
| CH <sub>3</sub> O <sup>-</sup>  |          |  |                          |       | C <sub>3v</sub> ; $r_e(\text{CO}) = 1.308 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.122 \text{ \AA}$  | 4.319 · 10 <sup>3</sup>   | 1089 (2); 1303; 1387 (2); 1505; 2700 (2);<br>2887   | -1733                    | [68]; геомет-<br>рия PM3        |
| CH <sub>3</sub> OH              | 1        | X <sup>1</sup> A                           | 0                        | 1     | C <sub>s</sub> ; $r_e(\text{CO}) = 1.421 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{CH}) = 1.094 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{OH}) = 0.963 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{HCH} = 108.5^\circ$ ;<br>$\angle \text{COH} = 108.0^\circ$  | 7.908 · 10 <sup>3</sup>   | 1033.5; 1074.5; 1145; 1335.8; 1454.5;<br>1465; 1478.3; 2844.2; 2970; 2999; 3679.6;<br>$V_0 = 375.62 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{пр}} = 1.009 \cdot 10^{-40}$ ;<br>$\sigma_m = n_m = 3$ | -2012.04                 | [2, 11, 61, 74,<br>75, 79, 236] |

Продолжение табл. 3

| Частица              | $\sigma$ | Терм     | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии   | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )   | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник   |
|----------------------|----------|----------|--------------------------|-------|---|--|--|--------------------------|----------------------------|
| $C_2H_2O$<br>(кетен) | 2        | $X^1A_1$ | 0                        | 1     | $C_{2v}$ ; $r_e(CO) = 1.161 \text{ \AA}$ ; $r_e(CC) = 1.316 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(CH) = 1.078 \text{ \AA}$ ; $\angle HCH = 122.0^\circ$  | $4.489 \cdot 10^3$   | 3070 ( $a_1$ ); 2152 ( $a_1$ ); 1388 ( $a_1$ ); 1118<br>( $b_1$ ); 591 ( $b_1$ ); 525 ( $b_1$ ); 3166 ( $b_2$ ); 977<br>( $b_2$ ); 438 ( $b_2$ )   | -2146                    | [18, 65]                   |
|                      | 1        | $A^3A''$ | (16700)                  | 3     | $C_{S''}$ ; $r_e(CO) = 1.172 \text{ \AA}$ ; $r_e(CC) = 1.466 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(CH_{cis}) = 1.078 \text{ \AA}$ ; $r_e(CH_{trans}) = 1.074$<br>$\text{ \AA}$ ; $\angle HCC = 120.0^\circ$ ; $\angle CCO = 129.25^\circ$  | $1.009 \cdot 10^4$   | 3300 ( $a'$ ); 3200 ( $a'$ ); 2093 ( $a'$ ); 1554 ( $a'$ );<br>1158 ( $a'$ ); 1027 ( $a'$ ); 508 ( $a'$ ); 680 ( $a''$ );<br>396 ( $a''$ )   |                          |                            |
|                      | 1        | $B^1A''$ | (19000)                  | 1     | $C_{S''}$ ; $r_e(CO) = 1.174 \text{ \AA}$ ; $r_e(CC) = 1.462 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(CH_{cis}) = 1.077 \text{ \AA}$ ; $r_e(CH_{trans}) =$<br>1.073 $\text{ \AA}$ ; $\angle H_{cis}CC = 119.0^\circ$ ;<br>$\angle H_{trans}CC = 120.0^\circ$ ; $\angle CCO = 129.8^\circ$ | $1.001 \cdot 10^3$   | 3310 ( $a'$ ); 3220 ( $a'$ ); 2108 ( $a'$ ); 1556 ( $a'$ );<br>1189 ( $a'$ ); 1052 ( $a'$ ); 509 ( $a'$ ); 1389 ( $a''$ );<br>483 ( $a''$ )  |                          |                            |
| $C_2H_5OH$           | 1        | $X^1A'$  | 0                        | 1     | $r_0(CC) = 1.5297 \text{ \AA}$ ; $r_0(CO) = 1.4247 \text{ \AA}$ ;<br>$r_0(CH) = 1.0936 \text{ \AA}$ ; $r_0(OH) = 1.9451 \text{ \AA}$ и<br>т. д.   | $2.227 \cdot 10^5$   | 419; 801; 884.6; 1032.6; 1062.1; 1089.2;<br>1241.3; 1270; 1393.7; 1430; 1445.1;<br>1462.8; 1490.2; 2900.5; 2939.6; 2953.5;<br>2985.4; 2995.6; 3658.6; для $CH_3$ :<br>$V_0 = 1240 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{пр} = 4.372 \cdot 10^{-40}$ ;<br>$\sigma_m = n_m = 3$ ; для OH: $V_0 = 357 \text{ см}^{-1}$ ;<br>$I_{пр} = 1.219 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = 1$ ; $n_m = 3$ | -3182.5                  | [11, 65, 74, 75,<br>94]    |
| $CH_3OCH_3$          | 2        | $X^1A_1$ | 0                        | 1     | $C_{2v}$ ; $r_e(CO) = 1.410 \text{ \AA}$ ; $r_e(CC) = 1.316 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(CH) = 1.096 \text{ \AA}$ ; $\angle COC = 111.7^\circ$ ;<br>$\angle HCH = 109.5^\circ$  | $1.705 \cdot 10^5$   | 160; 270; 413; 929; 1053; 1122; 1242;<br>1291 (3); 1440 (3); 1448 (1); 1456 (1);<br>2889 (3)   | -3132                    | [2, 4, 65, 74,<br>75, 244] |
| $HCOOH$              | 1        | $X^1A$   | 0                        | 1     | цис-форма; $C_S$ ; $r(CH) = 1.097 \text{ \AA}$ ;<br>$r(C=O) = 1.228 \text{ \AA}$ ; $r(C-O) = 1.317 \text{ \AA}$ ;<br>$r(OH) = 0.974 \text{ \AA}$ ; $\angle OCO = 125.0^\circ$ ;<br>$\angle HCO = 124.6^\circ$ ; $\angle COH = 106.8^\circ$                              | $6.0726 \cdot 10^4$  | 625; 636; 1033; 1105; 1229; 1387; 1770;<br>2943; 3570  | -2008.4                  | [2, 4, 11, 65]             |
|                      | 1        | $X^1A$   | 1365                     | 1     | транс-форма; $C_S$ ; $r(CH) = 1.105 \text{ \AA}$ ;<br>$r(C=O) = 1.195 \text{ \AA}$ ; $r(C-O) = 1.352 \text{ \AA}$ ;<br>$r(OH) = 0.956 \text{ \AA}$ ; $\angle OCO = 122.1^\circ$ ;<br>$\angle HCO = 114.6^\circ$ ; $\angle COH = 109.7^\circ$                            | $5.6866 \cdot 10^4$  | 472.7; 685.8; 1023.5; 1190; 1205; 1374;<br>1789; 2881; 3633  |                          |                            |
| $HCOO^-$             | 2        | $X^1A$   | 0                        | 1     | $C_{2v}$ ; $r_e(CH) = 1.129 \text{ \AA}$ ; $r_e(CO) = 1.253 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle OCO = 130.3^\circ$  | $2.4314 \cdot 10^4$  | 732 ( $a_1$ ); 1327 ( $a_1$ ); 2688 ( $a_1$ ); 1047 ( $b_1$ );<br>1374 ( $b_2$ ); 1636 ( $b_2$ )   | (-1668)                  | [40, 65]                   |

Окончание табл. 3

| Частица                         | $\sigma$ | Терм                            | $T_e$ , см <sup>-1</sup> | $P_i$ | Параметры геометрии   | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$ ,<br>г <sup>3</sup> см <sup>-6</sup> или $B$ (для<br>линейных частиц) | Частоты колебаний $\nu_j$ , см <sup>-1</sup> ( $g_j$ )   | $\Delta H$ ,<br>кДж/моль | Литературный<br>источник |
|---------------------------------|----------|---------------------------------|--------------------------|-------|---|--|--|--------------------------|--------------------------|
| NH <sub>2</sub> OH              | 1        | X <sup>1</sup> A                | 0                        | 1     | C <sub>S</sub> (транс); $r_e(\text{OH}) = 0.962 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NH}) = 1.016 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{NO}) = 1.453 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{NOH} = 101.4^\circ$ ; $\angle \text{HNO} = 107.1^\circ$ ;<br>$\angle \text{HNH} = 103.3^\circ$   | 4.878 · 10 <sup>3</sup>  | 895.2 ( $a'$ ); 1115.5 ( $a'$ ); 1353.3 ( $a'$ );<br>1604.5 ( $a'$ ); 3294.3 ( $a'$ ); 3650 ( $a'$ ); 1294.5<br>( $a'$ ); 3358.8 ( $a'$ ); $V_0 = 2520 \text{ см}^{-1}$ ;<br>$I_{\text{пр}} = 1.00 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = 1$ ; $n_m = 2$                                | -1419                    | [45, 61, 134]            |
| NH <sub>3</sub> OH <sup>+</sup> | 1        | X <sup>1</sup> A                | 0                        | 1     | C <sub>S</sub> (изоэл. CH <sub>3</sub> OH); $r_e(\text{NH}_1) = 1.029 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NH}_2) = 1.031 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{NO}) = 1.407 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{OH}) = 0.972 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{H}_1\text{NO} = 104.8^\circ$ ;<br>$\angle \text{HCH} = 112.2^\circ$ ; $\angle \text{NOH} = 106.3^\circ$ | 7.359 · 10 <sup>3</sup>  | 963 ( $a'$ ); 1093.6 ( $a'$ ); 1130.5 ( $a'$ ); 1401<br>( $a'$ ); 1509 ( $a'$ ); 1553.5 ( $a'$ ); 1554.5 ( $a'$ );<br>3149 ( $a'$ ); 3218 ( $a'$ ); 3243 ( $a'$ ); 3504 ( $a'$ );<br>$V_0 = 700 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{пр}} = 1.00 \cdot 10^{40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$ | -909                     | [45]                     |
| NCO                             | 1        | X <sup>2</sup> Π <sub>3/2</sub> | 0                        | 2     | линейная; C <sub>∞v</sub> <sup>+</sup><br>$r_e(\text{NC}) + r_e(\text{CO}) \leq 2.408 \text{ \AA}$  | 0.389516   | 488.8; 534.1; 1275; 1922   | -1306                    | [4, 11, 68]              |
|                                 | 1        | <sup>2</sup> Π <sub>1/2</sub>   | 95.6                     | 2     | то же   | то же  | 533.0; 574.7; 1275; 1922   |                          |                          |
|                                 | 1        | A <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>   | 22754                    | 2     | линейная; C <sub>∞v</sub> <sup>+</sup><br>$r_e(\text{NC}) + r_e(\text{CO}) \leq 2.369 \text{ \AA}$  | 0.4021   | 680.8 (2); 1289.3; 2338  |                          |                          |
| NCO <sup>-</sup>                | 1        | X <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>   | 0                        | 1     | линейная; C <sub>∞v</sub> <sup>-</sup> ; $r_0(\text{NC}) = 1.17 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{CO}) = 1.26 \text{ \AA}$   | 0.3811   | 1182; 576 (2); 2124  | -1654                    | [68, 214]                |
| HNCO                            | 1        | X <sup>1</sup> A'               | 0                        | 1     | плоская; C <sub>S</sub> ; $r_e(\text{NH}) = 1.003 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NC}) = 1.215 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{NH}) = 1.163 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HNC} = 123.3^\circ$ ; $\angle \text{NCO} = 172.2^\circ$  | 5.782 · 10 <sup>3</sup>  | 576; 657; 778; 1330; 2268; 3534  | -1754                    | [78]                     |
| HNCO <sup>+</sup>               | 1        | X <sup>2</sup> A''              | 0                        | 2     | плоская; C <sub>S</sub> ; $r_e(\text{NH}) = 1.033 \text{ \AA}$ ;<br>$r_e(\text{NC}) = 1.292 \text{ \AA}$ ; $r_e(\text{NH}) = 1.137 \text{ \AA}$ ;<br>$\angle \text{HNC} = 118^\circ$ ; $\angle \text{NCO} = 170^\circ$  | 7.630 · 10 <sup>3</sup>  | 489; 496; 907; 1050; 2020; 3222  | -634                     | [229]                    |

Таблица 4. Водородосвязанные димеры. Обозначения:  $E_{\text{отн}}$  — относительные энергии ( $\text{см}^{-1}$ ) двух или более различных форм;  $\Delta H_{\text{dтm}}$  — энергия димеризации

| Частица   | $\sigma$ | $E_{\text{отн}}, \text{см}^{-1}$ | Параметры геометрии   | $I A' B' C' \cdot 10^{12,20}$ | Частоты колебаний $\nu, \text{см}^{-1}$ ( $g_f$ )  | $\Delta H_{\text{dтm}}, \text{кДж/моль}$    | Литературный источник                                       |
|---|----------|----------------------------------|---|-------------------------------|--|---|---|
| $(\text{NH}_3)_2$                               | 1        | 0                                | $C_S$ (Н-связь близка к линейной); $R(\text{N}..N) = 3.30 \text{ \AA}$ ; $\alpha = 13.75^\circ$ ; $\beta = 82.0^\circ$  | $(2.006 \cdot 10^5)$          | 121; 137; 166; 293; 444; 996.4; 1006.4; 1620 (2); 1628; 1672; 3300; 3327; 3400; 3428 (2); 3434; $V = 300 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 2.5 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 1$                   | $11.3 \pm 0.8 (D_e)$                        | [71, 88, 108, 124, 211]                                     |
| $\text{N}_2\text{H}_7^+$                        | 1        | $\approx 70$                     | $C_{2h}$ (циклич. Н-связь); $R(\text{N}..N) = 3.20 \text{ \AA}$ ; $\alpha = \beta = 42.6^\circ$   | $(1.355 \cdot 10^5)$          | 296 (2); 497; 533; 1496; 1625 (2); 1658; 1743 (2); 1778 (2); 2900; 3300 (2); 3350 (2); 3430; 3450; $V = 100 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 2.65 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$ (частоты РМЗ) | 110.5 ( $D_0$ )                             | [72, 103]   |
| $(\text{H}_2\text{O})_2$                        | 1        | 0                                | $C_S$ (Н-связь близка к линейной); $R(\text{O}..O) = 2.912 \text{ \AA}$ ; $R(\text{OH}) = 0.964 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{OON} = 5.5^\circ$ ; $\alpha = 124.4^\circ$   | $(6.48 \cdot 10^4)$           | 145; 157; 186; 354; 645; 1600; 1625; 3585; 3650; 3724; 3742; $V = 100 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 1.0 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = 1$ ; $n_m = 2$  | 21.0 ( $D_e$ );<br>13.8 $\pm$ 0.4 ( $D_0$ ) | [71, 72, 81, 84, 88, 93, 114, 115, 204, 233, 234, 245, 247] |
| $\text{H}_5\text{O}_2^+$                        | 1        | 0                                | $C_S$ (Н-связь близка к линейной); $R(\text{O}..O) = 2.384 \text{ \AA}$ ; $R(\text{O}_1\text{H}) = 1.1384 \text{ \AA}$ ; $R(\text{O}_2\text{H}) = 1.2480 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{O}_1\text{HO}_2 = 175.4^\circ$ ; $\alpha = 134.3^\circ$               | $(4.30 \cdot 10^4)$           | 298; 470; 545; 549; 621; 805; 1514; 1593; 1737; 1777; 3530; 3609; 3650; 3684.5; $V = 150 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 1.2 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = 1$ ; $n_m = 2$                             | 132.6 ( $D_0$ )                             | [23, 38, 72, 88, 235, 242]                                  |
| $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$          | 1        | $\approx 100$                    | $C_2$ (Н-связь близка к линейной); $R(\text{O}_1\text{H}) = R(\text{O}_2\text{H}) = 1.194 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{O}_1\text{HO}_2 = 173.7^\circ$   | $(4.60 \cdot 10^4)$           | —  | —   | —   |
|   | 1        | 0                                | Н-связь близка к линейной; $R(\text{N}..O) = 2.972 \text{ \AA}$ ; $R(\text{OH}) = 0.974 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{NOH} = 5^\circ$  | $(1.06 \cdot 10^5)$           | 115; 181; 219; 443; 669; 1033.5; 1625; 1627; 1632; 3338; 3429; 3448; 3740; 3554; $V = 50 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 0.61 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$                                  | 15.0 ( $D_0$ )                              | [100, 126, 208]   |
| $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$        | 1        | 0                                | $C_S$ (Н-связь близка к линейной); $R(\text{N}..O) = 2.775 \text{ \AA}$ ; $R(\text{O}_1\text{H}) = 1.034 \text{ \AA}$   | $(1.03 \cdot 10^5)$           | 73; 134; 303; 405; 480; 1666 (2); 1679; 1732; 1792 (2); 3357; 3450; 3584; 3822; 3930; $V = 20 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 2.62 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$                             | 72.4 $\pm$ 1.7 ( $D_0$ )                    | [70, 227]   |
| $\text{CH}_3\text{OH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ | 1        | 0                                | $\text{H}_2\text{O}$ как донор протона (в охлажденной струе); $C_1$ ; $R(\text{O}..O) = 2.997 \pm 0.009 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{OHO} = 179 \pm 1^\circ$ ; <i>ab initio</i> ; $R(\text{CO}..H) = 1.911 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{OHO} = 170.6^\circ$ | $(1.32 \cdot 10^6)$           | 132; 177; 189; 273; 486; 618; 958; 1052; 1128; 1348; 1434; 1462; 1479; 1591; 2853; 2978; 3003; 3658; 3672; 3740; $V = 100 \text{ см}^3$ ; $I_{\text{пр}} = 0.8 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 1$  | 16.7 ( $D_e$ )                              | [28, 110, 186, 207]   |



Окончание табл. 4

| Частица                             | $\sigma$ | $E_{\text{отп}}, \text{см}^{-1}$ | Параметры геометрии   | $I_A I_B I_C \cdot 10^{120}$                   | Частоты колебаний $\nu_j, \text{см}^{-1} (g_j)$  | $\Delta H_{\text{dim}}, \text{кДж/моль}$ | Литературный источник                                  |
|-------------------------------------|----------|----------------------------------|---|--|--|--|--|
|                                     | 1        | очень мала                       | $\text{CH}_3\text{OH}$ как донор протона (в матрице $N_2$ ); $C_S$ ; $R(\text{O}..O) \approx 3.1 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{OHO} = 180^\circ$ ; <i>ab initio</i> ; $R(\text{OH}..O) = 1.959 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{OHO} = 171.6^\circ$                              | $(1.45 \cdot 10^6)$                            | 62; 96; 182; 206; 335; 606; 1048; 1103; 1280; 1380; 1448; 1601; 2835; 2970; 2982; 3536; 3627; 3714; $V = 70 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{пр}} = 1.53 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = 1$ ; $n_m = 2$      |  |  |
| $\text{НСООН}.. \text{NH}_3$        | 1        | 0                                | более плотный (из цис-изомера $\text{НСООН}$ )  | $(3.88 \cdot 10^6)$                            | 76; 139; 345.5; 364; 402; 667; 846.5; 997; 1041; 1131; 1258; 1421; 1621 (2); 1752; 2925; 3255; 3328; 3440 (2); $V = 70 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{пр}} = 2.57 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$ | (24.2) ( $D_0$ )                         | [177]; частоты РМЗ (масштабир.)                        |
|                                     | 1        | 1400                             | более рыхлый (из транс-изомера $\text{НСООН}$ )   | $(2.65 \cdot 10^6)$                            | 76; 79; 318; 348; 363; 723; 751; 1005; 1026; 1200; 1241; 1408; 1622 (2); 1779; 2871; 3328; 3369; 3434 (2); $V = 40 \text{ см}^{-1}$ ; $I_{\text{пр}} = 2.5 \cdot 10^{-40}$ ; $\sigma_m = n_m = 3$      | (23.0) ( $D_0$ ); 40.3 ( $D_2$ )         | [185]; частоты РМЗ (масштабир.)                        |
| $\text{НСООН}.. \text{H}_2\text{O}$ | 1        | 0                                | Циклич.; более плотный (из цис-изомера $\text{НСООН}$ ); $R(\text{C}(\text{O}).. \text{H}) = 2.21 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{CON} = 110.6^\circ$ ; $R(\text{O}(\text{O})\text{H}.. \text{O}) = 1.810 \text{ \AA}$ ; $\angle \text{OHO} = 160.8^\circ$                     | $(2.52 \cdot 10^6)$                            | 92; 131; 133; 319; 361; 426; 723; 764; 1039; 1125; 1261; 1413; 1581; 1752; 2941; 3467; 3643  |  |  |
|                                     | 1        | 1325                             | Циклич.; более рыхлый (из транс-изомера $\text{НСООН}$ )  | $(2.51 \cdot 10^6)$                            | 54; 55; 90.5; 277; 300; 371; 661; 726; 1026; 1193; 1216; 1394; 1585; 1782; 2877; 3605; 3653; 3745  | (26.5) ( $D_0$ )                         | [87]   |
| $\text{HCN}... \text{NH}_3$         | 1        | 0                                | Не линейн; $R_{\text{cm}} = 3.8466 \text{ \AA}$ ; $r(\text{N}... \text{H}) = 2.156 \text{ \AA}$ ; $\gamma(\text{HCN}) = 9.6^\circ$ ; $\chi(\text{NH}_3) = 20.4^\circ$ (РМЗ дает прочную линейную структуру $\text{C}_{3v}$ ); $r(\text{N}... \text{H}) = 1.773 \text{ \AA}$ | $3.518 \cdot 10^5$<br>(РМЗ $2.42 \cdot 10^5$ ) | 143.4 (2); 382 (2); 386; 831 (2); 1002; 1621.5 (2); 2087; 2966; 3328; 3439 (2) (приведены частоты для структуры РМЗ)   |  |  |
| $\text{HCN}... \text{H}_2\text{O}$  | 1        | 0                                | $\text{C}_S$ ( $\text{HCN}$ как донор протона, Н-связь близка к линейной); $R(\text{OC}) = 3.14...3.15 \text{ \AA}$ ; $\theta(\text{H}_2\text{O}) \approx 20^\circ$   | $(1.482 \cdot 10^5)$                           | 105; 110; 215; 314; 374; 761.5; 782; 1585; 2120; 3241; 3658; 3753  | (21.3) ( $D_0$ )                         | [86, 96]; $\text{H}_2\text{O}$ как донор протона [191] |

Полученные данные сведены в таблицы 1—4. Для атомов и атомарных ионов (табл. 1) указаны характеристики только нескольких нижних термов, вносящих заметный вклад в электронную статистическую сумму в интервале температур от 0 до 20000 К. Энергии термов даны в  $\text{см}^{-1}$ , энтальпии образования частиц из атомов и электронного газа  $\Delta H = \sum D_0$  — в кДж/моль. ( $\Delta H > 0$  соответствует реакции с поглощением энергии, а  $\Delta H < 0$  — с выделением энергии). При использовании атомной системы единиц перевод кДж/моль в кельвины осуществляется умножением на коэффициент  $R^{-1} = 0.120273$ , где  $R = 8.31441 \text{ Дж}/(\text{К} \cdot \text{моль})$  — универсальная газовая постоянная. Для многоатомных молекул (табл. 3) и кластеров (табл. 4), помимо колебательных и вращательных констант, указаны наиболее существенные геометрические характеристики. Для водородосвязанных димеров (табл. 4) вместо  $\Delta H$  приведены энергии димеризации  $E_{\text{dim}}$ , в качестве которых взяты величины  $D_0$  или  $D_e$ , соответствующие разрыву только водородной связи.

Помимо термодинамических расчетов равновесного состава, собранные спектроскопические константы могут найти разнообразное применение в астрофизике, например для оценки энергий и идентификации ровибронных термов молекул в спектроскопии холодных и нагретых облаков в межзвездной среде, для определения характеристических полос поглощения и излучения в фотосферах различных звезд и т. д.

1. Введенский А. А., Масалитинова Т. Н. Термодинамические функции гидразина и его метилпроизводных // Журн. физ. химии.—1966.—40, вып. 6.—С. 1372—1377.
2. Вилков Л. В., Матрюков В. С., Садова Н. И. Определение геометрического строения свободных молекул. — Л.: Химия, 1978.—224 с.
3. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. — М.: Изд-во иностр. лит, 1949.—403 с.
4. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. — М.: Мир, 1969.—772 с.
5. Гуцев Г. Л. Структура анионов галогенов  $X_2^-$  ( $X = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ), интергалогена  $\text{FCl}^-$  и  $\text{H}_2^-$  // Журн. неорган. химии.—1992.—37, вып. 11.—С. 2454—2461.
6. Захожай В. А., Котелевский С. И., Педаш Ю. Ф. и др. Особенности молекулярного состава атмосфер субзвезд // Кинематика и физика небес. тел. —2001.—17, № 1.—С. 3—16.
7. Захожай В. А., Писаренко А. И., Яценко А. А. и др. Химическое равновесие в атмосферах водородно-гелиевых субзвезд // Кинематика и физика небес. тел.—1999.—15, № 5.—С. 516—522.
8. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. — М.: Энергоатомиздат, 1980.—240 с.
9. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Параметры атомов и атомных ионов. — М.: Энергоатомиздат, 1986.—344 с.
10. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. — М.: Высш. шк., 1982.—455 с.
11. Термодинамические свойства индивидуальных веществ / Под ред. В. П. Глушко. — М.: Наука, 1978.—Т. I, Кн. 1.—496 с.; Кн. 2.—328 с.; —1979.—Т. II, Кн. 1.—440 с.; Кн. 2.—344 с.
12. Хьюбер К.-П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул. — М.: Мир, 1984.—Ч. 1.—408 с.; Ч. 2.—368 с.
13. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону / Гурвич Л. В., Карачевцев Г. В., Кондратьев Ю. А. и др. — М.: Наука, 1974.—351 с.
14. Ackerman J., Hogreve H. A CI study of the ground state potential energy surface of  $\text{He}_3^+$  // Mol. Phys.—1989.—68, N 2.—P. 279—294.
15. Adamowicz L. Electron affinities of small linear carbon clusters. Coupled cluster calculations with first-order correlation orbitals // J. Chem. Phys.—1990.—94, N 2.—P. 1241—1246.
16. Adamowicz L., Pluta T. Metastable  $\text{He}_2^-$  ions formed by two-electron attachment to the excited  $\text{He}_2^+$  // Phys. Rev. A.—1991.—44, N 5.—P. 2860—2867.
17. Adamowicz L., Pluta T. Numerical Hartree-Fock study on the Rydberg-like excitations of  $\text{He}_2^-$  // Chem. Phys. Lett.—1991.—179, N 5-6.—P. 517—523.

18. Allen W. D., Schaefer H. F. *Ab initio* studies of the low-lying states of ketene // J. Chem. Phys.—1986.—**84**, N 4.—P. 2212—2225.
19. Amano T. High-resolution infrared spectroscopy of molecular ions // Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A.—1988.—**A324**, N 1578.—P. 163—178.
20. Andersen T., Andersen L. H., Bjerre N., et al. Lifetime measurements of  $\text{He}_2^-$  by means of a heavy-ion storage rings // J. Phys. B.—1994.—**27**, N 6.—P. 1135—1142.
21. Andersen T., Bertelsen K. A., Raarup M. K., et al. Long-lived states of  $\text{N}_2^-$ : Formation, lifetimes, and identity // Phys. Rev. A.—1999.—**60**, N 5.—P. 3627—3632.
22. Aoki K., Ikuta S. Stability ladder of various  $\text{HC}_2\text{N}$  conformers and their excitation energies // J. Chem. Phys.—1993.—**99**, N 5.—P. 3809—3814.
23. Auer A. A., Helgaker T., Klopper W. Accurate molecular geometries of the protonated water dimer // Phys. Chem. Chem. Phys.—2000.—**2**, N 10.—P. 2235—2238.
24. Baccarelli I., Gianturco F. A., Schneider F. Stability and fragmentation of protonated helium dimers from *ab initio* calculations of their potential energy surfaces // J. Phys. Chem. A.—1997.—**101**, N 34.—P. 6054—6062.
25. Bae Y. K., Coggiola M. J., Peterson J. R. Search for molecular hydrogen(1-) ( $\text{H}_2^-$ ), triatomic hydrogen(1-) ( $\text{H}_3^-$ ), and other metastable negative ions // Phys. Rev. A.—1984.—**29**, N 5.—P. 2888—2890.
26. Bae Y. K., Coggiola M. J., Peterson J. R. Observation of the molecular helium negative ion  $\text{He}_2^-$  // Phys. Rev. Lett.—1984.—**52**, N 9.—P. 747—750.
27. Baer A., Grieser M., Knoll L., et al. Ground state of  $\text{CH}_2^+$ : Experimental aspects and theoretical implications // Phys. Rev. A.—1999.—**59**, N 3.—P. 1865—1868.
28. Bakkas N., Bouteiller Y., Loutellier A., et al. The water-methanol complexes. I. A matrix isolation study and *ab initio* calculation on the 1-1 species // J. Chem. Phys.—1993.—**99**, N 5.—P. 3335—3342.
29. Balkova A., Bartlett R. On the singlet-triplet separation in methylene: A critical comparison of single- versus two-determinant (generalized valence bond) coupled cluster theory // J. Chem. Phys.—1994.—**102**, N 18.—P. 7116—7123.
30. Bauschlicher C. W., Langhoff S. R., Taylor P. R., et al. Benchmark full configuration-interaction calculations on HF and  $\text{NH}_2$  // J. Chem. Phys.—1986.—**85**, N 3.—P. 1469—1474.
31. Begemann M. H., Saykally R. J. A study of the structure and dynamics of the hydronium ion by high-resolution IR laser spectroscopy. I. The  $\nu_3$  band of  $\text{H}_3^{16}\text{O}^+$  // J. Chem. Phys.—1985.—**82**, N 8.—P. 3570—3579.
32. Belyaev A. K., Tiukanov A. S. Diatomics-in-molecules study of the ground and excited states of  $\text{H}_3^-$  // Chem. Phys.—1997.—**220**, N 1-2.—P. 43—52.
33. Belyaev A. K., Tiukanov A. S. On nonadiabatic effects in  $\text{H}^- + \text{H}_2$  collision // Chem. Phys. Lett.—1999.—**302**, N 1-2.—P. 65—72.
34. Ben-Amor N., Evangelisti S., Maynau D., Rossi E. Benchmark full-CI calculation on  $\text{C}_2\text{H}_2$ : comparison with  $(\text{SC})^2\text{-CI}$  and other truncated-CI approaches // Chem. Phys. Lett.—1998.—**288**, N 2-4.—P. 348—355.
35. Bendazzoli G. L., Evangelisti S., Passarini F. Is  $\text{HeH}^-$  a stable system? // Chem. Phys.—1997.—**215**, N 2.—P. 217—226.
36. Berkowitz J., Ellison G. B., Gutman D. Three methods to measure RH bond energies // J. Phys. Chem.—1994.—**98**, N 11.—P. 2744—2765.
37. Beyer M., Savchenko E. V., Niedner-Schatteburg G., Bondybey V. E. Trihydrogen cation solvated by rare gas atoms:  $\text{Rg}_n\text{H}_3^+$  // J. Chem. Phys.—1999.—**110**, N 24.—P. 11950—11957.
38. Bosch E., Moreno M., Lluch J. M. *Ab initio* study on the effect of attaching a hydrogen molecule to the  $(\text{H}_5\text{O}_2^+)$  ion cluster // J. Chem. Phys.—1992.—**97**, N 9.—P. 6469—6471.
39. Botschwina P. An *ab initio* calculation of the equilibrium geometry and barrier height to inversion of  $\text{H}_3\text{O}^+$  and the proton affinity of  $\text{H}_2\text{O}$  // J. Chem. Phys.—1986.—**84**, N 11.—P. 6523—6524.
40. Botschwina P. Spectroscopic properties of polyatomic cations and anions from *ab initio* calculations // Ion and Cluster Ion Spectroscopy and Structure / Ed. by J. P. Maier. — Amsterdam: Elsevier, 1989.—P. 59—108.
41. Botschwina P. The equilibrium geometry and spectroscopic constants of cyanogen calculated by the single, double, and perturbative triple excitation coupled-cluster method // J. Chem. Phys.—1993.—**99**, N 8.—P. 6217—6218.
42. Botschwina P. The equilibrium geometry and some spectroscopic constants of  $\text{C}_5$  from large-scale *ab initio* calculations // J. Chem. Phys.—1994.—**101**, N 1.—P. 853—854.
43. Botschwina P., Flagge J. *Ab initio* vibration-rotation coupling constants and the equilibrium geometries of  $\text{NCCN}$  and  $\text{CNCN}$  // Chem. Phys. Lett.—1991.—**180**, N 6.—P. 589—593.
44. Botschwina P., Seeger S., Flagge J. On the bending vibration of  $\text{NH}_2^-$ : An *ab initio* study // J. Chem. Phys.—1993.—**99**, N 10.—P. 8349—8350.
45. Boulet P., Gilardini F., Weber J., et al. Theoretical study of interstellar hydroxylamine chemistry: Protonation and proton transfer mediated by  $\text{H}_3^+$  // Chem. Phys.—1999.—**244**,

- N 2-3.—P. 163—174.
46. Brinck T., Lee H.-N., Jonsson M. Quantum chemical studies on the thermochemistry of alkyl and peroxy radicals // *J. Phys. Chem. A.*—1999.—**103**, N 35.—P. 7094—7104.
  47. Brommer M., Weis B., Follmeg B., et al. Theoretical spin-rovibronic  ${}^2A_1(\Pi_u) - {}^2B_1$  spectrum of the  $H_2O^+$ ,  $HDO^+$ , and  $D_2O^+$  cations // *J. Chem. Phys.*—1993.—**98**, N 7.—P. 5222—5234.
  48. Burk P., Koppel I. A., Koppel I., et al. Critical test of performance of B3LYP functional for prediction of gas-phase acidities and basicities // *Chem. Phys. Lett.*—2000.—**323**, N 5-6.—P. 482—489.
  49. Burrows A., Hubbard W. B., Lunine J. I. Theoretical models of very low mass stars and brown dwarfs // *Astrophys. J.*—1989.—**345**, N 2.—P. 939—958.
  50. Burrows A., Liebert J. The science of brown dwarfs // *Rev. Mod. Phys.*—1993.—**65**—P. 301—336.
  51. Burrows A., Sharp C. M. Chemical equilibrium abundances in brown dwarfs and extrasolar giant planet atmospheres // *Astrophys. J.*—1998.—**512**, N 2.—P. 843—863.
  52. Bylicki M., Pestka G. Bound states of  $He^-$  // *J. Phys. B.*—1996.—**29**, N 9.—P. L353—L359.
  53. Carrington A., Pyne C. H., Knowles P. J. Microwave electronic spectrum of the  $He_2^+$  ion // *J. Chem. Phys.*—1995.—**102**, N 15.—P. 5979—5988.
  54. Carter S., Mills I. M., Handy N. C. The equilibrium structure of HCN // *J. Chem. Phys.*—1992.—**97**, N 2.—P. 1606—1607.
  55. Cencek W., Rychlewski J. Many-electron explicitly correlated Gaussian functions. II. Ground state of the helium molecular ion  $He_2^+$  // *J. Chem. Phys.*—1995.—**102**, N 6.—P. 2533—2538.
  56. Cencek W., Rychlewski J. Benchmark calculations for  $He_2^+$  and LiH molecule using explicitly correlated Gaussian functions // *Chem. Phys. Lett.*—2000.—**320**, N 5-6.—P. 549—552.
  57. Cerofolini G. F., Re N. Studies in the acid-base theory. The base strength of amines // *Chem. Phys. Lett.*—2001.—**339**, N 3-4.—P. 375—379.
  58. Chalasinski G., Kendall R. A., Simons J. *Ab initio* studies of the structure and energetics of the  $H^-(H_2)$  complex // *J. Phys. Chem.*—1987.—**91**, N 24.—P. 6151—6158.
  59. Chao J. S.-Y., Falcetta M. F., Jordan K. D. Application of the stabilization method to the  $N_2^-$  ( $1^2\Pi_g$ ) and  $Mg^-$  ( $1^2P$ ) temporary anion states // *J. Chem. Phys.*—1990.—**93**, N 2.—P. 1125—1135.
  60. Charnley S. B., Tielens A. G. G. M., Kress M. E. Organic molecules in oxygen-rich circumstellar envelopes: Methanol and hydrocarbons // *Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.*—1995.—**274**, N 3.—P. L53—L57.
  61. Chung-Phillips A., Jebber K. A. *Ab initio* studies of critical conformations in ethane, methylamine, methanol, hydrazine, hydroxylamine, and hydrogen peroxide // *J. Chem. Phys.*—1995.—**102**, N 18.—P. 7080—7087.
  62. Cui Q., Morokuma K. *Ab initio* molecular orbital studies on the structure, energies, and photodissociation of the electronic excited states of  $C_2H$  // *J. Chem. Phys.*—1998.—**108**, N 2.—P. 626—636.
  63. Curtiss L. A., Kock D., Pople J. A. Energies of  $CH_2OH$ ,  $CH_3O$ , and related compounds // *J. Chem. Phys.*—1991.—**95**, N 6.—P. 4040—4043.
  64. Curtiss L. A., Raghavachari K., Pople J. A. Gaussian-2 theory using reduced Moller-Plesset orders // *J. Chem. Phys.*—1993.—**98**, N 2.—P. 1293—1298.
  65. Curtiss L. A., Raghavachari K., Redfern P. C., Pople J. A. Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of enthalpies of formation // *J. Chem. Phys.*—1997.—**106**, N 3.—P. 1063—1079.
  66. Curtiss L. A., Raghavachari K., Redfern P. C., et al. Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms // *J. Chem. Phys.*—1998.—**109**, N 18.—P. 7764—7776.
  67. Curtiss L. A., Raghavachari K., Trucks G. W., Pople J. A. Gaussian-2 theory for molecular energies of first- and second-row compounds // *J. Chem. Phys.*—1991.—**94**, N 11.—P. 7221—7230.
  68. Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K., Pople J. A. Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of ionization potentials and electron affinities // *J. Chem. Phys.*—1998.—**109**, N 1.—P. 42—55.
  69. Dateo C. E., Dupuis M., Lester W. A. *Ab initio* study of cyanogen: The  $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ ,  $\tilde{a}^3\Sigma_u^+$ ,  $\tilde{B}^1\Delta_u$ , and  $\tilde{C}^1\Pi_u$  states // *J. Chem. Phys.*—1985.—**83**, N 1.—P. 265—272.
  70. Deakyne C. A. Filling of solvent shells about ions. 2. Isomeric clusters of  $(H_2O)_n (NH_3)H^+$  // *J. Phys. Chem.*—1986.—**90**, N 25.—P. 6625—6632.
  71. Del Bene J. E. Basis set and correlation effects on computed hydrogen bond energies of the dimers  $(AH_n)_2$ :  $AH_n = NH_3, OH_2, \text{ and } FH$  // *J. Chem. Phys.*—1987.—**86**, N 4.—P. 2110—2113.
  72. Del Bene J. E., Frisch M. J., Pople J. A. Molecular orbital study of the complexes  $(AH_n)_2H^+$  formed from  $NH_3, OH_2, FH, PH_3, SH_2, \text{ and } ClH$  // *J. Phys. Chem.*—1985.—**89**, N 17.—P. 3669—3674.
  73. De Rose E. F., Gislason E. A., Sabelli N. H., Sluis K. M. A theoretical investigation of  ${}^2\Sigma_u^+$

- resonance states of  $\text{H}_2^-$  // J. Chem. Phys.—1987.—88, N 8.—P. 4878—4883.
74. DeTar D. L. F. Thermochemical values of oxygen-containing compounds from ab initio calculations. 1. Enthalpies of formation of ethers and alcohols // J. Phys. Chem. A.—1999.—103, N 35.—P. 7055—7067.
  75. DeTar D. L. F. Thermochemical values of oxygen-containing compounds from ab initio calculations. 2. High accuracy enthalpies of formation of alcohols and ethers // J. Phys. Chem. A.—2001.—105, N 10.—P. 2073—2084.
  76. Douay M., Nietmann R., Bernath P. F. The discovery of two new infrared electronic transitions of  $\text{C}_2$ :  $B^1\Delta_g - A^1\Pi_u$  and  $B'^1\Sigma_g^+ - A^1\Pi_u$  // J. Mol. Spectrosc.—1988.—131, N 2.—P. 261—271.
  77. Dyczmons V. Six structures of the hydrazine dimer // J. Phys. Chem.—2000.—104, N 35.—P. 8263—8269.
  78. East A. L. L., Johnson C. S., Allen W. D. Characterization of the  $\tilde{X}^1A'$  state of isocyanic acid // J. Chem. Phys.—1993.—98, N 2.—P. 1299—1328.
  79. East A. L. L., Radom L. *Ab initio* statistical thermodynamical models for the computation of third-law entropies // J. Chem. Phys.—1997.—106, N 16.—P. 6655—6674.
  80. Ewig C. S., Tellinghuisen J. *Ab initio* study of the electronic states of  $\text{O}_2^-$  in *vacuo* and in simulated ionic solids // J. Chem. Phys.—1991.—95, N 2.—P. 1097—1106.
  81. Famulari A., Raimondi M., Sironi M., Gianinetti E. *Ab initio* MO-VB study of water dimer // Chem. Phys.—1998.—232, N 3.—P. 289—298.
  82. Farizon M., Chermette H., Farizon-Mazuy B. Structure and energetics of hydrogen clusters. Structures of  $\text{H}_{11}^+$  and  $\text{H}_{13}^+$ . Vibrational frequencies and infrared intensities of the  $\text{H}^+_{2n+1}$  clusters ( $n = 2-6$ ) // J. Chem. Phys.—1992.—96, N 2.—P. 1325—1332.
  83. Farizon M., Farizon-Mazuy B., de Castro F. N. V., Chermette H. *Ab initio* structure calculations of hydrogen ionic clusters // Chem. Phys. Lett.—1991.—177, N 4-5.—P. 451—457.
  84. Feller D. Application of systematic sequences of wave functions to the water dimer // J. Chem. Phys.—1992.—96, N 8.—P. 6104—6114.
  85. Feller D., Dixon D. A. Predicting the heats of formation of model hydrocarbons up to benzene // J. Phys. Chem. A.—2000.—104, N 13.—P. 3048—3056.
  86. Fillery-Travis A. J., Legon A. C., Willoughby L. C. Characterization by rotational spectroscopy of a hydrogen-bonded dimer formed between  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{HCN}$  // Chem. Phys. Lett.—1983.—94, N 4.—P. 369—372.
  87. Fraser G. T., Leopold K. R., Nelson D. D., et al. The rotational spectrum and structure of  $\text{NH}_3\text{-HCN}$  // J. Chem. Phys.—1984.—80, N 7.—P. 3073—3077.
  88. Frisch M. J., Del Bene J. E., Binkley J. S., Schaefer H. F. Extensive theoretical studies of the hydrogen-bonded complexes  $(\text{H}_2\text{O})_2$ ,  $(\text{H}_2\text{O})_2\text{H}^+$ ,  $(\text{HF})_2$ ,  $(\text{HF})_2\text{H}^+$ ,  $\text{F}_2\text{H}^+$ , and  $(\text{NH}_3)_2$  // J. Chem. Phys.—1986.—84, N 4.—P. 2279—2289.
  89. Frye D., Preiskorn A., Lie G.-C., Clementi E. Gaussian functions in hylleraas-CI calculations. V. An accurate *ab initio* hydrogen triatomic monopositive ion potential energy surface // J. Chem. Phys.—1990.—92, N 8.—P. 4948—4955.
  90. Furlan R. J., Bent G., Russek A. *Ab initio* dihydrohelium ( $1+$ ) ( $\text{HeH}_2^+$ ) energy surfaces and nonadiabatic coupling between them // J. Chem. Phys.—1990.—93, N 9.—P. 6676—6684.
  91. Gauss J., Stanton J. F. The equilibrium structure of benzene // J. Phys. Chem. A.—2000.—104, N 13.—P. 2865—2868.
  92. Gerratt J., Manley J. C., Raimondi M. Spin-coupled VB theory of molecular electronic structure. Ground and low-lying  $^1\Sigma^+$  states of  $\text{CH}^+$  // J. Chem. Phys.—1985.—82, N 4.—P. 2014—2021.
  93. Goldman N., Fellers R. S., Leforestier C., Saykally R. J. Water dimers in the atmosphere: Equilibrium constants for water dimerization from the VRT(ASP-W) potential surface // J. Phys. Chem. A.—2001.—105, N 3.—P. 515—519.
  94. Gonzalez L., Mo O., Yanez M. Density functional theory study on ethanol dimers and cyclic ethanol trimers // J. Chem. Phys.—1999.—111, N 9.—P. 3855—3861.
  95. Gonzalez-Alfonso E., Cernicharo J., Alcolca J., Orlandi M. A. Water vapour in circumstellar envelopes // Astron. and Astrophys.—1998.—334, N 3.—P. 1016—1027.
  96. Gutowsky H. S., Germann T. C., Augspurger J. D., Dykstra C. E. Structure and dynamics of the  $\text{H}_2\text{O-HCN}$  dimer // J. Chem. Phys.—1992.—96, N 8.—P. 5808—5816.
  97. Gutsev G. L., Bartlett R. J. Electron affinity of  $\text{NH}$ : A coupled-cluster and Hartree-Fock density-functional-theory study // Chem. Phys. Lett.—1997.—265, N 1-2.—P. 12—18.
  98. Gutsev G. L., Rozyczko P. B., Bartlett R. J. Does  $\text{N}_2^-$  exist? A coupled-cluster study // J. Chem. Phys.—1999.—110, N 11.—P. 5137—5139.
  99. Haberland H., Issendorf B. V., Frochtenicht R., Toennies J. P. Absorption spectroscopy and photodissociation dynamics of small helium cluster ions // J. Chem. Phys.—1995.—102, N 22.—P. 8773—8779.
  100. Herbine P., Dyke T. R. Rotational spectra and structure of the ammonia-water complex // J. Chem. Phys.—1985.—83, N 8.—P. 3768—3774.
  101. Hirst D. M. Excited states of the  $\text{CN}^+$  ion: an *ab initio* study // Mol. Phys.—1994.—82,

- N 2.—P. 359—368.
102. Hoper U., Botschwina P., Koppel H. Theoretical study of the Jahn-Teller effect in  $\tilde{X}^2E$  CH<sub>3</sub>O // J. Chem. Phys.—2000.—112, N 9.—P. 4132—4142.
  103. Ikuta S. Electron correlation effect on the geometries and energetics: Proton-bound ammonia dimer, (H<sub>2</sub>N-H—NH<sub>3</sub>)<sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1987.—87, N 3.—P. 1900—1901.
  104. Irikura K. K. Systematic errors in *ab initio* bond dissociation energies // J. Phys. Chem. A.—1998.—102, N 45.—P. 9031—9039.
  105. Jackels C. F. A potential-energy surface study of the <sup>2</sup>A<sub>1</sub> and low-lying dissociative states of the methoxy radical // J. Chem. Phys.—1985.—82, N 1.—P. 311—322.
  106. Jensen P., Rohlfing C. McM., Almløf J. Calculation of the complete-active-space self-consistent-field potential-energy surface, the dipole moment surfaces, the rotation-vibration energies, and the vibrational transition moments for C<sub>3</sub> ( $X^1\Sigma_g^+$ ) // J. Chem. Phys.—1992.—97, N 5.—P. 3399—3411.
  107. Jiang G., Wang H. Y., Zhu Z. H. Geometrical configurations of H<sub>4</sub><sup>+</sup> and the Jahn-Teller effect // Chem. Phys. Lett.—1998.—284, N 3-4.—P. 267—272.
  108. Jursic B. S. Computational study of water and ammonia dimers with density functional theory methods // THEOCHEM.—1998.—434.—P. 29—36.
  109. Jursic B. S. Density functional theory and complete basis set *ab initio* evaluation of proton affinity for some selected chemical systems // THEOCHEM.—1999.—487, N 1-2.—P. 193—203.
  110. Jursic B. S. Study of the water-methanol dimer with gaussian and complete basis set *ab initio*, and density functional theory methods // THEOCHEM.—1999.—466.—P. 203—209.
  111. Kalemos A., Mavridis A., Metropoulos A. An accurate description of the ground and excited states of CH // J. Chem. Phys.—1999.—111, N 21.—P. 9536—9548.
  112. Khan A., Jordan K. D. Theoretical potential energy curves and spectroscopic properties of the  $X^2\Sigma_u^+$  and  $A^2\Sigma_g^+$  states of He<sub>2</sub><sup>+</sup> // Chem. Phys. Lett.—1986.—128, N 4.—P. 368—371.
  113. Kim S. T., Lee J. S. *Ab initio* study of He<sub>2</sub>H<sup>+</sup> and Ne<sub>2</sub>H<sup>+</sup>: Accurate structure and energetics // J. Chem. Phys.—1999.—110, N 9.—P. 4413—4418.
  114. Kim J., Lee J. Y., Lee S., et al. Harmonic vibrational frequencies of the water monomer and dimer: Comparison of various levels of *ab initio* theory // J. Chem. Phys.—1995.—102, N 1.—P. 310—317.
  115. Kim K. S., Mhin B. J., Choi U.-S., Lee K. *Ab initio* studies of the water dimer using large basis sets: The structure and thermodynamic energies // J. Chem. Phys.—1992.—97, N 9.—P. 6649—6662.
  116. Kim K., Shavitt I., Del Bene J. E. Theoretical study of the di-imide (N<sub>2</sub>H<sub>2</sub>) molecule in ground and  $n \rightarrow \pi^*$  excited states // J. Chem. Phys.—1992.—96, N 10.—P. 7573—7579.
  117. Kirchner N. J., Bowers M. T. An experimental study of the formation and reactivity of ionic hydrogen clusters: The first observation and characterization of the even clusters H<sub>4</sub><sup>+</sup>, H<sub>6</sub><sup>+</sup>, H<sub>8</sub><sup>+</sup>, and H<sub>10</sub><sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1987.—86, N 3.—P. 1301—1310.
  118. Klopper W., van Duijneveldt-van de Rijdt J. G. C. M., van Duijneveldt F. B. Computational determination of equilibrium geometry and dissociation energy of the water dimer // Phys. Chem. Chem. Phys.—2000.—2, N 10.—P. 2227—2234.
  119. Knowles P. J., Murrell J. N. The structures and stabilities of helium cluster ions // Mol. Phys.—1996.—87, N 4.—P. 827—833.
  120. Koch W., Frenking G. The low-lying electronic states of protonated C<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1990.—93, N 11.—P. 8021—8028.
  121. Kolos W., Rychlewski J. Improved theoretical dissociation energy and ionization potential for the ground state of the hydrogen molecule // J. Chem. Phys.—1993.—98, N 5.—P. 3960—3967.
  122. Komihata N., Daudey J.-P., Malrieu J.-P. Diabatic research of resonant states in MO-CI calculations of negative ions // J. Phys. B.—1987.—20, N 17.—P. 4375—4391.
  123. Kristensen P., Pedersen U. V., Petrunin V. V., Andersen T. Binding energy of the metastable He<sup>-</sup> ion // Phys. Rev. A.—1997.—55, N 2.—P. 978—983.
  124. Kulkarni S. A., Pathak R. K. *Ab initio* investigations on neutral clusters of ammonia: (NH<sub>3</sub>)<sub>n</sub> ( $n = 2-6$ ) // Chem. Phys. Lett.—2001.—336, N 3-4.—P. 278—283.
  125. Kurosaki Y., Toshiyuki T. An *ab initio* molecular orbital study of even-membered hydrogen cluster ions H<sub>6</sub><sup>+</sup>, H<sub>8</sub><sup>+</sup>, H<sub>10</sub><sup>+</sup>, H<sub>12</sub><sup>+</sup>, and H<sub>14</sub><sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1998.—109, N 11.—P. 4327—4334.
  126. Latajka Z., Scheiner S. Structure, energetics, and vibrational spectrum of H<sub>3</sub>N···HOH // J. Phys. Chem.—1990.—94, N 1.—P. 217—221.
  127. Lee T. J., Rice J. E., Schaefer H. F. The infrared spectrum of the acetylene radical cation C<sub>2</sub>H<sub>2</sub><sup>+</sup>. A theoretical study using SCF, MCSCF, and CI methods // J. Chem. Phys.—1987.—86, N 5.—P. 3051—3053.
  128. Lee J. S., Secrest D. A calculation of the rotation-vibration states of He<sub>2</sub>H<sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1986.—85, N 11.—P. 6565—6575.
  129. Li Z., Rogers D. W., McLafferty F. J., et al. *Ab initio* calculations of enthalpies of

- hydrogenation, isomerization, and formation of cyclic C<sub>6</sub> hydrocarbons. Benzene isomers // J. Phys. Chem. A.—1999.—103, N 3.—P. 426—430.
130. Lin Y., Li C. D. Calculations of some weakly bound diatomic molecular negative ions // Phys. Rev. A.—1999.—60, N 3.—P. 2009—2014.
  131. Liu Di-J., Haese N. N., Oka T. Infrared spectrum of the  $\nu_2$  vibration-inversion band of H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1985.—82, N 12.—P. 5368—5372.
  132. Liu Di-J., Oka T. The calculated  $\nu_2$  (inversion) spectrum of H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1986.—84, N 3.—P. 1312—1316.
  133. Lodyga W., Kreglewski M., Makarewicz J. The inversion-torsion potential function for hydrazine // J. Mol. Spectrosc.—1997.—183, N 2.—P. 374—387.
  134. Luckhaus D. The rovibrational spectrum of hydroxylamine: A combined high resolution experimental and theoretical study // J. Chem. Phys.—1997.—106, N 20.—P. 8409—8426.
  135. Lundberg J. K., Field R. W., Sherrill C. D., et al. Acetylene: Synergy between theory and experiment // J. Chem. Phys.—1993.—98, N 11.—P. 8384—8391.
  136. Mahapatra S., Vetter R., Zuhrt Ch., et al. Bound states and time-dependent dynamics of the N<sub>2</sub>H<sup>+</sup> molecular ion in its ground electronic state. I. 2D treatment // J. Chem. Phys.—1997.—107, N 8.—P. 2930—2941.
  137. Mahapatra S., Vetter R., Zuhrt Ch., et al. Ground state potential energy surface, 3D time-dependent intramolecular dynamics and vibrational states of the N<sub>2</sub>H<sup>+</sup> molecular ion // Chem. Phys. Lett.—1998.—285, N 1-2.—P. 2930—2941.
  138. Marley M. S., Saumon D., Guillot T., et al. Atmospheric, evolutionary, and spectral models of the brown dwarf Gliese 229B // Science.—1996.—272, N 5270.—P. 1919—1921.
  139. Martin J. M. L. On the performance of correlation consistent basis sets for the calculation of total atomization energies, geometries, and harmonic frequencies // J. Chem. Phys.—1994.—100, N 11.—P. 8186—8193.
  140. Martin J. M. L. Very accurate *ab initio* binding energies — a comparison between empirical corrections and extrapolation methods // THEOCHEM.—1997.—398—399.—P. 135—144.
  141. Martin J. M. L. Spectroscopic quality *ab initio* potential curves for CH, NH, OH and HF. A convergence study // Chem. Phys. Lett.—1998.—292, N 4—6.—P. 411—420.
  142. Martin J. M. L., de Oliveira G. Towards standard methods for benchmark quality *ab initio* thermochemistry — W1 and W2 theory // J. Chem. Phys.—1999.—111, N 5.—P. 1843—1856.
  143. Martin J. M. L., Francois J. P., Gijbels R. On the geometrical structure of the C<sub>3</sub><sup>+</sup> cation — an *ab initio* study // J. Chem. Phys.—1990.—93, N 7.—P. 5037—5045.
  144. Martin J. M. L., Taylor P. R. Accurate *ab initio* total atomization energies of the C<sub>n</sub> clusters ( $n = 2—10$ ) // J. Chem. Phys.—1995.—102, N 20.—P. 8270—8273.
  145. Martin J. M. L., Taylor P. R. Accurate *ab initio* quartic force field for *trans*-HNNH and treatment of resonance polyads // Spectrochim. Acta Part A.—1997.—53A, N 8.—P. 1039—1050.
  146. Martin J. M. L., Taylor P. R. Benchmark quality total atomization energies of small polyatomic molecules // J. Chem. Phys.—1997.—106, N 20.—P. 8620—8623.
  147. Martin M. C<sub>2</sub> spectroscopy and kinetics // J. Photochem. Photobiol. A.—1992.—66, N 3.—P. 263—290.
  148. Matsuura M., Yamamura I., Murakami H., et al. Water vapor absorption in early M-type stars // Astron. Astrophys.—1999.—348, N 2.—P. 579—583.
  149. Maier J. P., Rosslein M. The  $\tilde{B}^4\Sigma_u^- - \tilde{X}^4\Sigma_g^-$  electronic spectrum of C<sub>2</sub><sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1988.—88, N 8.—P. 4614—4620.
  150. McLean A. D., Liu D., Chandler G. S. Computed self-consistent field and singles and doubles configuration interaction spectroscopic data and dissociation energies for the diatomics B<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>, CN, CP, CS, PN, SiC, SiO, SiP, and their ions // J. Chem. Phys.—1992.—97, N 11.—8459—8464.
  151. McWeeny R. The electron affinity of hydrogen: a valence bond study // THEOCHEM.—1992.—93.—P. 403—413.
  152. Miao J., Yang B., Hao S. H., et al. Experimental determination of the stereochemical structure of triatomic hydrogen (1+) // Wuli Xuebao.—1985.—34, N 10.—P. 1315—1321.
  153. Michels H. H. Electronic structure of He<sub>2</sub><sup>-</sup> // Chem. Phys. Lett.—1986.—126, N 6.—P. 537—540.
  154. Michels H. H., Montgomery J. A. The electronic structure and stability of the H<sub>3</sub><sup>-</sup> anion // Chem. Phys. Lett.—1987.—1987, N 6.—P. 535—539.
  155. Millar T. J., Farquhar P. R. A., Willacy K. The UMIST database for astrochemistry 1995 // Astron. Astrophys. Suppl. Ser.—1997.—121, N 1.—P. 139—186.
  156. Mladenović M., Schmatz S., Botschwina P. Large-scale *ab initio* calculations for C<sub>3</sub> // J. Chem. Phys.—1994.—101, N 7.—P. 5891—5899.
  157. Montgomery J. A., Michels H. H. On the structure of the ground state of H<sub>6</sub><sup>+</sup> // J. Chem. Phys.—1987.—87, N 1.—P. 771—773.
  158. Mordaunt D. H., Ashfold M. N. R. Near ultraviolet photolysis of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>: A precise determination

- of  $D_0(\text{HCC-H})$  // *J. Chem. Phys.*—1994.—**101**, N 3.—P. 2630—2631.
159. Muller H., Kutzelnigg W. CC-R<sub>12</sub> calculations on the lowest stationary points of the H<sub>5</sub><sup>+</sup> energy surface // *Phys. Chem. Chem. Phys.*—2000.—**2**, N 10.—P. 2061—2066.
160. Muller H. S. P., Winnewisser G., Demaison J., et al. The ground state spectroscopic properties of formaldehyde // *J. Mol. Spectrosc.*—2000.—**200**, N 1.—P. 143—144.
161. Nakajima T., Nakatsuji H. Energy gradient method for the ground, excited, ionized, and electron-attached states calculated by the SAC (symmetry-adapted cluster)/SAC-CI (configuration interaction) method // *Chem. Phys.*—1999.—**242**, N 2.—P. 177—193.
162. Nichols J. A., Simons J. Theoretical study of C<sub>2</sub> and C<sub>2</sub><sup>-</sup>:  $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ ,  $a^3\Pi_u$ ,  $X^2\Sigma_g^+$ , and  $B^2\Sigma_u^+$  potentials // *J. Chem. Phys.*—1987.—**86**, N 12.—P. 6972—6981.
163. Noll K. S., Geballe T. R., Marley M. S. Detection of abundant carbon monoxide in the brown dwarf Gliese 229B // *Astrophys. J.*—1997.—**489**, N 1.—P. L87—L90.
164. Ohno M., Zakrzewski V. G., Ortiz J. V., von Niessen W. Theoretical study of the valence ionization energies and electron affinities of linear C<sub>2n+1</sub> (n = 1—6) clusters // *J. Chem. Phys.*—1997.—**106**, N 8.—P. 3258—3269.
165. Oka T. Infrared spectroscopy of carbo-ions // *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A.*—1988.—**A324**, N 1578.—P. 81—96.
166. Okumura M., Yeh L. I., Lee Y. T. Infrared spectroscopy of the cluster ions H<sub>3</sub><sup>+</sup>(H<sub>2</sub>)<sub>n</sub> // *J. Chem. Phys.*—1988.—**88**, N 1.—P. 79—91.
167. Oppenheimer B. R., Kulkarni S. R., Mattheus K., van Kerkwijk M. H. The spectrum of the brown dwarf Gliese 229B // *Astrophys. J.*—1998.—**502**, N 2.—P. 932—943.
168. Ortiz J. V. Electron propagator calculations on the adiabatic electron binding energies of C<sub>3</sub> // *J. Chem. Phys.*—1992.—**97**, N 10.—P. 7531—7536.
169. Ortiz J. V., Zakrzewski V. G. Electron binding energies of linear C<sub>3</sub>, C<sub>5</sub>, C<sub>7</sub>, and C<sub>9</sub> clusters // *J. Chem. Phys.*—1994.—**100**, N 9.—P. 6614—6619.
170. Osmann G., Bunker P. R., Kraemer W. P., Jensen P. Coulomb explosion imaging and the CH<sub>2</sub><sup>+</sup> molecule // *Chem. Phys. Lett.*—1999.—**309**, N 3-4.—P. 299—306.
171. Osmann G., Bunker P. R., Kraemer W. P., Jensen P. Coulomb explosion imaging: the CH<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> and NH<sub>2</sub><sup>+</sup> ions as benchmarks // *Chem. Phys. Lett.*—2000.—**318**, N 5-6.—P. 597—606.
172. Pang T. Properties of ionic hydrogen clusters: A quantum Monte Carlo study // *Chem. Phys. Lett.*—1994.—**228**, N 6.—P. 555—561.
173. Partridge H., Bauschlicher C. W. The dissociation energies of CH<sub>4</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> revisited // *J. Chem. Phys.*—1995.—**103**, N 24.—P. 10589—10596.
174. Pearson R., Lovas F. J. Microwave spectrum and molecular structure of methyleneimine (CH<sub>2</sub>NH) // *J. Chem. Phys.*—1977.—**66**, N 9.—P. 4149—4156.
175. Pederson L. A., Schatz G. C., Hollebeek T., et al. Potential energy surface of the  $\tilde{A}$  state of NH<sub>2</sub> and the role of excited states in the N(<sup>2</sup>D) + H<sub>2</sub> reaction // *J. Phys. Chem. A.*—2000.—**104**, N 11.—P. 2301—2307.
176. Peeters D., Leroy G., Wilante C. The proton affinities and proton transfer in imine, amidine, and guanidine series // *J. Mol. Struct.*—1997.—**416**, N 1-3.—P. 21—32.
177. Perez P., ZapataTorres G., ParraMouchet J., Contreras R. Basicity and solvent effects on H bonding in NR<sub>3</sub> ···HCOOH (R = H, CH<sub>3</sub>) model systems // *Int. J. Quantum Chem.*—1999.—**74**, N 4.—P. 387—394.
178. Peterson K. A. Accurate multireference configuration interaction calculations on the lowest <sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> and <sup>3</sup>Π electronic states of C<sub>2</sub>, CN<sup>+</sup>, BN, and BO<sup>+</sup> // *J. Chem. Phys.*—1995.—**102**, N 1.—P. 262—277.
179. Peterson K. A., Mayrhofer R. C., Woods R. C. Configuration interaction spectroscopic properties of X<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup> HNC<sup>+</sup> and X<sup>2</sup>Π HCN<sup>+</sup> // *J. Chem. Phys.*—1990.—**93**, N 7.—P. 4946—4953.
180. Peterson K. A., Woods R. C. Ground state spectroscopic and thermodynamic properties of AlO<sup>-</sup>, SiN<sup>-</sup>, CP<sup>-</sup>, BS<sup>-</sup>, and CN<sup>-</sup> from Muller-Plesset perturbation theory // *J. Chem. Phys.*—1989.—**90**, N 12.—P. 7239—7250.
181. Peterson K. A., Xantheas S. S., Dixon D. A., Dunning T. H. Predicting the proton affinities of H<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub> // *J. Phys. Chem. A.*—1998.—**102**, N 14.—P. 2449—2454.
182. Petersson G. A., Malick D. K., Wilson W. G., et al. Calibration and comparison of the Gaussian-2, complete basis set, and density functional methods for computational thermochemistry // *J. Chem. Phys.*—1998.—**109**, N 24.—P. 10570—10579.
183. Pluta T., Bartlett R. J., Adamowicz L. Metastable He<sub>2</sub><sup>-</sup> and its autodetachment spectra: An accurate coupled-cluster study // *Phys. Rev. A.*—1989.—**40**, N 5.—P. 2253—2259.
184. Pradhan A. D., Partridge H., Bauschlicher C. W. The dissociation energy of CN and C<sub>2</sub> // *J. Chem. Phys.*—1994.—**101**, N 5.—P. 3857—3861.
185. Priem D., Ha T.-K., Bauder A. Rotational spectra and structures of three hydrogen-bonded complexes between formic acid and water // *J. Chem. Phys.*—2000.—**113**, N 1.—P. 169—175.
186. Rablen P. R., Lockmann J. W., Jorgensen W. L. Ab initio study of hydrogen-bonded complexes of small organic molecules with water // *J. Phys. Chem. A.*—1998.—**102**, N 21.—P. 3782—



- 3797.
187. Raghavachari K. Theoretical study of  $C_3$ ,  $C_3^-$  and  $C_3^+$  // Chem. Phys. Lett.—1990.—171, N 3.—P. 249—253.
  188. Raynor S., Herschbach D. R. Electronic structure of  $H_n^+$  and  $HeH_n^+$  // J. Phys. Chem.—1983.—83, N 2.—P. 289—293.
  189. Refhuss B. D., Liu D.-J., Dinelli B. M., et al. Infrared spectroscopy of carbo-ions. IV. The  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$  electronic transition of  $C_2^-$  // J. Chem. Phys.—1988.—89, N 1.—P. 129—137.
  190. Rinnenthal J. L., Gericke K.-H. Direct high-resolution determination of the singlet-triplet splitting in NH using stimulated emission pumping // J. Mol. Spectrosc.—1999.—119, N 1.—P. 115—122.
  191. Rivelino R., Canuto S. An ab initio study of the H-bonded  $H_2O:HCN$  and  $HCN:H_2O$  isomers // Chem. Phys. Lett.—2000.—322, N 3-4.—P. 207—212.
  192. Robbe J. M., Monnerville M., Chambaud G., et al. Theoretical spectroscopic data of the  $HO_2^+$  ion // Chem. Phys.—2000.—252, N 1.—P. 9—16.
  193. Rogers D. W., McLafferty F. J. G2 *ab initio* calculations of the enthalpy of formation of hydrazoic acid, methyl azide, methyl amine, and ethyl amine // J. Chem. Phys.—1995.—103, N 18.—P. 8302—8303.
  194. Rohse R., Kutzelnigg W., Jaquet R., Klopper W. Potential energy surface of the  $H_3^+$  ground state in the neighborhood of the minimum with microhartree accuracy and vibrational frequencies derived from it // J. Chem. Phys.—1994.—101, N 3.—P. 2231—2243.
  195. Roszak S., Leszczynski J. The structure and nature of interactions in carbonium ions,  $CH_3^+(H_2)_n$  ( $n = 1-9$ ): a theoretical study // Chem. Phys. Lett.—2000.—323, N 3-4.—P. 278—286.
  196. Ruscic B., Feller D., Dixon D. A., et al. Evidence for a lower enthalpy of formation of hydroxyl radical and a lower gas-phase bond dissociation energy of water // J. Phys. Chem. A.—2001.—105, N 1.—P. 1—4.
  197. Saumon D., Geballe T. R., Leggett S. K., et al. Ammonia in the T dwarf Gliese 229B // From Giant Planets to Cool Stars. ASP Conference Series.—C. A. Griffith and M. S. Marley, eds.—2000 (in press).
  198. Schaefer H. F. The infrared spectra of polyatomic molecular ions: A profitable alliance between theory and experiment // Ion and Cluster Ion Spectroscopy and Structure. Ed. by J. P. Maier.—Amsterdam etc.: Elsevier, 1989.—P. 109—129.
  199. Scuseria G. E., Hamilton T. E., Schaefer H. F. An assessment of the full coupled cluster method including all single, double, and triple excitations: The diatomic molecules LiH,  $Li_2$ , BH, LiF,  $C_2$ , BeO,  $CN^+$ , BF,  $NO^+$ , and  $F_2$  // J. Chem. Phys.—1990.—92, N 1.—P. 568—573.
  200. Sears T. J., Bunker P. R., Davies P. B., et al. Diode laser absorption spectroscopy of  $D_3O^+$ : Determination of the equilibrium structure and potential function of the oxonium ion // J. Chem. Phys.—1985.—83, N 6.—P. 2676—2685.
  201. Senekowitsch J., Rosmus P. An accurate potential energy function of the  $H_2^-$  ion at large internuclear distances // Chem. Phys. Lett.—1984.—111, N 3.—P. 211—214.
  202. Senent M. L. MRCI study of the lowest electronic states of  $O_2H^+$  ion // Mol. Phys.—1999.—96, N 11.—P. 1587—1594.
  203. Shalabi A. S., Eid Kh. M., Kamel M. A., El-Barbary A. A. Comparative study of errors in HeH<sup>+</sup> interaction energy calculations // Int. J. Quantum Chem.—1998.—68, N 5.—V. 329—350.
  204. Simon S., Duran M., Dannenberg J. J. Effect of basis set superposition error on the water dimer surface calculated at Hartree-Fock, Moller-Plesset, and Density Functional Theory levels // J. Phys. Chem. A.—1999.—103, N 11.—P. 1640—1643.
  205. Staemmer V. *Ab initio* study of small helium cluster ions  $He_n^+$  ( $n = 2, 3, 4, 5$ ) and low-lying Rydberg states of helium tetramer // Z. Phys. D.—1990.—16, N 3.—P. 217—227.
  206. Starck J., Meyer W. *Ab initio* potential energy surface for the collisional system  $H + H_2$  and properties of its van der Waals complex // Chem. Phys.—1993.—176, N 1.—P. 83—95.
  207. Stockman P. A., Blake G. A., Lovas F. J., Suenram D. Microwave rotation-tunneling spectroscopy of the water-methanol dimer: Direct structural proof for the strongest bound conformation // J. Chem. Phys.—1997.—107, N 10.—P. 3782—3790.
  208. Stockman P. A., Bumgarner R. E., Suzuki S., Blake G. A. Microwave and tunable far-infrared laser spectroscopy of the ammonia-water dimer // J. Chem. Phys.—1992.—96, N 4.—P. 2496—2510.
  209. Suter H. U., Huang M.-B., Engels B. A multireference configuration interaction study of the hyperfine structure of the molecules CCO, CNN, and NCN in their triplet ground states // J. Chem. Phys.—1994.—101, N 9.—P. 7686—7691.
  210. Szczepanski J., Wehlburg Ch., Vala M.  $C_3^-$  carbon cluster anion: Structure and asymmetric stretching mode frequency // J. Phys. Chem. A.—1997.—101, N 38.—P. 7039—7042.
  211. Tao F.-M., Klemperer W. *Ab initio* search for the equilibrium structure of the ammonia dimer // J. Chem. Phys.—1993.—99, N 8.—P. 5876—5982.
  212. Tarroni R., Palmieri P., Mitrushevskov A., et al. Dissociation energies and heats of formation of

- NH and  $\text{NH}^+$  // J. Chem. Phys.—1997.—106, N 24.—P. 10265—10272.
213. Thomas J. R., DeLeeuw B. J., Vacek G., et al. The balance between theoretical method and basis set quality: A systematic study of equilibrium geometries, dipole moments, harmonic vibrational frequencies, and infrared intensities // J. Chem. Phys.—1993.—99, N 1.—P. 403—415.
214. Tschumper G. S., Schaefer H. F. Predicting electron affinities with density functional theory: Some positive results for negative ions // J. Chem. Phys.—1997.—107, N 7.—P. 2529—2541.
215. Tsuji T. The atmospheric structure of late-type stars. I. Physical properties of cool gaseous mixtures and the effect of molecular line absorption on stellar opacities // Publ. A. S. Japan.—1966.—18, N 3.—P. 127—173.
216. Tsuji T. Molecular abundances in stellar atmospheres. II. // Astron. Astrophys.—1973.—23, N 3.—P. 411—431.
217. Tsuji T. Molecules in atmospheres of brown dwarfs // Laboratory and Astronomical High Resolution Spectra. ASP Conference Series.—A. J. Sauval, R. Blomme, and N. Grevesse, eds.—1995.—81.—P. 566—567.
218. Uchimaru T., Chandra A. K., Kawahara S.-I., et al. Internal bond rotation in substituted methyl radicals,  $\text{H}_2\text{B}-\text{CH}_2$ ,  $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2$ ,  $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2$ , and  $\text{HO}-\text{CH}_2$ : hardness profiles // J. Phys. Chem. A.—2001.—105, N 8.—P. 1345—1353.
219. Urban J., Schreiner P., Vacek G., et al. Molecular structures, vibrational spectra, and rotational barriers of  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{Si}_2\text{H}_6$ ,  $\text{SiGeH}_6$ , and  $\text{Ge}_2\text{H}_6$  // Chem. Phys. Lett.—1997.—264, N 5.—P. 441—448.
220. Urdaneta C., Largo-Cabrerizo A., Lievin J., et al. Gaussian functions in hylleraas-CI calculations. I. Ground state energies for  $\text{H}_2$ ,  $\text{HeH}^+$ , and  $\text{H}_3^+$  // J. Chem. Phys.—1988.—88, N 3.—P. 2091—2093.
221. van Mourik T., Dunning T. H., Peterson K. A. *Ab initio* characterization of the  $\text{HCO}^x$  ( $x = -1, 0, +1$ ) species: structures, vibrational frequencies, CH bond dissociation energies, and HCO ionization potential and electron affinity // J. Phys. Chem. A.—2000.—104, N 11.—P. 2287—2293.
222. Van Orden A., Saykally R. J. Small carbon clusters: spectroscopy, structure, and energetics // Chem. Rev.—1998.—98, N 6.—P. 2313—2357.
223. Vogt J., Mez-Stark B., Vogt N., Hutter W. MOGADOC — a database for gasphase molecular spectroscopy and structure // J. Mol. Struct.—1999.—485-486.—P. 249—254.
224. Watts J. D., Bartlett R. J. Coupled-cluster calculations on the  $\text{C}_2$  molecule and the  $\text{C}_2^+$  and  $\text{C}_2^-$  molecular ions // J. Chem. Phys.—1992.—96, N 8.—P. 6073—6084.
225. Watts J. D., Bartlett R. J. Accurate electron affinities of small carbon clusters // J. Chem. Phys.—1994.—101, N 1.—P. 409—415.
226. Watts J. D., Stanton J. F., Gauss J., Bartlett R. J. A coupled-cluster study of the ground state of  $\text{C}_3^+$  // J. Chem. Phys.—1991.—94, N 10.—P. 4320—4327.
227. Welti M., Ha T.-K., Pletsch E. *Ab initio* SCF and CI study of the  $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  complex // J. Chem. Phys.—1985.—83, N 6.—P. 2959—2964.
228. Wiener J. J. M., Politzer P. Comparison of various density functional methods for computing bond dissociation energies // THEOCHEM.—1998.—427.—P. 171—174.
229. Wilsey S., Thomas S. E., Eland J. H. D. An experimental and theoretical study of the  $\text{HNCO}^+$  ion // Chem. Phys.—2000.—258, N 1.—P. 21—36.
230. Woods R. C. Microwave spectroscopy of molecular ions in the laboratory and in space // Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A.—1988.—A324, N 1578.—P. 141—146.
231. Woods R. C. Microwave spectroscopy of molecular ions // Ion and Cluster Ion Spectroscopy and Structure / Ed. by J. P. Maier. — Elsevier: Amsterdam etc., 1989.—P. 27—58.
232. Wright L. R., Borkman R. F. *Ab initio* studies of the stabilities of even- and odd-membered  $\text{H}_n^+$  clusters // J. Chem. Phys.—1982.—77, N 4.—P. 1938—1941.
233. Xantheas S. S. *Ab initio* studies of cyclic water clusters  $(\text{H}_2\text{O})_n$ ,  $n = 1-6$ . III. Comparison of density functional with MP2 results // J. Chem. Phys.—1995.—102, N 11.—P. 4505—4517.
234. Xantheas S. S., Dunning T. H. *Ab initio* studies of cyclic water clusters  $(\text{H}_2\text{O})_n$ ,  $n = 1-6$ . I. Optimal structures and vibrational spectra // J. Chem. Phys.—1993.—99, N 11.—P. 8774—8792.
235. Xie Y., Remington R. B., Schaefer H. F. The protonated water dimer: Extensive theoretical studies of  $\text{H}_5\text{O}_2^+$  // J. Chem. Phys.—1994.—101, N 6.—P. 4878—4884.
236. Xu L. H., Lovas F. J. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. 24. Methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$  and  $(\text{CH}_3\text{OH})\text{-}^{13}\text{C}$ ) // J. Phys. & Chem. Reference Data.—1997.—26, N 1.—P. 17—156.
237. Yamaguchi Y., Gaw J. F., Schaefer H. F. The  $\text{H}_5^+$  potential energy hypersurface: Characterization of ten distinct energetically low-lying stationary points // J. Chem. Phys.—1986.—86, N 9.—P. 5072—5081.
238. Yamaguchi Y., Hoffmann B. C., Stephens J. C., Schaefer H. F. Three lowest-lying electronic states of  $\text{NH}_2$  // J. Phys. Chem. A.—1999.—103, N 38.—P. 7701—7708.

239. Yamaguchi Y., Schaefer H. F. An *ab initio* study on the four electronically lowest-lying states of CH<sub>2</sub> using the state-averaged Complete Active Space second-order configuration interaction method // Chem. Phys.—1997.—225, N 1—3.—P. 23—31.
240. Yamaguchi Y., Schaefer H. F. The <sup>3</sup>A<sub>2</sub>, <sup>1</sup>A<sub>2</sub>, <sup>3</sup>B<sub>2</sub>, and <sup>1</sup>B<sub>2</sub> electronic states of CH<sub>2</sub>: Small bond angle states // J. Chem. Phys.—1997.—106, N 5.—P. 1819—1826.
241. Yeager D. L., Nichols J. A., Golab J. T. Multiconfigurational spin tensor electron affinities for F, BO, CN, OH, and NH<sub>2</sub> // J. Chem. Phys.—1992.—95, N 11.—P. 8441—8448.
242. Yeh L. I., Okumura M., Myers J. D., et al. Vibrational spectroscopy of the hydrated hydronium cluster ions H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>·(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> (n = 1,2,3) // J. Chem. Phys.—1989.—91, N 12.—P. 7319—7330.
243. Zaifman D., Vager Z., Naaman R., et al. The structures of C<sub>2</sub>H<sup>+</sup> and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub><sup>+</sup> as measured by Coulomb explosion imaging // J. Chem. Phys.—1991.—94, N 10.—P. 6377—6387.
244. Zeroka D., Jensen J. O. Infrared spectra of some isotopomers of methylamine and the methylammonium ion: a theoretical study // THEOCHEM.—1998.—425, N 3.—P. 181—192.
245. Zhang N. R., Shillady D. D. *Ab initio* equilibrium constants for H<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O and H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> // J. Chem. Phys.—1994.—100, N 7.—P. 5230—5236.
246. Zhifang P., Borkman R. F. *Ab initio* calculation of vibrational frequencies, infrared intensities, and structures for H<sub>4</sub><sup>+</sup>, LiH<sub>3</sub><sup>+</sup>, Li<sub>2</sub>H<sub>2</sub><sup>+</sup>, and Li<sub>4</sub><sup>+</sup>, and deuterated analogs // J. Chem. Phys.—1994.—101, N 9.—P. 7782—7787.
247. Zhi-Ru L., Di W., Ze-Sheng L., et al. Long-range π-type hydrogen bond in the dimers (HF)<sub>2</sub>, (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>O-HF // J. Phys. Chem. A.—2001.—105, N 7.—P. 1163—1168.

Поступила в редакцию 08.10.01