

1978.02

O₂

М. П. 20919
39-11-64
28

Х. 1978, N 24

1978
24 Б171. Энергия диссоциации $O_2(X^3\Sigma_g^-)$. Albright D. L., Moseley I. T., Cosby P. C., Tadjeddine M. The dissociation energy of $O_2(X^3\Sigma_g^-)$. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 2, 326—329 (англ.)

Для определения величины энергии диссоциации молекулы O_2 в основном электронном состоянии предложено использовать след. «спектроскопич. цикл»:
 $E(O_2^+, b^4\Sigma_g^-) + T(O_2^+, b^4\Sigma_g^-, v=4, N=9) = D(O_2X^3\Sigma_g^-) + E(O^+, ^4S_{3/2}) + W(N=9, ^3P_2)$, где $E(O_2^+, b)$ — потенциал ионизации O_2 , $[O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0, N=0) \rightarrow O_2^-(b, v=0, N=0)]$: $E(O^+, ^4S_{3/2})$ — потенциал ионизации $O(^3P_2 \rightarrow O^+(^4S_{3/2}^o))$; W — кинетич. энергия фрагментов $O^+ + O$, являющихся продуктами преддиссоциации $O_2^+(b, v=4, N \geq 9)$. Величина $E(O_2^+, b)$ определена с большой точностью как предел соотв-щей ридберговской серии $(146556 \pm 2 \text{ см}^{-1})$. Значение $T(O_2^+, b, v=4, N=9)$ получено из анали. системы $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u O_2^+$, измеренной с высоким разрешением $[T(v=4, N=9) - T(v=0, N=0) = 4552,1 \pm \dots \text{ см}^{-1}]$. Величина $W = 9 \pm 9 \text{ см}^{-1}$ получена след. осм. Излучение лазера на красителе, частоту которого истраивали в области полосы 4—4 перехода $b^4\Sigma_g^- - O_2^+$, коллинеарно

направляли на пучок ионов O_2^+ в метастабильном долгоживущем состоянии $a^4\Pi_u$. Далее определялась энергия ионов O^+ . Затем, по известной разности энергий между уровнями с $N=9, 13, 15, 17$, с к-рых происхо-

дила преддиссоциация, и разности энергий между компонентами триплета $O(^3P_{2,1,0})$ определяли кинетич. энергию ионов O^+ . Значение $E(O^+, ^4S_{3/2}) = 109837,02 \pm \pm 0,06 \text{ см}^{-1}$ известно из атомных спектров. Рассчитанная по описанному циклу энергия диссоциации $O_2(X^3\Sigma_g^-) = 41262 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ в пределах ошибки определения совпадает со значением $41260 \pm 15 \text{ см}^{-1}$ полученным ранее из анализа систем полос Шумана—Рунге и Герцберга [переходы $B^3\Sigma_u^-(v') \rightarrow X^3\Sigma_g^-(v''=0)$ и $A^3\Sigma_u^+(v') \rightarrow X^3\Sigma_g^-(v''=0)$].

В. М. Ковба

ПОЛ
и ра
У

O₂

6428
BP-XI-3919

1948

89: 12984z The dissociation energy of molecular oxygen =
($X^3\Sigma_g^-$). Albritton, D. L.; Moseley, J. T.; Cosby, P. C.;
Tadjeddine, M. (Aeron. Lab., NOAA Environ. Res. Lab.,
Boulder, Colo.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(2), 326-9 (Eng).
The dissocn. energy of O₂ was detd. by laser photofragment
spectroscopy to be $41260 \pm 15 \text{ cm}^{-1}$. This value is in agreement
with the value obtained by P. Brix and G. Herzberg (1954).

(d₂)

C. A. 1948, 89, N2

O₂

Commencement 8415 | 1978

obsp.

trans. net.

trans. net.

trans. net.

Asundi R.K., et al.

Indian J. Pure

and Appl. Phys.

1978, 16, 135-141

1978

O₂
H₂
XeF₂
SeO₃
H₂

93: 16010j The pure rotation Raman spectra of molecular oxygen, ¹⁷O₂, ¹⁶O¹⁷O, ¹⁷O¹⁸O, xenon difluoride, selenium trioxide, molecular hydrogen, ¹H³H and ²H³H and the vibration-rotation Raman spectra of ¹H³H and ²H³H. Brassington, N. J.; Edwards, H. G. M.; Farwell, D. W.; Long, D. A.; Najm, K. A. B.; Skinner, M. (Sch. Chem., Univ. Bradford, Bradford/Yorkshire, Engl. BD7 1DP). *Proc. Int. Conf. Raman Spectrosc.*, 6th 1978, 2, 250-1 (Eng). Edited by Schmid, Eduard D.; Krishnan, R. S.; Kiefer, W. Heyden: London, Engl. The 1st observation is reported of the pure rotation Raman spectra of ¹⁷O₂, ¹⁶O¹⁷O, ¹⁷O¹⁸O, XeF₂, SeO₃, and the pure rotation and vibration-rotation (Q-branch only) Raman spectra of ¹H³H and ²H³H. The obsd. spectra were analyzed for rotational constns. and bond lengths. For ¹⁷O, ¹⁶O¹⁷O, and ¹⁷O¹⁸O,

(перевод с англ.
и коммент. прим.
сметки, Ye)

(44) (X)



CA 1980 23 v2

40, 38, and 32 lines, resp., in the *s*-branch were measured. For the $^{17}\text{O}_2$ species the expected intensity alternation for *N* even:odd of 7:5 was obsd.; for the noncentrosym. species no intensity alternation was obsd. Using values of α calcd. from the α value of $^{16}\text{O}_2$, the B_e and r_e values were obtained. The r_e values agree with those of $^{16}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, and $^{18}\text{O}_2$ to within one std. deviation of error. For, 162 lines were measured in the *S*-branch and the expected intensity alternation for *J* even:odd of 1:3 was noted. The B_0 and r_0 values are more precise than the IR values. For, 194 lines were measured in the *R*- and *S*-branches. The precision of r_0 is greater than that of r_a from an electron-diffraction study. For $^1\text{H}^3\text{H}$ and $^2\text{H}^3\text{H}$ the r_e values agree with those of $^1\text{H}_2$, $^2\text{H}_2$, and $^2\text{H}^1\text{H}$ to within one std. deviation of error.

1978

O₂
(+) ${}^1\Sigma - {}^3\Sigma_g$

89: 120208h Oxygen molecule in a high magnetic field. Braun, P. A.; Dvornikov, I. V.; Labzovskii, L. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1978, 45(1), 49-57 (Russ). The rotational structure of an O₂ mol. in a magnetic field of 10⁴-10⁵ G was detd. The Zeeman effect for the ground state (${}^3\Sigma_g^-$) and the effect of the strong magnetic field on the probability of forbidden transitions (${}^1\Sigma_g^+ \leftarrow X{}^3\Sigma_g^-$) were studied.

C.A., 1978, 89, N14

O₂

SO

Магнитные
g-факторы

(71)

✱

2.1979, 19

9 B26. О параметрах эффекта Зеемана высокой точности для O₂ и SO. Christensen H., Veseth L. On the high-precision Zeeman effect in O₂ and SO. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 3, 438—444 (англ.)

Определены магнитные g-факторы для основных состояний симметрии ³Σ молекул O₂ и SO. Релятивистские поправки к спиновому электронному фактору g_s рассчитаны в приближении Брейта — Паули с использованием однодетерминантных молек. волновых функций метода ЛКАО. При вычислениях учтены вклады второго и (выборочно) третьего порядка. С помощью взвешенной нелинейной процедуры наименьших квадратов на основании эксперим. данных найдены значения g_s, а также вращательного и орбитального электронного фактора. g_R и g_I^e. Сопоставление теор. и эксперим. g-факторов показывает, что для обеих молекул расхождения не превышают половины стандартной погрешности. Отмечено, что в случае теор. величин ошибки в основном обусловлены пренебрежением нек-рыми двух-центровыми интегралами при вычислении поправок 3-го порядка. Проанализирована связь постоянной спин-вращательного взаимодействия и фактора g_I^e. Показано, что вклады 3-го порядка важны и в этом случае, особенно для молекулы O₂. Обсуждены пред. эксперим. и теор. оценки g-факторов. А. В. Немухин

8092

1978

O₂

S9: 206690w The pure rotational Raman spectra of molecular oxygen ¹⁷O₂, ¹⁶O¹⁷O and ¹⁷O¹⁸O). Edwards, H. G. M.; Farwell, D. W.; Long, D. A.; Najm, K. A. B. (Sch. Chem., Univ. Bradford, Bradford/West Yorkshire, Engl.). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1978, 16(3), 354-7 (Eng). The pure rotational Raman spectra of ¹⁷O₂, ¹⁶O¹⁷O and ¹⁷O¹⁸O were recorded and analyzed for the 1st time to give values of B_0 , D_0 and r_0 for each species. The spectra were recorded photog. using laser excitation and a grating spectrograph with a reciprocal linear dispersion of 1.4 cm⁻¹ mm⁻¹ at a wavelength of 488.0 nm. By using values of α for ¹⁷O₂, ¹⁶O¹⁷O and ¹⁷O¹⁸O calcd. from the α -value for ¹⁶O₂, the B_e and hence r_e value were obtained. The rotational consts. and bond lengths detd. for these species are reported. These r_e values agree with the equil. state bond lengths of ¹⁶O₂, ¹⁶O¹⁸O and ¹⁸O₂ within one std. deviation of error.

(B_0, D_0, r_0)



C.A. 1978, 89, 124

Оптика 8092

1979

02

10 Д396. Вращательный спектр комбинационного рассеяния $^{17}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ и $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. Edwards H. G. M., Farwell D. W., Long D. A., Najm K. A. B. The pure rotational Raman spectra of $^{17}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ & $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1978, 16, № 3, 354—357 (англ.)

М. П.

Получен вращательный спектр комб. рас. молекул $^{17}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ и $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. Исследуемый газ находился под давл. 380 мм рт. ст. Спектр регистрировался фотографически, спектральная ширина щели составляла $0,15\text{ см}^{-1}$. Одновременно со спектром кислорода на пленке регистрировались 48 линий спектра тория, которые использовались для калибровки. Приведены таблицы частот наблюдавшихся линий. Вычислены вращательные постоянные, постоянные центробежного растяжения и равновесные межъядерные расстояния для исследованных молекул. Подробно проанализирована структура спектра, связанная с чередованием интенсивностей во вращательных линиях молекулы $^{17}\text{O}_2$; интенсивности линий с четным и нечетным значением вращательного квантового числа J относятся друг к другу как 7:5.

Н. Филиппов

Ф. 1979/110

Синтез

8.09.78

1978

02

22 Б268. Чисто вращательные спектры комбинационного рассеяния $^{17}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$, и $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. Edwards H. G. M., Farwell D. W., Long D. A., Naim K. A. B. The pure rotational raman spectra of $^{17}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ & $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1978, 16, № 3, 354—357 (англ.)

Сфотографированы чисто вращательные спектры КР молекул $^{17}\text{O}_2$, $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. Проанализирована вращательная структура S-ветвей и получены значения B_0 , D_0 , R_0 , B_e , R_e (два последних с учетом известного значения d_e $^{16}\text{O}_2$) равные (B , D в см^{-1} , R в А): $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ — 1,39538; $4,6 \times 10^{-6}$; 1,21080; 1,4032; 1,2074; $^{17}\text{O}_2$ — 1,35319, $4,8 \times 10^{-6}$; 1,21007; 1,3606; 1,2074; $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$ — 1,3156; $4,8 \times 10^{-6}$; 1,2107; 1,3227; 1,2074. В. М. Ковба

4117

X-1949, 122

1948

22 Б1362. Изотопные эффекты в резонансных сечениях процессов преддиссоциации — преассоциации. Е и Byung C., Zaritsky Nava. Isotope effects on resonance cross sections in predissociation/preassociation. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 55, № 3, 575—581 (англ.)

На основе полуклассич. теории, развитой из теории неупругого рассеяния Штюкельберга (Stückelberg E. C. G., «Helv. phys. acta», 1932, 5, 370), вычислены потенциальные кривые притягивательных и отталкивательных состояний молекул $^{16}\text{O}_2$, $^{18}\text{O}_2$, OH и OD, к-рые использованы для вычисления резонансных сечений $\sigma_{\text{рез}}$ преассоциативных столкновений атомов O друг с другом и с атомами H и D в зависимости от энергии. Расчеты производились для состояний $B^3\Sigma_u^-$ и $5\Pi_u$ молекулы O_2 и для состояний 4Π и $A^2\Sigma^+$ молекулы OH(OD). В системе O_2 расчеты резонансных парциальных значений $\sigma_{\text{рез}}$ для определенного значения квант. числа электронного момента кол-ва движения показывают, что резонансные линии узки и довольно резки и обнаруживают характерные изотопные смещения. С повышением энергии столкновения ширины

поиск
поиск

(+1)

Х. 1948/122

линий обнаруживают осцилляции, характерные также для процессов преддиссоциации, причем узким линиям в системе $^{18}\text{O}_2$ могут соответствовать широкие линии в системе $^{16}\text{O}_2$ и наоборот. Полные резонансные сечения в столкновениях в системах атомов ^{16}O и ^{18}O довольно сильно отличаются друг от друга, причем различие может достигать множителя 2—4. В системах OH и OD полные $\sigma_{\text{рез}}$ также могут сильно различаться друг от друга, причем в области энергий взаимодействия $E \approx 0,077$ ат. ед. величины $\sigma_{\text{рез}}$ могут различаться почти на порядок. Это различие обусловлено, в конечном счете, изотопными сдвигами в положениях резонансных линий и изотопным сужением и уширением линий.

В. Е. Скурат

1978

23 Б30. Электронная структура комплексов переходных и непереходных элементов по данным расчетов дискретным вариационным методом. Гуцев Г. Л., Клягина А. П., Левин А. А. «13 Всес. Чугаев. совещ. по химии комплекс. соедин., 1978». М., 1978, 113

Разработан комплекс программ (ЭВМ БЭСМ-6) для расчетов электронного строения молекул дискретным вариационным методом (X_α). В вычислениях можно использовать до 80 АО, заданных численно, либо аналитически, максим. кол-во атомов — 20. Вычисленные с использованием слейтеровской концепции переходного состояния потенциалы ионизации валентных уровней молекул O_2 , F_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , CF_4 отклоняются от эксперим. значений в среднем на 0,5 эв. Расчеты гексафторидов непереходных и переходных элементов показали, что вакантные орбитали центрального атома незначительно влияют на электронное строение. В частности, для SF_6 правильный порядок уровней получается уже в sp -базисе.

М. Гофман

У; электр.
структ.

(+5) ☒

Х. 1978, №23

1978

Тузов Т. И. 4 ср.

„М. структур. химии“ 1978,
19, №, 976-81

(4)

с. 72 - III

Q₂

1978

Guyon P.M., et al

Adv. Mass Spectrom. Vol. 7A.

common-
masses

Proc. 7th Int. Mass Spectrom.
Conf., Florence, 1976 "London,
1978, 188-91.



cm. CO₂ - III

O₂

ommu 6479

1978

Honjou N. et al.

opomos.

сметр

Mol. Phys., 1978,
35 (6), 1569-1578

Configuration interaction
calculation ● of the O₂⁺ ion.

O_2^{*4}
2

ommueu 6323

1978.

Fost R., et al.

J. phys. (Fr), 1978

39 N5, suppl, C1-26

считает -
-мфичес
рассужд.

O₂

цитата

6847

1979

4 Б121. Возбуждение $b^1\Sigma_g^+$ состояния O₂ электронами низкой энергии. Lawton S. A., Phelps A. V. Excitation of the $b^1\Sigma_g^+$ state of O₂ by low energy electrons. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 3, 1055—1068 (англ.)

Измерена абс. интенсивность излучения в области 762 нм, испускаемого молекулами O₂ в состоянии $b^1\Sigma_g^+$. Возбуждение осуществляли электронами, дрейфующими через O₂ под влиянием однородного электрич. поля. Определены константы скорости возбуждения $b^1\Sigma_g^+$ состояния, к-рые согласуются с предсказанными только для средней энергии электронов $\sim 1,3$ эв. Изучена т-рная зависимость абс. интенсивности полосы 762 нм для интервала плотностей O₂ 10^{16} — 2×10^{18} молекул/см³. Рассчитано число молекул O₂ в состоянии $b^1\Sigma_g^+$, образующихся на 1 см электронного дрейфа и на одну молекулу O₂. Полученные значения изменяются от $1,3 \times 10^{-18}$ см² до $2,1 \times 10^{-16}$ см² при изменении отношения напряженности электрич. поля к плотности основного состояния O₂ E/N в интервале от 5×10^{-17} в·см² до 2×10^{-15} в·см², что соответствует интервалу средних

возбужден.

$b^1\Sigma_g^+$

состояния

1979, №4

энергий электронов 0,75—6 эв. При расчете учитывались процессы ионизации и метастабильной диффузии. Измерена временная зависимость относит. интенсивности излучения в области 762 нм. Определено произведение DN (D — коэф. диффузии), равное $(5,0 \pm 0,3) \times 10^{18} \text{ см}^{-1} \text{ сек}^{-1}$, а также коэф. затухания для состояния $b^1\Sigma^+_g$, равный $(3,9 \pm 0,2) \times 10^{-17} \text{ см}^3 \text{ сек}^{-1}$. Измеренные коэф. возбуждения сравнены со значениями, рассчитанными из лит. данных для сечений столкновений электронов с O_2 . Показано, что сечения прямого возбуждения состояния $b^1\Sigma^+_g$ лежат вблизи порога. На этом основании предположено, что практически все молекулы O_2 , возбужденные до уровней 1,63 эв и выше, участвуют в образовании молекул O_2 в состоянии $b^1\Sigma^+_g$.

С. Б. Осин



O₂

фото-
диссоц

9 Б810. Наблюдение переходов $O(^1D \rightarrow ^3P)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$, сопровождающих фотодиссоциацию O_2 .
Lee L. C., Slinger T. G. Observations on $O(^1D \rightarrow ^3P)$ and $O_2(b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$ following O_2 photodissociation. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 9, 4053—4060 (англ.)
Исследован процесс передачи энергии $O(^1D) + O_2 \rightarrow O(^3P) + O_2(b^1\Sigma_g^+)_v$. Атомы $O(^1D)$ получали в результате фотодиссоциации O_2 излучением ~ 1600 Å лазера на H_2 . Эмиссия $O(^1D)$ (6300 Å) и колебательные полосы $O_2(b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$ детектировались с помощью фильтра, фотоумножителя и многоканального анализатора с разрешением по времени 10 мксек. Наблюдались только уровни $v=0$ и 1 в отношении $k_1/k \approx 0,7$. Эффективность передачи энергии $O(^1D)$ к O_2 составляет $0,77 \pm 0,2$, что соответствует константам скоростей $k_0 = 1,8 \cdot 10^{-11}$ и $k_1 = 1,3 \cdot 10^{-11}$ см³/сек. В измерениях при различных давлениях O_2 получена константа тушения $O_2(b^1\Sigma_g^+)_v=1 O_2$ $2,2 \cdot 10^{-11}$ см³/сек, что в шесть раз превосходит константу тушения для $O_2(b^1\Sigma_g^+)_v=0$. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися в литературе эксперим. данными. Обсуждается механизм передачи энергии.

Н. И. Бутковская

2.1978.19

02

ширина
спектр. линий
fmm

— 6 БГ60. *Оттиски 6902 1978*
 Экспериментальное определение силы осцилляторов и ширины линий для систем полос Шумана — Рунге молекулярного кислорода. I. Полосы (6—0)—(14—0). Lewis B. R., Carver J. H., Hobbs T. I., McCoy D. G., Gies H. P. F. Experimentally determined oscillator strengths and linewidths for the Schumann—Runge band system of molecular oxygen—I. The (6—0)—(14—0) bands. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 20, № 2, 191—203 (англ.)
 С. высоким разрешением ($\sim 0,06$ Å) измерена система полос Шумана — Рунге в ВУФ-спектре поглощения молек. кислорода $(B^3\Sigma_u^-(v'=6-14) \rightarrow X^3\Sigma_g^-, v''=0)$. Экспериментально определены и табулированы силы осцилляторов $f(N'', v')$ линий (P — ветвь, $N''=3-31$, R — ветвь, $N''=5-29$). Значения $f(N'', v')$ в целом несколько выше, чем полученные ранее и уменьшаются с ростом N'' быстрее, чем предсказывает теория $f(N'', v') = f_0(v') - \beta(v')N''(N''+1)$. Приведены значения $f_0(v')$ и $\beta(v')$ для P - и R -ветвей. Величина $f_0(v')$

2.1979, № 6

Оттиски 6902

согласуется с полученными ранее значениями при малых v' и значительно отличается при $v'=11-14$. Найдено, что ширина линий меняется в зависимости от v' , причем для $v'=12-14$ результаты хорошо согласуются с лит. данными, а для $v'=6-9$ — лежат между эксперим. и теоретически рассчитанными значениями полученными ранее.

В. М. Ковба

O₂

ширина
линии
fmm

P. 1979. 2

данные 6902

1978

1 2 Д355. Экспериментальное определение сил осцилляторов и ширины линий системы Шумана-Рунге молекулы O₂. Ч. I. Полосы (6—0)—(14—0). Lewis B. R., Carver J. H., Hobbs T. I., McCoy D. G., Gies H. P. F. Experimentally determined oscillator strengths and linewidths for the Schumann-Runge band system of molecular oxygen. I. The (6—0)—(14—0) bands. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 20, № 2, 191—203 (англ.)

Спектр поглощения молекулы O₂ в области полос (6—0)—(14—0) системы Шумана-Рунге получен при комнатной т-ре с разрешением 0,06 Å с использованием фотоэлектрич. регистрации. Определены силы осцилляторов и преддиссоциационные ширины линий. Впервые проанализирована зависимость сил осцилляторов от квантового числа N''. Полученные значения сил осцилляторов немного больше приводимых в литературе. Кроме того, силы осцилляторов падают с увеличением N'' немного быстрее, чем это предсказано теорией. Преддиссоциационные ширины линий плавно меняются с ν' , хорошо согласуются с ранее измеренными для $\nu'=12-14$ и

лежат между известными экспериментальными и теоретич. значениями для $\nu' = 6-9$. Полученные результаты позволяют построить значительно более точный профиль атмосферного поглощения в полосах Шумана-Рунге, чем это было возможно до сих пор. Библ. 32. В. С. Иванов

1978

O₂nb, exc,
factor

88: 128377n MCSCF wavefunctions for the $a^1\Delta_g$ and $b^1\Sigma_g^+$ states of molecular oxygen. Lie, G. C. (Dep. Chem., Natl. Tsing Hua Univ., Hsinchu, Taiwan). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(3), 1311-12 (Eng). By using multiconfiguration SCF calcs., the configurations necessary for describing the dissoen. behavior of O₂ were obtained by using a better than double-zeta-plus-polarization basis set for the 2 lowest excited states $a^1\Delta_g$ and $b^1\Sigma_g^+$. The total energies obtained from the MCSCF calcs. are -149.69937 and -149.67493 a.u. for the $a^1\Delta_g$ and $b^1\Sigma_g^+$ states, resp. The configuration expansion coeffs. are given. Comparisons are made with results obtained by the conventional Hartree-Fock method.

C.A., 1978, 82, N18

1978

O₂

расчет
электр.
структ.

8 Д155. Волновые функции МКССП $a^1\Delta_g^-$ и $b^1\Sigma_g^+$ -состояний O₂. Lie G. C. MCSCF wavefunctions for the $a^1\Delta_g$ and $b^1\Sigma_g^+$ states of O₂. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 3, 1311—1312 (англ.)

Методом МК ССП в базисе (13s8p2d) рассчитана электронная структура двух низших возбужденных состояний, $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ молекулы O₂. Состояние $a^1\Delta_g$ имеет энергию на 0,72 эв выше, чем основное состояние $X^3\Sigma_g^-$. Разность энергий между $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ составляет 0,67 эв. Энергии диссоциации $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ равны соответственно 2,18 и 1,51 эв. Отмечено существенное улучшение результатов по сравнению с данными расчетов методом ОХФ.

О. В. Сизова

ф. 1978, № 8

O₂

20 Б22. Волновые функции молекулы O₂ в состояниях $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$, рассчитанные методом МКССП. Lie G. C. MCSCF wavefunctions for the $a^1\Delta_g$ and $b^1\Sigma_g^+$ states of O₂. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 3, 1311—1312 (англ.) 1978

Многоконфигурационным методом ССП (МКССП) в расширенном базисе гауссовых орбиталей рассчитана молекула O₂ в состояниях $X^3\Sigma_g^-$, $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ при межъядерном расстоянии 2,297 ат. ед. Для всех состояний использован набор одинаковых пяти конфигураций, позволяющих правильно описать диссоциац. предел. Найдено, что для возбужденных состояний учет этих конфигураций позволяет вдвое уменьшить ошибки в энергии диссоциации, присущие методу ССП, и получить для энергий диссоциации правильные знаки. Разность термов состояний $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ составляет 0,67 эв, а для состояний $X^3\Sigma_g^-$ и $a^1\Delta_g$ разность термов оценена как 0,72 эв. Эксперим. значения равны 0,65 и 0,98, а расчет методом ССП дает оценки 1,33 и 1,34 эв соотв. Подчеркивается модельный характер расчета. Сделан вывод, что основная часть ошибки метода ССП устраняется при надлежащем описании процесса диссоциации в рамках схемы метода МКССП.

В. И. Пупышев

расчет
молесулы
ст. 11; до 8;

1

2, 1978, №20

Q₂

1979

3 Д185. Угловое распределение фотоэлектронов как функция энергии фотонов при фотоионизации основного состояния молекулярного кислорода. McCoy D. G., Morton J. M., Marr G. V. The angular distribution of photoelectrons as a function of photon energy for the ground state photoionisation of molecular oxygen. «J. Phys.», 1978, B11, № 18, L547—L549 (англ.)

фото-
ионизация

С использованием синхротронного излучения, получаемого от синхротрона NINA с энергией электронов 5 Гэв, измерены значения параметра асимметрии β в угловом распределении фотоэлектронов для фотоионизационного перехода $3\Sigma_g^- \rightarrow X^2\Pi_g$ в молекуле кислорода. Зависимость β от энергии фотонов в области 20—45 эв имеет монотонный характер с резким возрастанием от значения $-0,5$ при 20 эв до значения $+1,0$ при 30 эв и дальнейшим очень медленным возрастанием до 1,2. В целом результаты согласуются с эксперим. значениями β , измеренными ранее при энергиях резонансных линий HeI и HeII. Теоретич. расчеты параметра β , проведенные Хиротой («J. Electron. Spectrosc. Rel. Phen.», 1976, 9, 149), приводят к совершенно иной зависимости $\beta(\nu)$, хотя теоретич. и эксперим. значения β при $h\nu=21,2$ эв совпадают. Обсуждается влияние симметрии перехода на величину β .

Е. П. Смирнов

ф. 1979, N3

1978

O₂

(P) 14 Б269. Индуцированное давлением поглощение микроволнового излучения молекулой кислорода. Ma-sataka Mizushima. Pressure-induced absorption of microwave radiation by the oxygen molecule. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 19, № 1, 63—68 (англ.)

М. В.
Мурзин

Известные факты о том, что эксперим. значения МВ-поглощения кислорода ~9, 23 и 60 ГГц при высоких давл. превышают почти в 2 раза величины поглощения, вычисленные по теории Ван—Флека, интерпретированы на основе ранее развитой автором теории индуцированного давл. поглощения. Во всех случаях в результате учета индуцированного давл. поглощения наряду с магнитным дипольным поглощением достигнуто лучшее согласие между эксперим. и расчетными значениями МВ-поглощения. Оставшаяся разность между эксперим. и расчетными величинами, особенно значит. для области 9 ГГц, по-видимому, вызвана нерезонансным поглощением, индуцированным давл. В области 60 ГГц величина индуцированного давл. поглощения кислорода растет прямо пропорционально давлению.

С. Н. Мурзин

х. 1978, N14

O₂

1978

24 Б1419. Фотодиссоциация ионов O₂⁺. McGill
very D. C., Morrison J. D., Smith D. L. The photo-
dissociation of O₂⁺. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 10,
4759—4761 (англ.)

фото-
диссоциация

На масс-спектрометрической установке, состоящей из двух последовательных квадрупольных масс-спектрометров, получен спектр фотодиссоциации (ФД) ионов O₂⁺ (зависимости эффективности ФД в процессе O₂⁺ + hν → O⁺ + O от энергии фотонов E), полученных при ионизации молекул O₂ электронным ударом. ФД O₂⁺ производили перестраиваемым лазером со спектральной шириной ~3 см⁻¹. Спектр полной ФД в области E = 1,7—2,8 эв состоит из серии регулярных пиков, наложенных на широкую непрерывную полосу, простирающуюся во всей видимой области спектра. Поскольку ионы O⁺ возникают только из ионов O₂⁺, получающихся при энергиях электронов свыше 16,5 эв, сделан вывод, что ионы O₂⁺, испытывающие ФД, находятся в электронно-возбужденном состоянии с достаточно большим временем жизни. На основании сопоставления полученного спектра ФД O₂⁺ с известным из лит-ры

X-1978, N24

фотоэлектронным спектром O_2 сделан вывод, что
 наблюдаемая структура обусловлена переходом с ко-
 лебательных уровней состояния $a^4\Pi_u$ иона C на ко-
 лебательные уровни состояния $b^4\Sigma_g^-$, к-рое затем пре-
 диссоциирует в состояние $f^4\Pi_g$. Ширина полоса
 континуума м. обусловлена прямым возбуждением
 отталкивательной части состояния $f^4\Pi_g$ иона O_2 . Сде-
 лан вывод, что зарегистрированный спектр O_2^+
 должен быть сходен со спектром оптич. поглощения
 этого иона.

В. Е. Скурат



O2

Chemica 674-1 1978.
BX - 1369

Mehander S.P., et al.

publ.

2000.

21. 1978.

Indian J. Chem., 1978,
247-49

A16,

O₂ Lammieu 8317 | 1978

Mohammad Noor S.

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1978, 16, 752-760

On the Generalization of the
Linnett Potential



O₂

Lammela 8302 | 1978

Mohammad S. Noor,

paere
romeny,
Khubox

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1978, 16,
761-65

1948

 O_2 N_2 C_2H_2 NH_3

89: 82354t CARS-spectroscopy with a pulsed dye-laser system. Nitsch, W.; Kiefer, W. (Sekt. Phys., Univ. Muenchen, Munich, Ger.). *J. Mol. Struct.* 1978, 45, 343-8 (Eng). A computer-controlled CARS system which includes pulsed dye lasers for excitation is described. The performance of the system is demonstrated on high resolu. (0.03 cm^{-1}) CARS spectra of the Q branches of O_2 , N_2 , ν_1 of C_2H_2 , and ν_1 of NH_3 . The CARS spectra of some of the gases could also be simulated by means of a computer calcn. based on a classical approach.

(cncwip K.P.)

(+3) 

C.A., 1948, 89, N10

1978

Park, Jae H.

From Sci. Tech. Acrosp. Rep.

1978, IG(3), Abstr. No. H78-12608.

аннот
и.с. черт

ан. H₂O-III

1978

 O_2 C_2H_4 ref. acc.
factef.

Id. Coen. 24

⑩ ☒

89: 206637j Study of the mixing of Rydberg and valence states using the MRD-CI method. Peyerimhoff, S. D. (Lehrstuhl Theor. Chem., Univ. Bonn, Bonn, Ger.). *Gazz. Chim. Ital.* 1978, 108(7-8), 411-18 (Eng). The MRD-CI method is employed to study the interaction between Rydberg and valence-shell states at the electronic level. Examples treated in detail include O_2 , N_2 , and C_2H_4 ; the mixed character of a given state can appear at either the CI or the orbital level or both. Various bands in the O_2 spectrum are attributed to transitions to vibrational levels in potential curves arising from Rydberg-valence state interactions. Properties of the C_2H_4 $V(1^1B_{1u})$ state, which possesses mixed (π, π^*) and $(\pi, 3d\pi)$ character, are given. The location of the 2^3B_{1u} $(\pi, 3d\pi)$ state is unperturbed and calcd. in the immediate neighborhood (8.78-8.98 eV) of the other members of the $(\pi, 3d)$ Rydberg species. This result speaks clearly against earlier speculation which does not allow the sep. existence of both a $2p^*$ valence and a Rydberg $3d\pi$ upper orbital. Implications of Rydberg-valence interactions for photochem. processes are also discussed.

P. A. 1978, 89, 1024

O₂

B9-XI-6234

1978

90: 78616h Herzberg transition I in the absorption spectrum of an oxygen-18 isotope. Prikhot'ko, A. F.; Pavloshchuk, V. A.; Shanskii, L. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1978, 45(4), 665-71 (Russ). The absorption spectra of ¹⁸O₂ was obtained in the range of mol. transitions $A^3\Sigma_u^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$. The method of isotopic substitution was used to det. abs. quantization of vibrational levels in excited $A^3\Sigma_u^+$ O₂ states. The dependence of the value of the rotational const. B_v' on vibrational quantum no. v' was found as the convergence limit of the Herzberg I series for mols. ¹⁸O₂.

С.А. 1979, 20, № 10

С.А. 1979, 20, № 10

⊕ O₂

ВУ-Х/6234

1978

6 Б158. Переход Герцберга I в спектре поглощения изотопа кислорода ¹⁸O₂. Прихотько А. Ф., Павлощук В. А., Шанский Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1978, 45, № 4, 665—671

М.И.

Для определения абс. нумерации полос в системе Герцберга I измерены и проанализированы изотопные сдвиги в спектрах поглощения кислорода (чистый ¹⁸O и смесь 75% ¹⁸O + 25% ¹⁶O, $l=8$ м, $p=7,6$ атм). В области 38 000—42 000 см⁻¹ наблюдается 8 полос ($v'=5-12-v''=0$) перехода $A^3\Sigma_u^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$. Приведены волновые числа центров вращательных линий для ¹⁸O₂ со значениями $K=1-21$. Найдено, что правильной является нумерация предложенная Бройдой и Гейдоном (значение $\nu_0=35007,15$ см⁻¹). По наклону прямой описывающей зависимость $\nu(K)$ от $K(K+1)$ (Q-ветвь) вычислены $B_{v'=5-12}$ (соотв. 0,726; 0,704; 0,678; 0,649; 0,613, 0,570, 0,512; 0,410 см⁻¹). Полоса 12—0 является последним членом серии I Герцберга ¹⁸O₂, для к-рой определен предел сходимости $\nu_d=41\,300 \pm 10$ см⁻¹.

В. М. Ковба

2.1979, N6

02

ВФ-Х1-6234

1978

1 Д322. Переход Герцберга I в спектре поглощения изотопа кислорода $^{18}\text{O}_2$. Прихотько А. Ф., Павлошук В. А., Шанский Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1978, 45, № 4, 665—671

Получен спектр поглощения $^{18}\text{O}_2$ в области молекулярного перехода $A^3\Sigma_u^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$. Методом изотопич. замещения установлена абс. нумерация колебательных уровней в возбужденном состоянии $A^3\Sigma_u^+ \text{O}_2$. Определена зависимость величины вращательной константы B_v' от колебательного квантового числа v' и найдена граница схождения полос серии Герцберга I для молекулы $^{18}\text{O}_2$.

Резюме

спектр
поглощения

Ф. 1979, N1

2-атомные молекулы

O₂

диссоциирующая
молекула

номер 6791

1948

Ramakrishna M, et al
Chem. Phys. Lett. 1948,
57, 4, 557-60

ал. H₂-III

1978

O₂

2 E569. Мольный объем и плотность твердого кислорода, находящегося в равновесии с паром. Roder H. M. The molar volume (density) of solid oxygen in equilibrium with vapor. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1978, 7, № 3, 949—957 (англ.)

Обзор. Анализируются и критически оцениваются эксперим. данные по плотности О в твердом состоянии. Внутренне согласованные данные о мольном объеме и плотности твердого О в интервале от 4,2° К до $T_{ж}$, включающие также сведения об изменениях объема при фазовых переходах, представлены в виде таблицы. Библ. 67.

Б. Могутнов

обзор.



сп. 1978, 102

1978

Д396. Образование $O_2(c^1\Sigma_u^-, C^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+)$ в результате рекомбинации атомов кислорода. Slan-ger T. G. Generation of $O_2(c^1\Sigma_u^-, C^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+)$ from oxygen atom recombination. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 11, 4779—4791 (англ.)

Спектр послесвечения разряда в O_2 —He исследован в области 4000—8000 Å. Наряду с ожидаемой системой полос $O_2(c^1\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-)$ обнаружено три новых системы, $C^3\Delta_u - a^1\Delta_g$, $C^3\Delta_u - X^3\Sigma_g^-$ и $c^1\Sigma_u^- - a^1\Delta_g$, до сих пор не наблюдавшиеся в лабораторных условиях. Идентификация полос этих систем выполнена на основании анализа изотопич. эффекта. В системе $C - a$ наблюдается длинная прогрессия $0 - v''$, в которой проявляются высокие колебательные уровни состояния $a^1\Delta_g$. Уточнены значения колебательных постоянных для состояния $a^1\Delta_g$: $\omega_e = (1510,23 \pm 0,34) \text{ см}^{-1}$ и $\omega_e x_e = (13,368 \pm 0,12) \text{ см}^{-1}$. В системе $C - a$ проявляется только одна

перу, 1979, № 4

спинная компонента $\Omega=1$ состояния $C^3\Delta_u$, а в системе
 $S-X$ — компонента $\Omega=2$. С привлечением имеющихся
 литературных данных оценены колебательные постоян-
 ные состояния $C^3\Delta_u$ ($\omega_e = (803,5 \pm 10) \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e =$
 $(8,18 \pm 0,13) \text{ см}^{-1}$ и $\omega_e y_e = (-0,872 \pm 0,006) \text{ см}^{-1}$) и
 времена жизни состояний: $A^3\Sigma_u^+(v=0-6)$, $\tau=250-$
 16 мксек; $c^1\Sigma_u^-(v=0-10)$, $\tau=25-50$ сек; $C^3\Delta_u(\Omega=1,$
 $v=0-6)$, $\tau=5-50$ сек; $C^3\Delta_u(\Omega=2, v=6)$, $\tau=10-$
 100 сек. Показано, что исследованное излучение моле-
 кул O_2 обусловлено рекомбинацией атомов кислорода.
 Отмечено, что введение CO_2 в область, расположенную
 за зоной генерации атомов кислорода, существенно
 увеличивает интенсивность излучения из состояния
 $c^1\Sigma_u^-$. Последнее объясняет высокую интенсивность из-
 лучения $c^1\Sigma_u^-$ в ночном свечении Венеры. Библ. 31.
 В. С. Иванов

1978

13 Б135. Образование O_2 ($c^1\Sigma_u^-$, $C^3\Delta_u$, $A^3\Sigma_u^-$) при рекомбинации атомов кислорода. S l a n g e r T. G. Generation of $O_2(c^1\Sigma_u^-$, $C^3\Delta_u$, $A^3\Sigma_u^+$) from oxygen atom recombination. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 11, 4779—4791 (англ.)

Измерены спектры послесвечения разряда кислорода в гелии в области 4000—8000 Å. Наблюдены известные системы полос $A^3\Sigma_u^+ - X^3\Sigma_g^-$ и $c^1\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$, а также новые системы $C^3\Delta_u - a^1\Delta_g$, $C^3\Delta_u - X^3\Sigma_g^-$ и $c^1\Sigma_u^- - a^1\Delta_g$. Для отнесения полос использовалось изотопозамещение по кислороду. Отмечено, что спектр системы $C - a$ является первым в газ. фазе, связанным с переходами на высшие колебательные уровни $v'' = 3 - 9$ состояния $a^1\Delta_g$. Проведен анализ колебательной структуры этой системы. Определены след. колебательные постоянные: $\omega_e = 1510,23 \pm 0,34$, $\omega_e x_e = 13,368 \pm 0,12$ см⁻¹. В системе $C - a$ обнаружена лишь спиновая компонента $\Omega = 1$ состояния $C^3\Delta_u$, а в системе $C - X$ компонента $\Omega = 2$. Из полученных данных для $v = 0$, лит. данных для $v = 5,6$ и известной энергии диссоциации оценены колебатель-

Q₂
М. П.

ж. 1979, № 3

ные постоянные для состояния $C^3\Delta_u$: $\omega_c = 803,5 \pm 1,0$, $\omega_{cx_e} = 8,18 \pm 0,13$, $\omega_{cy_e} = -0,872 \pm 0,006$ см⁻¹. Отмечено, что хорошее согласие с данными для «полос высокого давления» O_2 указывает на то, что предполагаемый комплекс O_4 является очень слабо связанным и колебательные уровни O_2 в нем практически не возмущены. Оценены радиац. времена жизни для трех верхних состояний O_2 : 250—160 мксек для $A^3\Sigma_u^+$ ($v=0-6$), 5—50 сек для $C^3\Delta_u$ ($\Omega=1$, $v=0-6$), и 25—50 сек для $c^1\Sigma_u^-$ ($v=0-10$). Аналогичные спектры наблюдаются также в послесвечении разряда N_2-He , титрованном NO . Сделан вывод, что источником возбуждения молекул O_2 является рекомбинация атомов кислорода.

С. Б. Осин



1978

90: 63884v Generation of molecular oxygen($c^1\Sigma_u^-$, $C^3\Delta_u$, $A^3\Sigma_u^+$) from oxygen atom recombination. Slanger, T. G. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(11), 4779-91 (Eng). The spectrum produced in the afterglow of an O_2 -He discharge was studied between 4000 and 8000 Å. Until recently, only the $O_2(A^3\Sigma_u^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$ emission bands were obsd. in this region. The work of G. M. Lawrence et al. (1977) established that, under the appropriate conditions, the $O_2(c^1\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$ system could also be obsd. Their results were not duplicated and in addn. three O_2 band systems not previously seen in gas phase lab. spectra were discovered. These systems are $C^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g$, $C^3\Delta_u \rightarrow X^3\Sigma_g^-$, and $c^1\Sigma_u \rightarrow a^1\Delta_g$ and were pos. identified by isotopic substitution expts. The O- ν'' progression in the C-a system is the 1st gas phase spectrum involving a large range of the higher vibrational levels in the $a^1\Delta_g$ state. Anal. of the system establishes a new set of $a^1\Delta_g$ vibrational consts.: $\omega_e = 1510.23 \pm 0.34$ cm⁻¹, and $\omega_e x_e = 13.368 \pm 0.12$ cm⁻¹. The C-a system involves only the $\Omega = 1$ spin

O₂

u, n.



C.A. 1979 QONB

component of the $C^3\Delta_u$ state. The $C^3\Delta_u \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ system, on the other hand, radiates mainly through the $\Omega = 2$ component. By combining the present data on the $C^3\Delta_u$ ($v = 0$) level, the absorption measurements of Herzberg on the $v = 5$ and $v = 6$ levels, the known dissocn. energy, and the high-pressure bands measured, vibrational consts. were established for the $C^3\Delta_u$ state. These are $\omega_e = 803.5 \pm 1.0 \text{ cm}^{-1}$; $\omega_e x_e = 8.18 \pm 0.13 \text{ cm}^{-1}$, and $\omega_e y_e = -0.872 \pm 0.006 \text{ cm}^{-1}$. From data existing in the literature, combined where necessary with the present measurements, radiative lifetimes for the 3 O_2 metastable states that were obsd. are estd. From the band strength data, one may calc. $\tau = 250\text{-}160 \text{ ms}$ for $A^3\Sigma_u^+(v = 0\text{-}6)$, and deduce an est. of $\tau = 25\text{-}50 \text{ s}$ for $c^1\Sigma_u^-(v = 0\text{-}10)$. For $C^3\Delta_u(\Omega = 1, v = 0\text{-}6)$, the estd. lifetime is $5\text{-}50 \text{ s}$, and for $C^3\Delta_u(\Omega = 2, v = 6)$, the estd. lifetime is $10\text{-}100 \text{ s}$. The O_2 spectra were produced not only in $O_2\text{-He}$ afterglows, but also in $NO\text{-titrated } N_2\text{-He}$ afterglows (i.e., in an $O_2\text{-free}$ environment), proving that the source of excited O_2 mols. is O atom recombination. The results are pertinent to O_2 emissions in the terrestrial and Venusian air glows, and to combustion processes.

1978

O₂ $C'^1_\Delta - a'^1_\Delta$ вечернее
вечернее

90:31711c The O₂(C³Δ_u → a¹Δ_g) bands in the nightglow spectrum of Venus. Slanger, T. G.; Black, G. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, Calif.). *Geophys. Res. Lett.* 1978, 5(11), 947-8 (Eng). The 4000-7000 Å nightglow spectrum of Venus, as reported by the Russian Venera 9 and 10 probes, is composed primarily of the O v'' progression of the O₂(c¹Σ_u → X³Σ_g) system. Recent observations in a lab. afterglow system established other O₂ emissions in the same spectral region. Based on this work, closer scrutiny of the Venera spectrum reveals the presence of the C³Δ_u → a¹Δ_g O-v'' progression, known as the Chamberlain system in the terrestrial airglow, and thus the C³Δ_u → a¹Δ_g bands are the 1st identified O₂ emission that is common to both Earth and Venus.

C.A. 1979, 20, N4

O₂

1979

16 Б146. Полосы испускания метастабильного кислорода. S l a n g e r T. G. Metastable Oxygen Emission Bands. «Science», 1978, 202, № 4369, 751—753 (англ.)

Рассматриваются переходы между различными электронными состояниями молекулы кислорода ($A^3\Sigma_u^+$, $C^3\Delta_u$, $c^1\Sigma_u^-$, b^1g^+ , $a^1\Delta_g^-$, $X^3\Sigma_g^-$), имеющими общий диссоциац. предел $O(^3P) + O(^3P)$. Измерены спектры послесвечения (4000—8000 Å) продуктов, образующихся при прохождении через МВ-разряд смесей, содержащих гелий (газ-носитель), кислород ($^{16,18}O_2$), CO_2 ; азот, окись азота. Идентифицированы полосы, принадлежащие пяти из шести переходов между верхними (A, C, c) и нижними (X, a) состояниями молекулы O_2 ($c, C, A \rightarrow X, C, c \rightarrow a$), а также полосы перехода $b \rightarrow X$. С целью выяснения природы возникновения спектра испускания исследовано влияние состава исходных смесей на интенсивность полос различных систем. Установлено, что добавление CO_2 усиливает интенсивность полос системы $C \rightarrow X$ и одновременно тушит испускание NO_2 (рекомбинация атомов кислорода и молекул NO , образующихся за

М.Н.

X.1979, N16

счет следов азота в газе-носителе). При замене гелия
 и кислорода на азот или азот-аргоновую смесь интен-
 сивность полос $s \rightarrow X$ перехода меняется мало и, следова-
 тельно, состояние $s^1\Sigma_u$ образуется лишь при рекомбина-
 ции атомов кислорода без участия молекул O_2 и CO_2 .
 На основании наличия только спиновых компонент
 $\Lambda=1$ в полосах системы $C-a$, предполагают, что имеет
 место смещение в результате спин-орбитального взаи-
 модействия $^3\Delta_{1u}$ компоненты с расположенным вблизи
 состоянием $^1\Pi_{1u}$. Система $C-a$ представляет собой
 прогрессию впервые наблюдаемых полос $v'=0 \rightarrow v'=3-9$
 (4553, 4863, 5212, 5606:6055, 6572, 7172 Å). Рассчитан-
 ные путем интерполяции наборов факторов Франка—
 Кондона для переходов $A-a$ и $s-a$ относит. интенсив-
 ности полос $C-a$ -перехода удовлетворительно согла-
 суются с экспериментальными.

В. М. Ковба

кду
лы

1978

O₂

21 Б1342. Хемилюминесцентные матричные реакции атомов кислорода, серы и $O(^3P) + H_2S$. Smardzewski Richard R. Chemiluminescent matrix reactions of atomic oxygen, sulfur, and $O(^3P) + H_2S$. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 6, 2878—2888 (англ.)

химическ.

16000000

Замороженные смеси инертного газа $X(X=Ar, Kr, Xe)$ с O_3 , $H_2S + O_2$ и $O_3 + H_2S$ при t -ре 8 К облучали светом Hg-лампы низкого давл. (в нек-рых опытах — светом кварцевой Hg-лампы высокого давления). Послед. напрев облученных образцов в диапазоне 8—20 К приводил к возникновению интенсивной хемилюминесценции (ХЛ) в видимой спектральной области. Использование оптич. многоканальной техники позволяло производить одновременную регистрацию многих линий в широком спектральном диапазоне непосредственно в процессе матричной диффузии активных частиц, созданных фотолизом. Для каждой спектральной системы наблюдали большие колебательные последовательности. Найдено, что при рекомбинации атомов $O(^3P)$ в Ar- и Kr-матрицах при t -ре ~ 17 К возникает интенсивная система полос $O_2(A^3\Sigma_u^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$ (или же система по-

X-1978, N21

лос $O_2(C^3\Delta_1 \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$. Она отсутствует в Хе-матрице, что объясняется быстрой диффузией и рекомбинацией атомов $O(^3P)$ еще до процесса нагревания матрицы. Аналогичные матричные эксперименты с атомами S, создаваемыми при фотолизе H_2S , давали интенсивную флуоресценцию $S_2(B^2\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$ во всех трех матрицах. В Ag- и Kг-матрицах наблюдались большие структурированные колебательные последовательности $(0, \nu'')$, а в Хе-матрице — широкая практически бесструктурная полоса испускания в области 365—532 нм. Предполагается, что уширение полосы обусловлено флуоресценцией из колебательно нерелаксированных состояний z (или) образованием вандерваальсова комплекса $S_2^* \cdots Xe$. В присутствии следов O_2 в области 390—520 нм обнаруживается спектр фосфоресценции $SO_2(a^3B_1 \rightarrow X^1A_1)$, интенсивность которого на несколько порядков выше интенсивности спектра флуоресценции S_2 . Спектр обнаруживает интенсивные колебательные последовательности типа $a(0, 0, 0) \rightarrow X(\nu_1'', \nu_2'', 0)$. Предложено, что $SO_2(a^3B_1)$ образуется в результате рекомбинации в матричной клетке $(O + SO)$ продуктов реакции $S(^3P) + O_2$. Контролируемое нагревание после фотолиза Ag-матриц, содержащих O_3 и H_2S , дает спектр фосфоресценции SO_2 и две полосы испускания меньшей интенсивности в области 520—675 нм с колебательными расщеплениями $\sim 1040 \text{ см}^{-1}$. Предложено, что $SO_2(a^3B_1)$ в этой матрице возникает в реакции атомов O с SO и (или) HSO-осколками, образующимися в реакции $O + H_2S \rightarrow [H_2SO] \rightarrow HSO + H$ (или $H_2 + SO$). Малоинтенсивные полосы испускания могут быть обусловлены возбужденными частицами HSO^* , H_2SO^* или неким излучательным состоянием SO.

В. Е. Скурят

10 Д714. Реакции атомов O, S и O(³P) с H₂S в матрицах, сопровождающиеся хемилюминесценцией. Smardzewski Richard R. Chemiluminescent matrix reactions of atomic oxygen, sulfur, and O(³P) + H₂S. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 6, 2878—2888 (англ.)

В области 200—650 нм получены спектры хемилюминесценции, сопровождающие рекомбинацию атомов S, O и O(³P) в матрицах Ar, Kr и Xe при т-рах 8—20° K. Спектры получены при нагревании образцов, содержащих O₃, H₂S и смесь (O₂+H₂S) с типичной относит. конц-ией 0,01, после предварительного облучения светом Hg-лампы. Подробно обсуждены процессы, связанные с диффузией атомов S и O — продуктов УФ-фотолиза. Большинство спектров имеет хорошо развитую колебательную структуру, соответствующую переходам $^3\Sigma_u^+ \rightarrow ^3\Sigma_g^-(O_2)$, $^3\Sigma_u^- \rightarrow ^3\Sigma_g^-(S_2)$. Отсутствие такой структуры в спектре S₂ в Xe объяснено наличием флуоресценции без колебательной релаксации и образованием ван-дер-ваальсовских комплексов S₂* — Xe. Зарегистрирована эмиссия, приписанная переходам $^3B_1 \rightarrow ^1A_1(SO_2)$ при исследовании смеси H₂S+O₂ в Ar, Kr и Xe. Проведена идентификация полос спектров; обсуждены процессы, приводящие к образованию возбужденных частиц различных типов. Библ. 66.

10 Д714

O₂

SO₂

S₂

спектр
хемилюм.

(+2) 17

сп; 1978, N/10

1948

 O_2 SO_2

chemiluminescence
 in warmup.

88: 143660t Chemiluminescent matrix reactions. Smardzewski, Richard P. (Chem. Div., Nav. Res. Lab., Washington, D. C.). *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1978, 82(1), 108-9 (Eng). Optical multichannel technique were used to analyze the visible chemiluminescence generated by diffusion-controlled warmup (8 → 20 K) of sep. UV photolyzed inert gas matrixes contg. O_3 , H_2S , $H_2S + O_2$, and $O_3 + H_2S$. Emission spectra of O_2 ($A \rightarrow X$), S_2 ($B \rightarrow X$), SO_2 ($a \rightarrow X$), and SO_2 ($a \rightarrow X$), resp., were recorded at various warmup temps. with a modified 0.3-m monochromometer which incorporated a low dispersion grating (147.5 grooves/nm) blazed at 500 nm.

(+1) A

C.A., 1978, 82 v20

Q₂

номер 6686 1978

Spiridonov, V. P., et al

Chem. Phys. Lett. 1978,
56(2), 343-6

с. 12.

с. 12 - 111

O₂

Summer 6529

1978

89: 80454b Unrestricted Hartree-Fock description of the ground and the lowest singlet states of the oxygen molecule. Takahashi, Mitsuo; Fukutome, Hideo (Dep. Phys., Kyoto Univ., Kyoto, Japan). *Prog. Theor. Phys.* 1978, 59(6), 1787-801 (Eng). The electronic structures of the triplet ground state $^3\Sigma_g^-$ and the lowest singlet state $^1\Delta_g$ of O₂ with varying interat. distance are studied with the UHF theory. The nature of the triplet Hartree-Fock ground state in the dissocn. process changes from the axial spin wave type ($^3\text{ASDW}$) near the equl. distance, first to an axial spin wave one (^3ASW) and secondly to a transition spin wave one (^3TSW). In the ^3ASW which emerges from an instability of $^3\text{ASDW}$, localization of orbital angular momentum toward both atoms takes place. In the ^3TSW emerging from an instability of ^3ASW , rotation and concurrent localization of the spin d. vector take place, and it converges to the correct dissocn. limit O(3P)+O(3P) consisting of atoms with spin and orbital angular momenta. The ^3TSW contains all the configurations which are essential to obtain the correct dissocn. limit.

Ref. Alex.
factor

C.H. 1978, 89, N/16

O₂

расчет E_i

ф. 1949, N 1

1 Д119. Описание основного и низшего возбужденного состояний молекулы кислорода неограниченным методом Хартри—Фока. Takahashi Mitsuo, Fukutome Hideo. Unrestricted Hartree-Fock description of the ground and the lowest singlet states of oxygen molecule. «Progr. Theor. Phys.», 1978, 59, № 6, 1787—1801 (англ.)

Рассмотрены изменения волн. ф-ций неограниченного метода Хартри—Фока (НХФ) основного $^3\Sigma_g^-$ и низшего возбужденного $^1\Delta_g$ -состояний молекулы O₂ при увеличении межъядерного расстояния. В ходе процесса диссоциации природа триплетного состояния изменяется дважды, что отражает изменение относит. роли различных корреляционных эффектов. Волн. ф-ция НХФ обеспечивает необходимую локализацию и изменение схем связи орбитального и спинового моментов и позволяет правильно описать диссоциативный предел O(³P) + O(³P). Проанализирована структура ф-ций $^3\Sigma_g^-$ и $^1\Delta_g$ с точки зрения вклада различных конфигураций. Полученные результаты, а также аналогичное рассмотрение системы N₂, показывают, что метод НХФ с обобщенными спин-орбиталями дает хорошее приближение к полной волн. ф-ции КВ для основных состояний систем со сложной структурой электронных корреляций.

В. И. Барановский

ф. 1949, N 1

$O_2, O_2^+ (D_0)$ XI-6227 1948

Tadieddine M., Abouaf R., Cosby P.C.,
Heber B.A., Moseley J. T.

J. Chem. Phys., 1948, 69, n2, 710-719 (arise.)

Predissociation photofragment
spectroscopy of O_2^+ quartet states.



PNEXM., 1949, 4 5 1091 10.11 (P)

1978

Tiernan T.O., et al

Adv. Mass Spectrom.

1978, 7A, 136-42

(See NO^- ; III)

1978

O₂
SO

90: 212719z Corrections to the effective orbital g-factor of diatomic ${}^1\Delta$ states. Veseth, L. (Inst. Phys., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Mol. Phys.* 1978, 36(4), 1255-60 (Eng). The orbit-orbit correction to the effective orbital g-factor of the 1st excited ${}^1\Delta$ states of O₂ and SO was calcd. Another correction due to the motion of the nuclear center of mass was also considered. Rotational consts. and g-factors were detd. by a weighted nonlinear least squares fit of both zero-field and Zeeman expts.

Specific
no. 11.

(+1) ☒

P.A. 1079, 90, N21B

02

1978

1 Б48. Неэмпирические и псевдопотенциальные расчеты некоторых молекул, содержащих атомы второго, третьего и четвертого периодов. Сравнительное исследование. Wahlgren Ulf. Ab-initio and pseudo-potential calculations on some first, second and third row molecules. A comparative study. «Chem. Phys.», 1978, 32, 215—221 (англ.)

Проведены расчеты энергии и равновесных геометрич. конфигураций молекул CO , O_2 , SO_2 , NiO , NiCH_2 , $\text{Ni}(\text{CH}_3)_2$, а также атомов Ni и Mn . Сопоставлены между собой результаты неэмпирич. расчета с учетом всех электронов в системе и расчетов в приближении псевдопотенциала. Использованы выражения для псевдопотенциалов в форме Бонифачича — Хузинаги, но с другой параметризацией. Базисные наборы для расчетов с псевдопотенциалами составлены из орбиталей $2s$ - и $2p$ -типа для атомов второго и третьего периодов, $3s$ - и $2d$ -типа для металлов и $4s$ - и $2d$ -типа для никеля. На основе полученных результатов сформулированы след. выводы. Значения энергии и геометрич. параметров оказываются значительно чувствительнее к параметрам псевдопотенциала в случае молекул, содержащих атомы углерода, чем в случае молекул, содер-

равновесная геометрия
эксперимент

(+3) ☒

20.1943, N4

жащих атомы кислорода или серы. Для атомов третьего периода базисные наборы должны содержать более двух функций на каждую электронную оболочку. При расчетах св-в металлов необходимо пользоваться не-
большими базисными наборами, чтобы избежать вари-
анта коллапса для состояний с низкой симметрией.

А. В. Немухин

O₂

9 Б105. Дифференциальные и интегральные сечения возбуждения O₂ электронным ударом. II. Оптически запрещенные переходы из основного состояния. Wakiy K. Differential and integral cross sections for the electron impact excitation of O₂. II. Optically forbidden transitions from the ground state. «J. Phys.», 1978, B11, № 2, 331—3938 (англ.)

Измерены спектры возбуждения O₂ электронным ударом в области рассеивающих углов 10—130° и в области энергетич. потерь электронов 0—7,1 эв. Определены дифференциальные и интегральные сечения возбуждения состояний $a^1\Delta_g$, $b^1\Sigma_g^+$ и $A^3\Sigma_u^+ + C^3\Delta_u + c^1\Sigma_u^-$ (в области энергетич. потерь 4,5—7,1 эв) при энергиях удара электронов $E_0 = 20—200$, $20—150$ и $20—500$ эв соотв. Проведен анализ угловой и энергетич. зависимости дифференциальных сечений и количественно рассмотрена зависимость интегральных сечений от энергии. Наличие оптически запрещенных переходов $a^1\Delta_g - X^3\Sigma_g^-$ и $b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ объясняют механизмами электронного обмена. То же объяснение предложено для $\sigma_{\text{асс}}$ в области $E_0 < 100$ эв. В области $E_0 > 100$ эв преимущественный вклад в σ дают разрешенные переходы на состоя-

Спектр
возбужд.

2.1979, N 9

ния $A^3\Sigma_u^+$ и $C^3\Delta_u$ и осуществляется прямой механизм рассеяния. Отмечено, что зависимость полученных интегральных сечений от E_0 качественно согласуется с теор. предсказаниями. Ч. I см. пред. реферат. С. Б. Осин

O₂

1979

Aeschliman D.P.
et al.

Koselom.
Blaugam.
Cneup

J. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Transfer.
1979, 21 (4), 293 - 304

(cur. N₂ ; III)

Q2

1979

Berkowitz J.

фотомониз. U.S. Dep. Commer.
Nat. Bur. Stand. Spec.
Publ., 1979, N 561/1,
757-69



См S2 ; III

1949

O₂

2 Б247. Экспериментальное исследование тонкой структуры вращательного спектра кислорода. Vergard M., Lallemant P. Etude experimentale de la structure fine du spectre Raman de rotation de l'oxygene. «Opt. Commun.», 1979, 30, № 2, 175—180 (франц. рез. англ.)

С разрешением 0.2 см^{-1} изучена ТС области полос O (3)—S (9) вращательного спектра КР (λ 5145 Å) газообразного кислорода при давл. 1—15 атм и $T = 290^\circ \text{K}$. Положение и интенсивность линий спектра хорошо согласуется с теор. оценками Альтмана с соавт. («Z. Naturforsch.», 1972, 270, 56). Исследовано уширение давлением триплета S (1). Установлено, что даже при сильном перекрывании компонент триплета ($p \sim 15 \text{ атм}$) его можно представить в виде трех перекрывающихся контуров лоренцевской формы, коэф. уширения давл. равен $5.5 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1}/\text{атм}$. А. В. Бобров

Вращательный
спектр

X1980.162

02

2 Д391. Экспериментальное исследование тонкой структуры вращательного спектра комбинационного рассеяния кислорода. Etude experimentale de la structure fine du spectre Raman de rotation de l'oxygene. Berard M., Lallemand P. «Opt. Commun.», 1979, 30, № 2, 175—180 (франц.; рез. англ.)

спектр К.Р.

Получены спектры комб. рас. газообразного кислорода при давл. 1—15 атм с разрешением $0,2 \text{ см}^{-1}$ при помещении образца внутрь резонатора лазера Ar^+ . При 1 атм наблюдается тонкая структура всех линий, обусловленная расщеплением вращательных термов из-за взаимодействия вращательного ядерного момента молекулы со спиновым моментом основного состояния электронной оболочки, разным нулю. Относит. интенсивности и положения компонент измерены для рэлеевской линии и первых четырех линий ветви S. Для ветви S отмечено удовлетворительное согласие с предсказанием теории (Altman K. et al. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, 56). Исследовано влияние давления на структуру триплета, отвечающего линии S(1). При повышении т-ры компоненты сильно перекрываются, общий контур остается суммой трех дисперсионных кривых, не обнаруживая тенденции к сужению. Библ. 20.

Ф.180.Н2

М. Тонков

Q2

Common 9032

1979

Boča R.

Ref. coll.
part

Collect. Czech. Chess.

Common, 1979, 44

3041-71

O₂

3 Д446. Высокотемпературные исследования молекул кислорода в синглетных состояниях $O_2(^1\Sigma_g^+)$ и $O_2(^1\Delta_g)$ в ударной трубе. High temperature studies of singlet excited oxygen, $O_2(^1\Sigma_g^+)$ and $O_2(^1\Delta_g)$, with a combined discharge flow/shock tube method. Borrell P., Borrell Patricia M., Pedley M. D., Grant K. R. «Proc. Roy. Soc. London», 1979, A367, № 1730, 395—410 (англ.)

С помощью ударной трубы исследованы реакции с участием возбужденных в синглетные состояния молекул $O_2(^1\Sigma_g^+)$ и $O_2(^1\Delta_g)$ при т-рах 650—1650° К. Возбуждение молекул O_2 осуществлялось в потоке кислорода перед напуском в ударную трубу с помощью СВЧ-разряда. Контроль за изменениями концентрации возбужденных молекул O_2 в зоне ударной волны осуществлялся по интенсивности их флуоресценции в областях 762 и 634 нм. С погрешностью не хуже 20% по эксперим. данным построены т-рые зависимости констант скорости реакций ассоциации (k_p) и тушения (k_q^M), где $M = O_2, N_2$: $2O_2(^1\Delta_g) \rightarrow O_2(^1\Sigma_g^+) + O_2(^3\Sigma_g^-)$ и $O_2(^1\Sigma_g^+) + M \rightarrow O_2(^3\Sigma_g^- \text{ или } ^1\Delta_g) + M$. Обсуждены механизмы, определяющие ход этих реакций. Библ. 30. М. Т.

р-ции
И. Т.

Р. 1980. №3

1670

02

19 Б70. Расчет колебательных волновых функций и энергий методом КВ с учетом большого числа специально отобранных конфигураций. Buenker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D., Perić Miljenko. Calculation of vibrational wavefunctions and energies using MRD—CI techniques. «Excited States Quantum Chem. Proc. NATO Adv. Study Inst., Kos, 1978», Dordrecht c. a., 1979, 63—77 (англ.).

Расчет
колебаний
в молекулах
гидроксила

Статья обзорного характера. Рассмотрены результаты неэмпирич. расчетов методом ОСП МО ЛКАО в больших гауссовых базисах с учетом взаимодействия очень большого числа специально отобранных моно-, дважды и трижды возбужденных конфигураций колебательной структуры нижних электронных переходов в молекулах O₂, HSO, SOH, CH₂, CH₂⁻, HCN, DCN, N₂H₂, N₂D₂ и колебательной структуры в фотоэлектронном спектре этана. Изложена методика расчета. Расчет сводится к оптимизации геометрии молекулы в основном и возбужденном состояниях, вычислению колебательных частот и форм колебаний в основном состоянии, разложению изменения геометрии молекулы при возбуждении по

(4-8) V
X-1979, N19

формам нормальных колебаний и нахождению интегралов перекрывания смещенных колебательных функций одномерного осциллятора. В этой схеме не учитывается смешивание нормальных координат при возбуждении молекулы. Проанализировано согласие расчетов с экспериментом. В целом результаты расчетов хорошо воспроизводят эксперим. спектры и оказываются весьма полезными при их интерпретации, однако в отдельных случаях встречаются некоторые трудности.

К. Я. Бурштейн

1979

 O_2 $[HSO, SOH]$ CH_2 CH_2^-

изр.

Комб. ат.
структ.

11 Д201. Расчеты колебательных волновых функций и энергий с использованием техники МСФ—КВ. Buenker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D., Perić Miljenko. Calculation of vibrational wavefunctions and energies using MRD—CI techniques. «Excited States Quantum Chem. Proc. NATO Adv. Study Inst., Kos, 1978», Dordrecht e. a., 1979, 63—77 (англ.)

Дан обзор выполненных авторами в последние годы

расчетов методом КВ колебательной структуры электронных переходов. Рассмотрены соединения: O_2 , HSO , SOH , CH_2 , CH_2^- , HCN , DCN , N_2H_2 , N_2D_2 . О. В. Сизова

⑤ [X]

ор. 1049, N 11

1979

02

Cacciatore M, et al.

cerume
guccos.

"JSP-4. 4th Int. Symp. Plasma
Chem: Top. Meet. Interact. Low
Press. Plasmas Solid Surfaces,
Round Table Therm. Plasma
Process. Zurich, 1973. Conf.
Proc. Vol. 2." Zurich, S. A., 556-61.

cu. H₂ - III

1979

(5 Б33) Теоретическое изучение преддиссоциации двух-
атомных молекул. Состояние $B'^3\Sigma_u^-$ молекулы O_2 .
Cimiraglia Renzo, Persico Maurizio, To-
masi Jacopo. The theoretical study of predissociation
in diatomics. The case of the O_2 $B'^3\Sigma_u^-$ state. «Chem.
Phys.», 1979, 42, № 3, 297—303 (англ.)

В рамках простой теор. модели изучена преддиссоциа-
ция возбужденного состояния $B'^3\Sigma_u^-$ молекулы кисло-
рода. Скорость распада рассчитана методом, предло-
женным авторами ранее. Для расчетов сдвигов энергии,
связанных с взаимодействием состояний дискретного и
непрерывного спектров, использован метод Фано. Сде-
лан вывод, что основную роль в преддиссоциации состоя-
ния $B'^3\Sigma_u^-$ молекулы O_2 играет неадиабатич. переход
в состояние $B^3\Sigma_u^-$. Рассчитанные значения времени жиз-
ни и ширины рассматриваемого состояния хорошо объ-
ясняют наблюдаемое сглаживание вращательной струк-
туры полос. Объяснено сильное влияние изотопного эф-
фекта на скорость распада. Отмечено, что скорость рас-
пада сильно зависит от миним. расстояния между по-
тенциальными кривыми соотв-щих состояний.

В. Б. Павлов-Веревкин

преддиссо-
циацият, потенци-
альные кривые

X7980.N5

1979

O₂

предиссоц.

1 Д112. Теоретическое исследование предиссоциации двухатомных молекул. Случай состояния $B'^3\Sigma_u^-$ молекулы O₂. The theoretical study of predissociation in diatomics. The case of the O₂ $B'^3\Sigma_u^-$ state. Cimiraglia

Renzo, Persico Maurizio, Tomasi Jacopo. «Chem. Phys.», 1979, 42, № 3, 297—303 (англ.)

Теоретически изучена предиссоциация молекулы O₂ в возбужденном состоянии $B'^3\Sigma_u^-$. Использовалась простая трехуровневая модель, в которой учитывалось снятие пересечения адиабатич. кривых состояний симметрии $^3\Sigma_u^-$ — B (валентного) и B' (ридберговского). Характеристики соответствующих потенц. кривых взяты на основе данных неэмпирич. расчетов. Сделан вывод о том, что предиссоциация состояния B' обусловлена неадиабатич. переходом в состояние B . Рассчитанные времена жизни имеют правильный порядок величины. Отмечена сильная зависимость рассчитанных скоростей распада, энергетич. сдвигов полос и других величин от характеристик электронных состояний (напр., энергетич. интервала между B и B').

В. И. Барановский

Ф. 1080. N1

1979

91: 165913s The theoretical study of predissociation in diatomics. The case of the diatomic oxygen $B'^3\Sigma_u^-$ state. Cimiraglia, Renzo; Persico, Maurizio; Tomasi, Jacopo (Ist. Chim. Fis., Univ. Pisa, I-56100 Pisa, Italy). *Chem. Phys.* 1979, 42(3), 297-303 (Eng). The predissocn. of excited O_2 was studied theor. with the aid of a simple model describing the Rydberg-valence crossing which occurs in the B and $B'^3\Sigma_u^-$ states. Calens. of the decay rates were performed by means of a method described previously. The energy shifts caused by the interaction of a discrete state with the dissociative continuum were computed by the Fano method. Isotopic effects and the dependence of decay rates and energy shifts on the min. energy gap between the adiabatic curves were emphasized.

frequency

C.A. 1979, 91, 165913s

O₂

1979

Chakraborty B.P., et al.

u.n.

J. Chem. Phys., 1979, 70 (6)
3023 - 3026

(see. ALO; iii)

O₂

исследован.
вращат.
спектр.

1979
4 Б130. Разрешение Q-ветви колебательно-вращательного спектра комбинационного рассеяния молекулярного кислорода при прямой регистрации. Carius W., Lindner H., Palm K., Schröter O. Auflösung des Q-Zweiges im Schwingungs-Rotations-Raman-Spektrum des Sauerstoffmoleküls bei direkter Registrierung. «Exp. Techn. Phys.», 1979, 27, № 3, 289—293 (нем.; рез. англ.)

Исследована структура Q-ветви колебательно-вращательного спектра комбинац. рассеяния молек. кислорода (Ar⁺-лазер, $\lambda_{\text{возб.}} = 488,0$ нм, спектральная ширина $\Delta\nu = 0,6$ см⁻¹). Возбуждающее излучение лазера модулировалось с частотой 20,4 гц. Приведена схема селективного предусилителя. Сопоставляются условия регистрации и нек-рые технич. характеристики спектральной аппаратуры, к-рая использовалась для разрешения вращательной структуры Q-ветви ранее и в настоящей работе. Полученное значение постоянной колебательно-вращательного взаимодействия $\alpha_e = 0,0159 \pm 0,0002$ см⁻¹.

В. М. Ковба

Х 1980. N 4

02

Д356. Разрешение Q-ветви колебательно-вращательного спектра комбинационного рассеяния кислорода при прямой регистрации. Auflösung des Q-Zweiges im Schwingungs-Rotations-Raman-Spektrum des Sauerstoffmoleküls bei direkter Registrierung. Carius W., Lindner H., Palm K., Schröter O. «Exp. Techn. Phys.», 1979, 27, № 3, 289—293 (нем.; рез. англ.)

1979

М.П.

Изучен колебательно-вращательный спектр комб. рас. ($1546-1558\text{ см}^{-2}$) Q-ветви ($\Delta J=0$) колебания газообразных молекул O_2 (I) при давл. 1 атм и возбуждений лазерной линией $488,0\text{ нм}$ мощностью $1,5\text{ вт}$. Спектральное разрешение установки составляло $0,6\text{ см}^{-1}$. Определены вращательные константы B_0 и α_e , равные $1,4378$ и $\approx 0,016\text{ см}^{-1}$ соответственно. Выполнено сопоставление разрешающей способности и чувствительности ряда спектрометров комб. рас. Приведена электронная схема регистрирующей части использованного спектрометра. Предположено, что качество эксперим. установки для регистрации спектров комб. рас. может быть оценено путем регистрации колебательно-вращательных спектров простых молекул по разрешению полос вращательной структуры с наименьшим вращательным квантовым номером. Библ. 13.

Ф.1980.И.2

O_2

Number 8514

1979

DeFrees D. J.; et al.

pages
published.
reappeared.

J. Amer. Chem. Soc;
1979, 101 (15), 4085-89

(encl. H_2 in)

O₂

Dunlap B. J. et al 1979

pacrem

re, Do

et. n.

J. Chem. Phys., 1979, 71,
N 12, 4993-99

6429-11-6249



Cell H₂

III

Виттис 8924 1979

Q2

89-11-6236

М.П.

Х. 1980
N 8

8 Б27. Применение метода прямого конфигурационного взаимодействия к основному состоянию молекулы O_2 . Ferguson Ian, Handy Nicholas C. Application of the direct configuration interaction method to the ground state of O_2 . «Theor. chim. acta», 1979, 53, № 4, 345—353 (англ.)

Рассмотрены особенности применения прямого метода конфигурац. взаимодействия к системам с открытыми оболочками. Описаны приемы, позволяющие включить в случае открытых оболочек ранее развитые Русом методы прямого конфигурац. взаимодействия для случая замкнутых оболочек. Расчеты, иллюстрирующие возможности подхода, выполнены в *spd*-базисе сгруппированных гауссовых ф-ций Данинга для основного состояния молекулы кислорода с полным учетом одно- и двукратно-возбужденных конфигураций. Полученные значения молек. постоянных сопоставлены с эксперим. данными и результатами др. авторов. Отмечена эффективность развитого подхода при расчетах молекул с открытыми оболочками.

В. И. Пупышев

Оттиск 8924

1979

O₂

4 Д149. Применение метода прямого конфигурационного взаимодействия к расчету основного состояния молекулы O₂. Application of the direct configuration interaction method to the ground state of O₂. Ferguson Ian, Handy Nicholas C. «Theor. chim. acta», 1979, 53, № 4, 345—353 (англ.)

расчет
основ.
состояния.

Исследуется эффективность метода прямого конфигурац. взаимодействия (КВ) для расчета систем с открытыми оболочками. Подробно анализируется структура и организация составленной авторами программы для расчетов по методу прямого КВ, обсуждаются ее возможности и преимущества по сравнению с другими программами. В качестве системы для опробования программы выбрана молекула O. Расчеты проводились в базисе сжатых гауссовых ф-ций с использованием 3415 спин-симметризованных конфигураций. Рассчитана

ВР-Х1-6236

Ф. 1980 № 4

потенц. кривая основного состояния молекулы O_2 и характеристики этой кривой. Значение равновесного расстояния составляет 1,214 Å, что находится в хорошем согласии с эксперим. значением 1,207 Å. Несколько худшее согласие в величине гармонич. постоянной ω_e объясняется тем, что при построении волн. ф-ции метода КВ учитывалось лишь ограниченное число типов конфигураций. Отмечается, что при расчетах потенц. кривых методом КВ необходимо использовать более одного исходного детерминанта для построения конфигураций.

А. И. Панин

O₂

ammuck 8924

1972

92: 65113h Application of the direct configuration interaction method to the ground state of molecular oxygen. Ferguson, Ian; Handy, Nicholas C. (Chem. Lab., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl. CB2 1EW). *Theor. Chim. Acta* 1979, 53(4), 345-53 (Eng). The Direct CI method of B. O. Roos (1972) was implemented using the method of R. R. Lucchese and Schaefer (1978), for open shell systems. As in the closed-shell case, the method is very efficient. Results are presented for a part of the potential energy curve of the O₂ ³Σ_g⁻ ground state electronic configuration, together with several properties.

Кб. ссх,
фактом
номеров.
Кубань

BP-XI-6236

C.A. 1980.92, N8

O₂

О₂ 18 Б148

М.В. Спектр

1979
18 Б148. Преддиссоциационная ширина линий и осцилляторная сила полос (2—0)—(13—0) системы Шумана—Рунге O₂. Frederick J. E., Hudson R. D. Predissociation linewidths and oscillator strengths for the (2—0) to (13—0) Schumann—Runge bands of O₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 74, № 2, 247—258, (англ.)

Путем согласования экспериментального и рассчитанного с применением улучшенной теор. модели спектров поглощения кислорода определены преддиссоциационная ширина линий (ΔL) и осцилляторные силы полос (f) для переходов с основного колебательного уровня состояния $X^3\Sigma_g^-$ -O₂ в состоянии $B^3\Sigma_u, v'$ (система Шумана—Рунге). Приведены значения молекулярных постоянных B, D, λ и γ O₂ ($X^3\Sigma_g^-, v''=0, B^3\Sigma_g^-, v'=0-19$), использованных при расчете спектра. Величины $\lambda(v')$ для $v'=3-8$ найдены путем сглаженной

от 37913

2.1979, N18

интерполяции между экспериментальными значениями для $v'=0-2$ и $v' \geq 9$. При этом оговорено, что $\lambda(v')$ может и не являться гладкой функцией v' ввиду возмущений в состоянии $B^3\Sigma_u^-$, связанных с отталкивательным состоянием $^3\Pi_u$ (точка пересечения потенциальных кривых около $B^3\Sigma_u^-$, $D'=4$). Предполагалось, что индивидуальные линии вращательной структуры имеют фойгтовский профиль. Для полос $v'=(2-13)-v'=0$ приведены значения ΔL и f и области их изменения. Экспериментальные преддиссоционные ширины линий при $v' > 5$ удовлетворительно согласуются с расчетными, а для $v' \leq 5$ превышают теоретически предсказываемые. Отмечается тенденция к увеличению ΔL с ростом величины полного углового момента (приведены соотв. данные для полос $v'=(8-13)-v''=0$).

В. М. Ковба



$|R_e|^2$

79.73
91: 184299n Electronic moment of the $b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ transition of a system of oxygen bands. Galkin, V. D. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1979, 47(2), 266-71 (Russ). The distribution of intensities of electronic transitions was studied in O_2 by absorption spectra. The integral coeffs. of absorption were obtained for the (0,0), (1,0), (2,0), (3,0), (1,1) bands. The dependence of the electron moment R_e was detd. on internuclear distance r_{ev} . In the range $0.656 \text{ \AA} < r_{ev} < 1.37 \text{ \AA}$ the measured transition moments agree well with calcd.

Rec'd.

C. A. 1979, 91, 1842

1979

02



Структура,
спектр
колебаний

22 Б168. Электронный момент перехода $b_1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ системы полос кислорода. Галкин В. Д. «Оптика и спектроскопия», 1979, 47, № 2, 266—271

По спектрам поглощения изучено распределение интенсивности в электронном переходе $b_1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-$ кислорода. Получены интегральные коэф. поглощения полос (0, 0), (1, 0), (2, 0), (3, 0), (1, 1). Определена зависимость электронного момента перехода R_b от межъядерного расстояния $r_{v'v''}$. В области $0,656 \text{ \AA} < r_{v'v''} < 1,37 \text{ \AA}$ изменение момента перехода хорошо представляется выражением $|R_b(r_{v'v''})|^2 = |R_b(r_{00})|^2 \cdot [1 + 0,915(r_{v'v''} - r_{00})]$.

Резюме

X-1979, №22

02

БФ-Х1-6332

1979

Гусев Т. А. и др.

(У)
З.А. Гусев Т.

И.А. Гусев Т. 1979,
20, 15, 471-80

с.м. F2 - III

1979

O₂

8 Б153. Поглощение в состоянии $^3\Pi_u$ молекулярно-го кислорода. Guberman S. L., Dalgarno A. Absorption into the $^3\Pi_u$ state of molecular oxygen. «J. Geophys. Res.», 1979, A 84, № 8, 4437—4440 (англ.)

Проведены точные квантовомех. расчеты (КВ) дипольного момента перехода $X^3\Sigma_g^- \rightarrow ^3\Pi_u$ молек. кислорода, величины сечения поглощения, соотв-щего этому

М. П.

переходу (УФ- и видимые УФ-области спектра), и потенциала взаимодействия для состояния $^3\Pi_u$ O₂. Результаты расчета показывают, что переход в состояние $^3\Pi_u$ не вносит значительного вклада в непрозрачность атмосферы. Установлено также, что излучательная ассоциация атомов кислорода, связанная с переходом из состояния $^3\Pi_u$, не имеет существенного значения как источник ИК-послесвечения.

В. М. Ковба

X. 1980 № 8

1979

O₂nominal
reference

92: 116909g Potential curves for dissociative recombination of molecular oxygen(1+). Guberman, Steven L. (Air Force Geophys. Lab., LKB, Hanscom Air Force Base, MA 01731 USA). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1979, 13, 531-40 (Eng). Extensive MC-SCF and CI calcs. are reported for the excited diabatic potential curves of O₂, providing routes for the dissociative recombination of O₂⁺ with an electron. States important for dissocn. of the lowest 5 vibrational levels of O₂⁺ at low electron energies are described. The adequacy of ground-state orbitals for excited-state calcs. is assessed.

C.A. 1980. 92 iv 14

O₂

Оттисс 7727

1979

Колебат.
спектр
К. Р.

16 Б212. Влияние сателлитов Q-ветвей на значения температуры, рассчитанные по интенсивностям в колебательном спектре комбинационного рассеяния кислорода. Hill R. A. Effect of satellite Q-branches on temperatures computed from oxygen vibrational raman intensities. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1979, 21, № 3, 221—226 (англ.)

Показано, что расщепление основного состояния $^3\Sigma_g^-$ — кислорода из-за спин-спиновых и спин-вращательного взаимодействий, приводящее к появлению сателлитов в чисто вращательном спектре и сателлитов Q-ветвей колебательно-вращательного спектра, может приводить к заметным ошибкам при определении T -ры по результатам анализа распределения интенсивностей в Q-ветвях основной колебательной полосы и «горячих» полос. Так, в области T -р 500—2000 К ошибки могут достигать 0,5—2,0% (оценки проводились для случая b по Гунду с учетом чисто анизотропного рассеяния). Дополнительные ошибки возникают также из-за вклада изотропного рассеяния ($\rho_{O_2}=0,047$, $\rho_{N_2}=0,022$) и переналожения нек-рых линий Q-ветви с компонентами Q-ветви.

А. В. Бобров

20.1979, N16

1979

O₂

расчет

5 Д150. Методы теории твердого тела для электронной структуры молекул. Самосогласованный псевдопотенциальный расчет для O₂. A solid state approach to the electronic structure of molecules: self-consistent pseudopotential calculation of O₂. Kerker G. P., Zunger Alex, Cohen Marvin L., Schlüter M. «Solid State Commun.», 1979, 32, № 4, 309—312 (англ.)

Собственные энергии электронных состояний молекулы O₂ рассчитаны с помощью самосогласованного псевдопотенциального метода. Основная идея метода заключается в решении уравнения Шрёдингера для валентных электронов во внешнем нелокальном псевдопотенциале, описывающем их взаимодействие с электронами остова. Метод псевдопотенциала значительно проще обычного хартри-фоковского расчета. Для нахождения одноэлектронных собств. энергий и волн. ф-ций используется техника расчетов в теории твердого тела. Для этого молекулы помещаются в периодич. решетку с периодом настолько большим, чтобы взаимодействием молекул

ф. 1980 № 5

можно было пренебречь. Волн. ф-ции валентных орбиталей находятся самосогласованно, используя разложение их по базису, содержащему плоские волны и локализованные на атомах гауссовы орбитали. Использование смешанного базиса позволяет получить хорошие результаты для молекулярных волн. ф-ций с одной s - и одной p -локализованной орбиталями для каждого атома плюс около 180 плоских волн. Результаты расчета собств. значений хорошо согласуются с результатами полного хартри-фоковского расчета. Распределение электронной плотности, рассчитанное описанным методом, согласуется с хартри-фоковским в области вне остова. Отмечается, что предложенный метод может быть успешно применен для расчета более сложных молекул, которые трудно рассчитывать стандартными методами.

Н. М. К.

O₂

1979

сечение
спонтанной.

Kimura K. et al
J. Electron Spectrosc.,
and Relat. Phenom.,
1979, 15, 269-274.

сеч. CO ; 14)

O₂

Lomnick 8459 | 1979

Kitaura K., et al.

M.N

Chem. Phys. Lett.,
1979, 65 (2), 206-211

Q₂

ommick 8480 1949

Konowalow D. D. et al.

Chem. Phys. Lett. 1979, 65,
N3, 494-99.

расчет
с помощью
компьютера
и. павлов.
вс.

вс. B₂ - III

02

1979

Кондратенко А.В. и др.

кв. мех.
расчет

Рл. структурн. химии,
1979, 20, n 6, 963-968.

(см. NO; 14)

Q₂

1979

Lorenz 10, et al.

Z. phys. Chem. (DDR),
1979, 260, 15, 881-9.

расши-
рению по-
верности не
запасов

сст. H₂ - III

1979

O₂

фото-
диссоциация

1 B113. Возбуждаемая лазером фотодиссоциация O₂⁺. McGilvery D. C., Morrison J. D., Smith D. L. Laser induced photodissociation of O₂⁺. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 10, 4761—4768 (англ.)
Изучены фотодиссоциац. спектры иона O₂⁺ в области 1,7—2,6 эв с использованием тройного квадрупольного масс-спектрометра и перестраиваемого лазера на красителе, накачиваемого импульсной лампой. Спектры регистрировались при различных энергиях ионизирующих электронов в области 16,5—70 эв. Детально изучена тонкая структура полос 1,80, 1,90, 2,00, 2,12, 2,25, 2,38, 2,50, 2,60 эв и проведено отнесение полос к колебательным переходам между состояниями $\bar{a}^4\Pi_u$, $b^4\Sigma_g^-$ и $f^4\Pi_g$. Показано, что как прямая диссоциация (D), так и преддиссоциация (pD) возникают при возбуждении из состояния $\bar{a}^4\Pi_u$. D осуществляется при переходах из состояния $\bar{a}^4\Pi_u$ на отталкивательную часть состояния $f^4\Pi_g$ и проявляется для ряда переходов, приходящихся на узкую энергетич. область (менее 0,2 эв выше дис-

Ж. 1980. №1

социац. предела). Из контура полосы, связанной с D оценено колебательное распределение для состояния $\bar{a}^4\Pi_u$. Сделан вывод, что, в основном, фотодиссоциац. переходы осуществляются с уровней $v=0-8$ состояния $\bar{a}^4\Pi_u$. Отмечено, что ни вращательная ПД состояния $f^4\Pi_g$, ни электронная ПД состояния $b^4\Sigma_g^-$ по отдельности не могут объяснить всех особенностей наблюдаемых эффектов. Предположено, что ПД осуществляется посредством безызлучательного перехода из состояния $b^4\Sigma_g^-$ через промежут. состояние $f^4\Pi_g$. Полученные результаты сравнены с лит. данными и обсуждены имеющиеся разногласия.

С. Б. Осин

O₂

Lowman 8154 | 1979

Mingelgrin U., et al

(creep)

J. Chem. Phys., 1979,
40(8), 3828-39

02

(ommuca 9746)

1979

Mehandru S.P., et al

paper Proc. Indian Nat. Sci.
Gt. chye Acad., 1979, A45, N 5,
367-371.

•
see Li 2, 1st

1979

O₂

Müller J; et al.

геометрия
молекулы
J.

Chem. Phys., 1979,
38 (3), 349-59.

(см. N₂; III)

O₂ (T₂) OM. 8842 1979

Nicol M., Hirsch K.R., BF-XI - 6233

Holzapfel W.B

Chem. Phys. Lett., 1979, 68, N1, 49-52 (in)

Oxygen phase equilibria near 298 K

PM Hum., 1980

85901

● T, B @

Q₂

Qumma 2313

1979

Noor Mohammad S.

پروپوزیشن
مقدمه.

"Physics," 1979, BC 96, 13,
410-21.

عل. ج₂ - III

O₂

Sumner 8901

1979

ChA. No. 1.

Ohwada K.

Spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-57.

1979

Оттиски 89/13

6 Д171. Вычисление волновых функций и частот для колебаний с большой амплитудой. Сравнение различных методов с использованием неэмпирических потенциальных кривых, полученных методом конфигурационного взаимодействия. Calculation of wavefunctions and frequencies for noninfinitesimal vibrations. Comparison of various methods using ab initio CI potential curves. Perić Miljenko, Runau Ralf, Römelt Joachim, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 2, 309—338 (англ.)

Неэмпирический метод конфигурационного взаимодействия в сочетании с вариац. методом и численным методом интегрирования использован для построения ф-ций потенц. энергии низколежащих электронных состояний молекул O_2 и HCN. Полученные потенц. ф-ции использованы при численном расчете волн. ф-ций и энергии колебательных уровней этих молекул. Вычислены также факторы Франка—Кондона для электроно-колебательных переходов. Результаты расчетов вариац. методом и методом численного интегрирования согласуются между собой.

М. Р. Алиев

 O_2

HCN

кв. мех.
расчет

⑦

☒

92 1980 №6

12 Б137. Механизм колебательной релаксации в твердых телах. Многофононная релаксация $O_2(c'\Sigma_u^-)$ в Ar, Kr и смешанной Ar—Kr матрицах. Rossetti R., Brüs L. E. The mechanism of vibrational relaxation in solids: Multiphonon relaxation of $O_2(c'\Sigma_u^-)$ in Ar, Kr, and mixed Ar—Kr matrices. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 10, 3963—3970 (англ.)

Измерены с временным разрешением спектры испускания молекул $O_2(^{16,18}O)$ в Ar, Kr и Ar—Kr-матрицах, возбуждаемые импульсным ($\Delta t \sim 3$ нсек) лазером на красителе с удвоением частоты ($\Delta\lambda \sim 0,1$ Å). В спектре наблюдались прогрессии полос, связанные с переходами $S^3\Delta_u(v'=0) \rightarrow X^3\Sigma_g^-(v''=3-14)$ ($^{16}O_2$, $^{16}O^{18}O$, $^{18}O_2$) и $c'\Sigma_u^-(v'=0, 1, 2) \rightarrow Q'\Delta_g(v''=1-8)$ ($^{16}O^{18}O$). Из анализа колебательной структуры системы C—X (Ar-матрица) получены след. молек. постоянные (в cm^{-1}): $T_e = 34446,2$, $\omega_e'' = 1561,4$, $\omega_e''x_e'' = 10,42$, $\omega_e''y_e'' = -0,02$. Ранее авторами было показано, что для смешанной изотопной модификации молекулы кислорода состояние $S^3\Delta_u v=0$ лежит вблизи уровня $c'\Sigma_u^- v=2$, ширина запрещенной зоны мала и возможен безызлучательный переход $S^3v=0 \rightarrow c^3v=2$. Заселенность остальных двух уровней состояния $c'\Sigma_u^- ^{16}O^{18}O$ осуществляется в ре-

спектр
измерен

Х. 1980. N12

результате каскадной колебательной релаксации, к-рая проявляется в разрешенных во времени спектрах испускания. Проанализирована временная зависимость интенсивности полос и определены времена жизни (τ) для уровней $C^3\Delta_u v=0$, $c'E_v-v=1,2$ при различных T -рах ($T=4,4-32$ K). Для каждого уровня величина τ уменьшается с ростом T соотв. от 17,5 до 10,7 мксек, от 20 до 5,5 мксек и от 80 до 8 мксек. Рассчитаны фак-

торы Франка — Кондона для системы $C'\Sigma_u-(v'=0, 1, 2) - a'\Delta_g (v''=0-6)^{16}O^{18}O$. Анализ влияния состава смешанной матрицы Ag — Kг на спектры показал, что скорость процесса $C'v=0 \rightarrow c'v_2^{16}O^{18}O$ почти не зависит от окружения молекулы, напр., значение τ ($C^3\Delta_u v=0$) составляет в Ag 17,5 мксек, в Ag/Kг (1:1) 15—16 мксек и в Kг 22 мксек (4,4 K). Обсужден механизм колебательной релаксации. Высказано предположение, как и в случае молекул NO($a^4\Pi$) и $C_2^-(a^4\Sigma)$, преобладает механизм прямой многофононной релаксации. При рассмотрении многофононных процессов использована предложенная ранее модель псевдотрехатомного комплекса (O_2 в одномерной решетке инертного газа).

В. М. Ковба

1979

O₂N₂

интенсивн.
Q-ветви
в пламенах

12 Д449. Сравнение результатов определения температуры в пламенах с помощью термопары и методом комбинационного рассеяния света. Schoenung S. M., Mitchell R. E. Comparison of Raman and thermocouple temperature measurements in flames. «Combust. and Flame», 1979, 35, № 2, 207—211 (англ.)

Проведено сопоставление значений т-р метано-воздушного и кислородно-аммиачного пламен, определенных с помощью термопары и по данным спектров комб. рас. продуктов горения, возбуждаемых лазерной линией 488,0 нм мощностью 2 вт. Величины т-р метано-воздушного пламени, определенные перечисленными методами, согласуются с точностью до 2%, тогда как оценки т-ры кислородно-аммиачного пламени по интенсивности Q-полосы колебания молекул O₂ на 4% выше аналогичных значений, полученных путем анализа интенсивности Q-ветви колебания молекул N₂ и на 7% выше значений т-ры в термопарных измерениях. Раз-

⑦1 ⊗

сп. 1979 N12

личия т-ры пламени, установленной по спектрам комб. рас. продуктов горения, связаны со спектрально-селективным вкладом фоновой подставки флуоресцирующих соединений в интенсивность линий Q-ветвей колебаний молекул N_2 и O_2 .

И. В. А.

102

оттиски 8569 1979

3 Д339. Система полос $O_2(C^3\Delta_u - a^1\Delta_g)$. The
 $O_2(C^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g)$ band system. Slinger Tom G.
«Chem. Phys. Lett.», 1979, 66, № 2, 344—349 (англ.)
Показано, что большинство ранее наблюдавшихся
неидентифицированных полос в спектре послесвечения
 O_2 в области 3000—5000 Å принадлежит системе
 $O_2(C^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g)$. Определены значения колебательных и
вращательных постоянных молекул $O_2(C^3\Delta_u)$. Сделано
заключение, что концы молекул O_2 в состояниях
 $A^3\Sigma_u^+$ и $C^3\Delta_u$, а также колебательные распределения в
этих состояниях схожи как в лабор. экспериментах, так
и в свечении ночного неба. Библ. 22. В. С. Иванов

и, и.



Ф. 1080.113

ommuca 8569

1979

O₂

(i, n.)

91: 219703u The diatomic oxygen ($C^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g$) band system. Slinger, Tom G. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 66(2), 344-9 (Eng). The pos. identification of the $O_2(C^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g)$ transition in discharge systems established that most previously obsd. but unidentified bands in the 3000-5000 Å spectral region in O_2 afterglows belong to this system. Transitions from levels up to $v' = 6$ have previously been seen, both in discharges and in the terrestrial nightglow. These levels of vibrational excitation in the $C^3\Delta_u$ state are comparable to those obsd. in the more thoroughly studied $A^3\Sigma_u^+$ state. A set of $C^3\Delta_u$ vibrational consts. was calcd. which fit 17 analyzed bands with an av. deviation of 0.6 Å. Rotational consts. were obtained for the $4-3$ $C^3\Delta_u(F_1) \rightarrow a^1\Delta_g$ band from a spectrum reported by V. Degen (1968).



C.A. 1979, 91, 26

O₂

оттиски 8569 1979

7 Б149. Система полос $C^3\Delta_u - a'\Delta_g O_2$. S l a n g e r
Tom G. The $O_2(C^3\Delta_u \rightarrow a'\Delta_g)$ band system. «Chem.
Phys. Lett.», 1979, 66, № 2, 344—349 (англ.)

На основании результатов исследований спектров по-
слесвечения продуктов, образующихся при пропускании
через разряд смеси кислорода, и гелия, установлено, что
неидентифицированная ранее система полос кислорода в
области 3000—5000 Å, возбуждаемая в разряде, и на-
блюдавшиеся в том же интервале полосы в спектре све-
чения ночного неба принадлежит переходу $O_2 C^3\Delta_u(F_1) -$
 $a'\Delta_g$. Приведена таблица Деландра (полосы $V'=0-6 -$
 $V''=0-9$). Для O_2 в состоянии $C^3\Delta_u(F_1)$ предложен
след. набор молек. постоянных (в cm^{-1}): $T_{00}=34\,225$,
 $\omega_e=812$, $\omega_e X_e=9,6$, $\omega_e Y_e=-0,79$, $B_4=0,824$, $B_3(a'\Delta_g=$

М. П.

Х. 1980. № 7

=1,374. Наличие полос перехода $C^3\Delta_u - a'\Delta_g$ характерно для спектров послесвечения кислорода. Хотя полосы этой системы слабее, чем полосы системы $A^3\Sigma_u^+ - X^3\Sigma_g^-$, но излучательное время жизни O_2 в состоянии $A^3\Sigma_u^+$ приблизительно на два порядка меньше, чем у $O_2(C^3\Delta_u)$, и концентрации молекул в указанных состояниях сравнимы, а скорости их образования в результате рекомбинации атомов кислорода в основном состоянии — преобладающего процесса при возникновении спектров послесвечения и ночного свечения — близки.

В. М. Ковба

O₂

1979

колебат. -
- вращат.
состоян.

3 И102. Обеднение колебательно-вращательных состояний при термическом разложении двухатомных молекул. Изучение методов Монте-Карло. Vibrational-rotational state depletion in the thermal decomposition of a diatomic molecule. A Monte Carlo study. Stace A. J. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2—3, 374—377 (англ.)

Методом Монте-Карло рассчитаны относит. заселенности колебательно-вращательных уровней O₂ в процессе стационарной стадии термич. распада O₂ при T = 10 000° К. Результаты представлены в виде контурных карт для равных заселенностей в пространстве колебательно-вращательных энергий.

Ф. 1980 и 3

1979

O₂O₂⁺Ref. sec.
pages

(+1) A

90: 210458q Configuration-interaction study of lower excited states of molecular oxygen: valence and Rydberg characters of the two lowest ${}^3\Sigma_u^-$ states. Tatewaki, Hiroshi; Tanaka, Kiyoshi; Sasaki, Fukashi; Obara, Shigeru; Ohno, Kimio; Yoshimine, Megumu (Res. Inst. Catal., Hokkaido Univ., Sapporo, Japan). *Int. J. Quantum Chem.* 1979, 15(5), 533-45 (Eng). CI calcs. with an extended STO basis set were done on the ground and lower excited states of O₂ and O₂⁺ at and near the equil. internuclear distance ($R = 2.3$ at. unit [a.u.]) of the ground state of O₂. Particular attention was paid to the two lowest ${}^3\Sigma_u^-$ states; the mixing of the valence and Rydberg characters in these states was studied. The lowest ${}^3\Sigma_u^-$ state is a Rydberg-type state for $R < 2.3$ a.u., but becomes valence type for $R \geq 2.3$ a.u. The second ${}^3\Sigma_u^-$ state, which is 1.6 eV above the lowest ${}^3\Sigma_u^-$ at $R = 2.3$ a.u., changes its character from Rydberg to valence, valence to Rydberg, and then to valence again when R increases from 1.9 to 3.1 a.u. The calcd. and available exptl. vertical excitation energies agree satisfactorily.

C.A. 1979, 90, N216

1979

O₂

O₂⁺

σ, π, ϵ_i

(41)

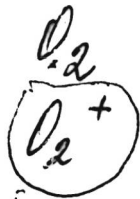
21 Б30. Исследование низших возбужденных состояний молекулы O₂ методом конфигурационного взаимодействия. Валентный и ридбергов характеры двух низших состояний ${}^3\Sigma_u^-$. Tatewaki Hiroshi, Tanaka Kiyoshi, Sasaki Fukashi, Obara Shigeru, Ohno Kimio, Yoshimine Megumu. Configuration-interaction study of lower excited states of O₂: valence and rydberg characters of the two lowest ${}^3\Sigma_u^-$ states. «Int. J. Quantum Chem.», 1979, 15, № 5, 533—545 (англ.)

Рассчитаны энергии ряда электронных состояний молекулы O₂ и катиона O₂⁺. Использован базисный набор орбиталей-слейтеровского типа, включавший ф-ции s-, p- и d-типа, в том числе диффузные орбитали. На основе МО, полученных методом ССП, построены волновые ф-ции конфигурац. взаимодействия с частичным отбором одно- и двукратно возбужденных конфигураций. Детально проанализирована электронная структура В- и Е-состояний симметрии ${}^3\Sigma_u^-$. Найдено, что при

Х. 1979, № 21

равновесном межъядерном расстоянии ($R_e = 2,3$ ат. ед) состояние B является преимущественно валентным, а состояние E — ридберговым. С рассчитанными в окрестности R_e (от 1,9 до 3,5 ат. ед.) потенциальными кривыми определены спектроскопич. постоянные рассматриваемых состояний. Прослежено изменение валентного и ридбергова характеров обоих состояний при изменении межъядерного расстояния. Отмечено, что из-за псевдопересечения валентных и ридберговых состояний потенциальная кривая $E \ ^3\Sigma_u^-$ имеет необычно глубокий минимум и большие значения спектроскопич. постоянных ω_e и $\omega_e X_e$. Проведено отнесение пиков в областях 9,96; 10,28 и 10,57 эв как переходов на первые три колебательные уровни состояния E . А. В. Немухин





потенц.
кривые

(+1)

11 Д158. Исследование низших возбужденных состояний O_2 методом КВ. Валентный и ридберговский характер двух низших состояний $^3\Sigma_u^-$. Tatewaki Hiroshi, Tanaka Kiyoshi, Sasaki Fukashi, Obara Shigeru, Ohno Kimio, Yoshimine Megumu. Configuration-interaction study of lower excited states of O_2 . Valence and Rydberg characters of the two lowest $^3\Sigma_u^-$ states. «Int. J. Quantum Chem.», 1979, 15, № 5, 533—545 (англ.)

Рассчитаны потенц. кривые основного и восьми низших возбужденных состояний молекулы O_2 , а также иона O_2^+ в области межатомных расстояний от 1,9 до 3,5 ат. ед. Расчеты проводились методом КВ в расширенном слэтеровском базисе с включением поляризующих и диффузных ф-ций. Учитывались (с некоторыми ограничениями) одно- и двукратно возбужденные конфигурации. Особое внимание уделено изучению характера двух состояний, B и E , симметрии $^3\Sigma_u^-$ с энергиями (эв, в скобках — эксперим. значения) 8,78 (~8,6) и 10,4 (10,1). Состояние B при $R \leq 2,3$ ат. ед. является ридберговским, но становится валентным при $R > 2,3$ ат. ед. Состояние E при $R \approx 2,3$ ат. ед. меняет характер с ридберговского на валентный, затем снова становится ридберговским и наконец — опять валентным.

В. И. Барановский

1979

Р.1979, N11

1979

2 Д89. Изучение сходимости некоторых процедур второго порядка, используемых для решения уравнений многоконфигурационной теории ССП. Convergence studies of second and approximate second order multiconfigurational Hartree — Fock procedures. Yeager Danny L., Jorgensen Poul. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 2, 755—760 (англ.)

Экспоненциальная параметризация всего многообразия параметров многоконфигурационной волн. ф-ции используется для получения ур-ний типа Ньютона — Рафсона, которые применяются затем для построения двух итерационных схем отыскания стационарной точки энергии. Первая итерационная схема соответствует одновременному варьированию как коэф. КВ, так и МО. Вторая схема предусматривает поочередно оптимизацию коэф. КВ и МО. С использованием предложенных схем выполнены расчеты основного состояния молекул O_2 , а также основного и возбужденного состояний атома Be. Продемонстрирована высокая скорость сходимости первой из предложенных схем как для случая основного, так и возбужденных состояний.

А. И. Панин

O₂

0829-XI-6230

расчет
основн.
состояния① Кв. м.м.
расчет

9. 1980. № 2

O₂

Commu 11041 1980.

Albertsen P., et al.

кв. мкс.
расчет

Mol. Phys., 1980, 41,
(2), 409-420

1980

O₂

Y, Finn

21 Б40. Расчет вертикальных энергий возбуждения и моментов переходов O₂ многоконфигурационным временным методом Хартри-Фока. Albertsen Preben, Jørgensen Poul, Yeager Danny L. Multiconfigurational time-dependent Hartree-Fock calculation of vertical excitation energies and transition moments of O₂. Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 10-20, 1980. «Int. J. Quantum Chem.», 1980, Quantum Chem. Symp. № 14, 249-260 (англ.)

Многоконфигурационный временной метод Хартри-Фока (МКВХФ), разработанный авторами, применен для расчетов вертикальных энергий возбуждения и сил осцилляторов молекулы O₂ при межъядерном расстоянии 2,28 ат. ед. Использованы три базисных набора слейтеровских орбиталей *s*-, *p*- и *d*-типа (общим числом по 50 ф-ций), различающихся тем, насколько диффузны нек-рые из орбиталей. Результаты сопоставлены с данными расчетов методом конфигурац. взаимодейст-

X. 21. 1981

вия с учетом только однократных возбуждений, временным методом Хартри—Фока и многоконфигурац. методом ССП с учетом однократных возбуждений. Показано, что применение метода МКВХФ позволяет улучшить результаты вычислений, особенно для сил осцилляторов. Найдено, что введение в базис диффузных орбиталей не оказывает влияния на положение низших уровней энергии; к-рые, следовательно, являются валентными. Однако, состояния выше 10 эВ являются существенно ридберговыми, и вычисляемые для них значения энергии существенно зависят от присутствия в базисе диффузных орбиталей — погрешности могут составлять величины порядка 2,5 эВ при энергии ~ 15 эВ.

А. В. Немухин



O₂

1980

Аришкин Ю.Ф. и др.

спектр.
к.р.

Ис. прикл. спектроскопии,
1980, 32, № 4, 725-731.

сш N2 ; III

D₂

1980

Birnbaum G.

Proc. Int. School Phys.

Enrico Fermi, Varenna
on Lake Como, 1978.

Course 78. Amsterdam.

e.a., ● 1980, 111-145.

(see. M₂; III)

Q₂

1980

Bläs R, et al

J. Phys B: Atom and

Mol. Phys., 1980, 13, 114,

2693-2700

ко. мех.
пер.

см. CH₄-II

1980

O₂

(94: 53583q) Determination of proton affinities from the kinetics of proton transfer reactions. VII. The proton affinities of O₂, H₂, Kr, O, N₂, Xe, CO₂, CH₄, N₂O, and CO. Bohme, D. K.; Mackay, G. I.; Schiff, H. I. (Dep. Chem., York Univ., Downsview, ON Can. M3J 1P3). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(10), 4976-86 (Eng). The flowing afterglow and selected ion flow tube techniques were applied in a room-temp. study of the kinetics of proton-transfer reactions of the type $XH^+ + Y \rightleftharpoons YH^+ + X$ for X or Y = He, H₂, O₂, Kr, O, N₂, Xe, CO₂, CH₄, CD₄, N₂O, OH, and CO, and for the deuteration of O₂ by D₃⁺. Equil. consts. are detd. and changes in thermodyn. state properties (ΔG^0 , ΔH^0 , ΔS^0) are derived for the reactions with N/Y = H₂/O₂, O₂/Kr, H₂/N₂, N₂/Xe, Xe/CO₂, CO₂/CH₄, CH₄/N₂O, and N₂O/CO. Proton affinities are reported for O₂, H₂, Kr, O, N₂, Xe, CO₂, CH₄, N₂O, and CO, together with the heats of formation of their protonated species. Also a correlation is presented between the kinetic and thermodyn. results obtained in this study.

(A⁺_p)

(+9) A

C.A. 1981. 94, 13

O₂

Синглетный
кислород

1980
5 Б165. Изучение с помощью ударной трубы трех молекулярных процессов испускания синглетного кислорода O₂(¹Δ_g), образующегося в проточной разрядной системе. Borrell Patricia M., Borrell Peter, Grant Kevin R. A study of three dimolecular emissions of singlet oxygen, O₂(¹Δ_g), using a discharge flow shock tube. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 1, 1442—1449 (англ.)

Исследованы след. бимолек. процессы испускания синглетного кислорода при комн. (295 K) и повышенных (650—1650 K) т-рах: O₂*(¹Δ_g) + O₂*(¹Δ_g) → O₂(³Σ_g⁻) + O₂(³Σ_g⁻) + hν (λ = 634 нм) (I), O₂* + O₂* → O₂(ν = 1) + O₂ + hν (λ = 703 нм) (II), O₂* (ν = 1) + O₂* → O₂ + O₂ + hν (λ = 579 нм) (III). Для нагрева и сжатия потока O₂(¹Δ_g), образующихся в МВ-разряде, использована ударная труба. Измерялось изменение во времени интенсивности излучения в указанных областях длин волн и при λ = 762 (одномолек. излучатель-

2.1984. №15

ный процесс $O_2(^1\Sigma_g^+) \rightarrow O_2 + h\nu$. Определены относит. излучательные способности и оценены константы скорости испускания при повышенных т-рах. Найдено, что в первом приближении интенсивность излучения при 634 и 703 нм зависит от произведения $\rho^2 T^{1/2}$ (ρ — плотность газа) и процессы I и II носят в основном характер обычных столкновений. Выше 1100 К наблюдается усиление излучения по сравнению с этой зависимостью, возрастающее с т-рой. Колебательная т-ра молекул $O_2(^1\Delta_g)$ в МВ-источнике, оцененная по данным измерений интенсивности излучения II и III, составляет 750 ± 50 К.

В. М. Ковба



O₂

оттиски 10048

1980

I Д417. Электрические квадрупольные переходы в А-полосе кислорода при 7600 Å. Detection of electric quadrupole transitions in the oxygen A band at 7600 Å. Brault James W. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 384—387 (англ.)

В спектре солнечного излучения, полученного при малых высотах, зарегистрированы линии поглощения атмосферного кислорода, обусловленные электрическими квадрупольными переходами в А-полосе в области 7600 Å. Определены положения, интенсивности и ширины восьми линий с N" от 5 до 19. Отмечено, что наблюдаемые электрические квадрупольные переходы в $3 \cdot 10^{-6}$ раз слабее основных магнитных дипольных переходов кислорода.

В. С. Иванов

спектр
поглощен.

Ф. 1981 V 1

O₂

1980

Chem
b y.f.

- 94: 22365r A study of three dimol emissions of singlet oxygen, O₂(¹Δ_g), using a discharge flow shock tube. Borrell, Patricia M.; Borrell, Peter; Grant, Kevin R. (Dep. Chem., Univ. Keele, Keele, Engl. ST5 5BG). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1980, 76(11), 1442-9 (Eng). The relative emissivities and rate consts. for the 3 dimol. emissions of O₂ (¹Δ_g) were detd. at 650-1650 K by measuring their intensity ratios. The temp. dependence of the 634- and 703-nm emissions reveals that the intensity depends on the d.-temp. product $\rho^2 T^{1/2}$, indicating a basically collisional mechanism. Above 1100 K, an enhancement in the emission was obsd. with increasing temp. The ratio of the intensities at 579 and 634 nm, from the $v = 1$ and $v = 0$ vibrational levels of O₂ (¹Δ_g) at room temp., indicates that at the exit of the microwave discharge the amt. of vibrational excitation is equiv. to a temp. of 750 K.

C.A. 1981. 94 N 4

1980

O₂

4 Д473. Поглощение излучения H и D Ly- α молекулами O_2 при высоких температурах. Absorption of H and D Ly- α radiation by O_2 molecules at high temperatures. Chiang Chi-Chang, Skinner Gordon B. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1980, 24, № 6, 525—528 (англ.)

В ударной трубе измерены абс. значения сечения поглощения молекулами кислорода излучения H и D Ly- α (1215,67 и 1215,34 Å) при т-рах от 800 до 1700° K. Зависимость сечения от т-ры описывается выражением σ (см²) = $4,2 \cdot 10^{-18} \exp(-3070/T)$. Определены сечения поглощения для переходов с различных колебательных уровней основного состояния.: $1 \cdot 10^{-20}$ см² для $v=0$, $(9 \pm \pm 2) \cdot 10^{-19}$ см² для $v=1$ и $(7 \pm 3) \cdot 10^{-18}$ см² для $v=2$. Определены также времена релаксации, значения которых хорошо согласуются во всем диапазоне т-р с полученными другими авторами.

В. С. Иванов

сечение
поглощ.,
в у.т.

Ф. 1981 N 4

1980

O₂

21 Б111. Измерение фотоэлектронного спектра пороговых электронов для O₂ методом захвата электронов. Chutjian A., Ajello J. M. Threshold photoelectron spectrum of O₂ by electron attachment. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 3, 504—508 (англ.)

Кратко описан предложенный авторами ранее («J. Chem. Phys.», 1976, 65, 5524) метод получения спектров, идентичных фотоэлектронным спектрам пороговых электронов (ФЭСПЭ) и измеряемых с помощью

электронного спектрометра. Изменение интенсивности электронов с близкой к нулю кинетич. энергией в зависимости от энергии излучения возбуждения оценивается с использованием масс-спектроскопии по величине сигнала от ионов Cl⁻, образованных при диссоциативном захвате молекулами ловушечного газа CFCl₃ электронов, испущенных в результате фотоионизации исследуемых молекул. С помощью данного метода измерены ФЭСПЭ для O₂ в области энергий фотонов 11—19 эВ.

УДК

фотоэлектронный спектр

X. 1980 № 21

достаточных для возбуждения первых четырех электронных состояний O_2^+ : $X^2\Pi_g(I)$, $a^4\Pi_u(II)$, $A^2\Pi_u(III)$ и $b^4\Sigma_g(IV)$. Обнаружено, что в измеренном ФЭСПЭ интенсивности пиков, соотв-щих колебательным уровням с квантовыми числами $v=6-25$, $12-19$, $4-11$ электронных состояний I—III соотв., значительно выше (особенно в 1-м случае), чем следует из оценок франк-кондоновских факторов или из лит. экспериментальных данных по фотоэлектронной спектроскопии. Установлена сильная корреляция между областями спектра, где наблюдается этот эффект, и положениями ридберговских уровней O_2 , определенных из лит. данных по фотоионизац. масс-спектроскопии. Полученные результаты объяснены на основе качеств. рассмотрения возможных релаксац. процессов в ионном остове при резонансной автоионизации ридберговских уровней молекулы O_2 . Отмечено, что подобный подход к интерпретации ФЭСПЭ для O_2 , по-видимому, применим и к объяснению аналогичных данных для N_2 , H_2 , CO и NO , для к-рых возбуждение колебательных уровней основного состояния двухатомного иона также в основном определяется процессом резонансной автоионизации ридберговских уровней.

О. А. Басченко

1980

O₂

12 Д320. Пороговый фотоэлектронный спектр O₂, полученный методом захвата электронов. Threshold photoelectron spectrum of O₂ by electron attachment. Chutjian A., Ajello J. M. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 3, 504—508 (англ.)

фотоэлектронный
спектр

Исследован фотоэлектронный спектр пороговых электронов (ФЭСПЭ) (кинетич. энергии электронов близки к нулю) O₂ при энергиях фотонов 12—19 эв. ФЭСПЭ O₂ получен с использованием техники захвата пороговых фотоэлектронов CFCI₃ и последующей регистрацией осколочного иона Cl⁻ как ф-ции длины волны ионизирующего излучения. Проведено сравнение ФЭСПЭ O₂ с данными фотоэлектронной спектроскопии, фотоионизационной масс-спектрометрии, оптич. спектроскопии O₂, теоретич. расчетами коэф. Франка—Кондона для основного и возбужденных электронных состояний O₂⁺. Показано, что процессы резонансной автоионизации приводят к интенсивному заселению высоких колебательных уровней основного состояния O₂⁺x²Π_g и низких колебательных уровней состояний O₂⁺a⁴Π_u, A²Π_u и в⁺Σ_g⁻.
Библ. 17. Ю. В. Чижов

ф. 1980. N 12

O₂ (ne) 10308 1980

Clouter M. J., et al.

Раман
спектр

J. Chem. Phys., 1980,
73 (2), 673-82

Pure vibrational Raman Spectra.

Оттиски 10172

1980

O₂

5 Б169. Заселенности колебательных уровней при автоионизации кислорода. Eland J. H. D. Vibrational level populations in the autoionization of oxygen. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 11, 6015—6019 (англ.)

С разрешением 45 мэВ по энергии фотоэлектронов и с использованием в кач-ве возбуждения ультрафиолетового излучения высокой монохроматичности ($\Delta\lambda = 0,28 \text{ \AA}$) измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) молекулярного кислорода. Спектры получены при нескольких значениях энергий фотонов, соответствующих резонансному селективному возбуждению отдельных колебательных уровней ридберговских состояний J ($v' = 1-6$) и J' ($v' = 5,6$) молекулы O₂. После коррекции интенсивностей пиков в измеренных ФЭС на зависимость эффективности анализатора от энергии фотоэлектронов, с их помощью определены относит. заселенности ($n_{\text{r.}}$) колебательных уровней с $v'' = 0-12$ для терма $X^2\Pi_g$ иона O₂⁺, являющегося конечным состоянием фотоионизации молекулы O₂ и образованного в результате автоионизации промежуточных рид-

спектры

фотоэлектронные

X.1981.N5

берговс., состояний J и J' с различными значениями ν' . На основе предложенной ранее модели («J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer», 1970, 10, 1129) выведено выражение для определения ν'' , не содержащее параметров формы линий колебательной структуры ФЭС. С помощью этого выражения, используя при расчете соотв-щих франк-кондоновских факторов лит. параметры потенциальных поверхностей основных состояний O_2 и O_2^+ , величины ω_e и $x_e\omega_e$ для J и J' , а также кривую квантового выхода фотоионизации для кислорода, вычисляли значения ν'' при нескольких значениях межъядерного расстояния r для J и J' . Найдено, что наилучшее согласие между теор. и эксперим. данными наблюдается при r , равных $1,370 \pm 0,005$ и $1,380 \pm 0,005$ А для состояний J и J' соотв. На основе полученных результатов сделан вывод, что, в отличие от случаев резонансов формы, применение приближения Борна-Оппенгеймера при интерпретации проявлений автоионизац. эффектов в ФЭС O_2 достаточно корректно.

О. А. Басченко

1980

$^1\text{O}_2$ ($^1\Delta_g$)

образование
синглетн.
кислорода

5 Д449. Прямое наблюдение синглетного кислорода методом тепловой линзы. Direct observation of singlet oxygen by a thermal lensing technique. Fuke Kiyokazu, Ueda Masayasu, Itoh Michiya. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 76, № 2, 372—374 (англ.)

Исследовано образование синглетного кислорода $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ в результате переноса к $^3\text{O}_2$ энергии от молекулы диацетила, возбужденной в триплетное состояние излучением лазера на красителе в полосе 0—0 перехода вблизи 520 нм. Присутствие $^1\text{O}_2$ в насыщенном воздухе метанольном растворе диацетила и 2,5-диметилфурана (ДМФ) регистрировалось с помощью

He—Ne-лазера методом тепловой линзы, возникающей при безызлучательной деградации энергии ДМФ, возбужденного в реакции с $^1\text{O}_2$. Определены значения времени жизни $^1\text{O}_2$ в метаноле и константы скорости тушения $^1\text{O}_2$ в столкновениях с ДМФ, составившие (12 ± 2) мксек и $(0,9 \pm 0,2) \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$ соответственно. Библ. 18.

С. Литке

ф. 1980 № 5

O₃ (air).

XI-6238

1980

Flaed J.-w., Camy-Peyzet C., Barbe A.,
Secroun C., Jouve P.,

J. mol. Spectrosc., 1980, 80, w1, 185-199 (air)

Line positions and intensities for the
2v₃, v₁+v₃ and 2v₁ bands of ozone.

Re X.v., 1980, 195227

10

(40)

02

1980

Gagarin S. G.

орбитально-
космический.
носитель.

№oord. Khim. 1980, 6(2),
215-20

св. №2 - III

O₂

18 Б1323. Фотовозбуждение и ионизация в молекулярном кислороде: теоретические исследования электронных переходов в дискретных и непрерывных спектральных интервалах. Gerwer A., Asago C., McKoy B. V., Langhoff P. W. Photoexcitation and ionization in molecular oxygen: Theoretical studies of electronic transitions in the discrete and continuous spectral intervals. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 1, 713—727 (англ.)

фото -

возбужд.

Проведено теор. изучение процессов фотовозбуждения и фотоионизации молек. кислорода с участием валентных электронов ($1\pi_g$, $1\pi_u$, $3\sigma_g$). Расчеты сечений проводили в диапазоне энергий 10—70 эВ с использованием модели статич. обмена с разделенными каналами и теории моментов Стильтьеса—Чебышева. При определении нецентровых статич. обменных потенциалов, соотв-щих возбуждению каждой орбитали, и расчете

сил переходов в дискретной области и области континуума использовали орбитали Хартри—Фока основного состояния, строящиеся на основе больших гауссовых базисных наборов, и многоэлектронные состояния правильной симметрии с надлежащим учетом исходных состояний. Рассчитанные дискретные серии переходов, связанные с возбуждением орбитали $1\pi_g$, хорошо согласуются с имеющимися эксперим. и теор. данными. Для состояний, связанных с возбуждением $1\pi_u$ и $3\sigma_g$ -орбиталей, имеется общее согласие с отнесением линий высоких серий, полученным из спектрального анализа и анализа методом квантового дефекта. Расчитаны полные вертикальные сечения фотопоглощения и сечения фотоионизации по парц. каналам с образованием ионных состояний $X^2\Pi_g$, $a^4\Pi_u$, $A^2\Pi_u$, $2^2\Pi_u$, $3^3\Pi_u$, $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$, к-рые хорошо согласуются с измерениями различными методами. Парц. сечения имеют резонансную структуру, что объясняется вкладом диабатич. валент-

O₂

11 Д114. Метод ЧПДП/Ф с масштабным преобразованием как метод типа ЧПДП, не содержащий эмпирических параметров, для расчета соединений переходных металлов. SINDO/F theory, INDO-type theory free of molecular empirical parameters valid for

7980

transition metal compounds. Golebiewski A., Witko M. «Acta phys. pol.», 1980, A57, № 4, 585—597 (англ.)

Описан метод ЧПДП с масштабным преобразованием, не содержащий эмпирич. параметров, для расчета соединений переходных металлов. Основные интегралы рассчитываются через определенные по Бэрнсу экспоненты АО слэтеровского типа, интегралы электрон-электронного взаимодействия — через параметры Кондона—Шортли, резонансные интегралы — в базисе локально ортогонализованных орбиталей. По этой схеме рассчитаны энергии синглет-синглетных и синглет-триплетных переходов для O₂, N₂, CO, H₂O, акролеина, TiCl₄ (I), VO₄³⁻, CrO₄²⁻, MnO₄⁻ и первые 5 потенциалов ионизации I. Полученные результаты согласуются с данными неэмпирич. расчетов.

В. Л. Лебедев

расчет
молекулы,
геометрии,
(У)

(+?)

ф. 1980
н 11

21760

1980

O₂

парциальные
сечения
фотоиониз.

3 Д410. Парциальные сечения фотоионизации молекулярного кислорода. Partial photoionization cross sections of molecular oxygen. Gustafsson T. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 3, 505—508 (англ.)
Измерены распределения по энергиям фотоэлектронов (РЭФ), образующихся при фотоионизации O₂ синхротронным излучением, пропущенным через монохроматор, в интервале энергий фотонов 20—45 эв. Ширина полосы пропускания монохроматора — 4 Å. С помощью РЭФ найдены отношения парциальных сечений фотоионизации с образованием состояний

Ф. 1981 N 3

$O_2^{+2}P_g$; $a^4P_u + A^2P_u \cong a^4P_u$; $b^4\Sigma_g^- + B^2\Sigma_g^-$; $2^2P_u + C^4\Sigma_u^-$; $2^2\Sigma_u(2\sigma_u)$; 3^2P_u ; $2^4\Sigma_g^-$. По известным пол-
 ным абс. сечениям фотоионизации получены и приве-
 дены на графиках в зависимости от энергий фотонов
 абс. парциальные сечения фотоионизации для указан-
 ных состояний. Приведены сравнения с имеющимися в
 литературе теоретич. сечениями, полученными согласно
 теории моментов Стильтьеса — Чебышева. Эксперим.
 данные свидетельствуют в пользу наличия предска-
 зываемых теорией резонансов для некоторых ионных
 состояний в области 1—2 эв выше порога. Обсуждаются
 возможности определения угловых распределений фо-
 тоэлектронов для ориентированных молекул O_2 .

В. Н. Сошников

1980

O₂

Harris J, et al.

Phys. Rev. B: Condens Matter.
1980, 22, N6, 2614-25.

M.N.

cm. H₂-III

Оттиски 9907

1980

O₂

УД 85. Построение заданных по симметрии волновых функций O₂ с помощью теоретико-группового метода проекционных операторов. Generation of symmetry-adapted wave-functions for O₂ using group theoretical projection operators. Hurley A. C., Harcourt R. D., Taylor Peter R. «Isr. J. Chem.», 1980, 19, № 1—4, 215—219 (англ.)

М.П.

Рассмотрена процедура построения с помощью теоретико-групповых методов электронных волн. ф-ций линейных молекул с наперед заданными трансформационными свойствами. Основу подхода составляет техника проекционных операторов, развитая для бесконечных непрерывных групп. Обсуждаются особенности используемых проекционных операторов и вид матриц представления для группы C_{∞v}. Электронные волн. ф-ции молекулы O₂ строятся в результате действия оператора $\rho_{\lambda k}^{(j)}$ на произвольный базис ф-ций для конфигурации $(\pi_g)^2$. По найденным волн. ф-циям определены энергии термов $^3\Sigma_g^-$, $^1\Delta_g$ и $^1\Sigma_g^+$ молекулы O₂, причем численные оценки последних двух термов дали значения 1,50 и 3,00 эв над уровнем основного состояния.

А. Радциг

Ф-1981/1

иттис 9907

1980

O₂

построили
волновой
ф-ции

5 Б52. Получение волновых функций для молекулы O₂ с правильными свойствами симметрии с помощью проекционных операторов теории групп. Harley A. C., Harcourt R. D., Taylor P. R. Generation of symmetry-adapted wave-functions for O₂ using group theoretical projection operators. «Isr. J. Chem.», 1980, 19, № 1—4, 215—219 (англ.)

На примере молекулы O₂ с конфигурацией π_g^2 для открытой оболочки показано, как применение техники проектирования позволяет построить волновые функции и функционалы энергии для состояний $^3\Sigma_g^-$, $^1\Delta_g$ и $^1\Sigma_g^+$. Использование проекторов по симметрии не необходимо в этой задаче, но имеет смысл как полезный методич. прием.

В. И. Пупышев

2. 1981. N 5

O₂

Оттиск

9096

1980

12 Б135. Хемилюминесценция $O_2(^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^3\Sigma_g^-)$ и $SO(^1\Sigma^+ \rightarrow ^3\Sigma^-)$ в системе $O-COS \rightarrow O_2(^1\Delta_g)/O_2$. Ishi-
wata T., Tanaka I. Chemiluminescence of $O_2(^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^3\Sigma_g^-)$ and $SO(^1\Sigma^+ \rightarrow ^3\Sigma^-)$ in the $O-COS \rightarrow O_2(^1\Delta_g)/O_2$ system. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 1, 119—122 (англ.)

Исследованы р-ции переноса энергии в системе $C-COS \rightarrow O(^1\Delta_g)/O_2$, протекающие с образованием электронно-возбужденных молекул $O_2(^1\Sigma_g^+)$ и $SO(^1\Sigma^+)$. Измерялась интенсивность полос в ИК-области, связанная с переходами $b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ и $^1\Delta_g \rightarrow ^3\Sigma_g^-$ O_2 и $^1\Sigma^+ \rightarrow ^3\Sigma^-$ SO в зависимости от концентрации компонент смеси SO и O_2 ($^1\Delta_g$). На основании полученных данных предложены след. механизмы образования $O_2(^1\Sigma_g^+)$ и $SO(^1\Sigma^+)$:
 $O_2(^1\Delta_g) + SO(^3\Sigma^-) \rightarrow O_2(^3\Sigma_g^-) + SO(^1\Delta)$,
 $O_2(^1\Delta_g) + SO(^1\Delta) \rightarrow O_2(^1\Sigma_g^+) + SO(^3\Sigma^-)$,
 $SO(^1\Delta) + SO(^1\Delta) \rightarrow SO(^1\Sigma^+) + SO(^3\Sigma^-)$.
 Полученная из анализа спектров испускания вращательная т-ра для $O_2(^1\Sigma_g^+)$ и $SO(^1\Sigma^+)$ составляет, соотв., 330 и 350 К. Термализация электронно-возбужденных молекул, по-видимому, связана с относительно длительным излучательным временем жизни и происходит за счет столкновений с третьими молекулами или со стенками. В. М. Ковба

И. Р. Снежур,

Хемилумин.

A7

X-1980, N 12

O₂

5 Б38. Метод уменьшения числа преобразований двухэлектронных интегралов в многоконфигурационной процедуре Хартри — Фока второго порядка. Jørgensen Poul, Albertsen Preben, Yeager Danny L. A method to reduce the number of two electron integral transformations in a second order multi-configurational Hartree — Fock procedure. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 12, 6466—6473 (англ.) 1980

метод
Хартри-Фока

Процедура преобразования двухэлектронных интегралов в многоконфигурац. методе самосогласованного поля (МК ССП), необходимая перед каждым итерац. циклом во 2-м порядке, заменяется после первых нескольких циклов приближенным преобразованием орбиталей непосредственно в ур-ниях метода МК ССП. Унитарное преобразование состояний в рамках предлагаемой процедуры осуществляется точно. Выполнены расчеты, иллюстрирующие применение указанного метода на конкретном примере нижних электронных состояний O₂(³Σ_g⁻¹, Σ_g⁺¹ и ¹Δ_g). Предложенная процедура приближенного преобразования орбиталей может рассматриваться как метод определения линейных отклонений гиперповерхности энергии от параболоида, когда такие отклонения не являются пренебрежимо малыми.

⊗
④1 обш.
метод

Х. 1981. №5

А. И. Маергойз

O₂

2299 об уменьшения числа преобразований двух электронных интегралов в многоконфигурационном методе Хартри-Фока второго порядка. A method to reduce the number of two electron integral transformations

1980

tions in a second order multiconfigurational Hartree—Fock procedure. Jørgensen Poul, Albertsen Preben, Yeager Danny L. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 12, 6466—6473 (англ.)

расчет
состояний

$3\Sigma_g^- - {}^1\Delta_g,$
 ${}^1\Sigma_g^+$

Описан метод уменьшения числа преобразований двух-электронных интегралов в многоконфигурационном методе Хартри—Фока для случая использования итерационных процедур с квадратичной сходимостью. Преобразование интегралов заменяются преобразованием гамильтониана, которое реализуется в форме приближенных преобразований орбиталей. В качестве примера приводятся результаты расчетов состояний ${}^3\Sigma_g^-$, ${}^1\Delta_g$, ${}^1\Sigma_g^+$ молекулы O₂. Точность самосогласования по полной энергии, равная 10⁻⁶ ат. ед., достигается после 2—3 преобразований интегралов (что в два раза меньше, чем в обычной процедуре). Дополнительная итерация в рамках квадратично сходящейся МК ССП процедуры позволяет довести точность самосогласования до 10⁻¹⁰ ат. ед.

В. И. Барановский

Ф. 1987. 112

37
2

1980

Aug 2.

Theor. chim. acts, 1980,
57, №2, 107-30.

геометр.
м. связей
(у)

ссыл. №2-14

1980

O₂

Katsuki Shirachi; et al.

Int. J. Quantum Chem.,
1980, 18, N1, 25-29.

(9)

corr. N2-5

O₂

1980

Khan A. U.

Chem. Phys. Lett., 1980,
encomp. 72, p 112

Direct spectroscopic observation
of ...

[ommuca 9439] 1980

$\gamma\text{-O}_2, \text{O}_2$
— (sub.)

Kieft H. et al.

(Vi) Chem. Phys. Lett., 1980
70 (3), 425-29

Pure vibrational Raman Spectra
of some simple molecular
crystals: $\gamma\text{O}_2, \text{O}_2$ in heptane, BN_2

O₂

Lomachen 11245 1980.

Klimo V., et al.

Кв. мех.
фактор

Mol. Phys., 1980, 41 (3)

гуссаз.
предел

474-81.



(см. NH; III)

O₂

1980

Kovács I.

m.n.

Acta phys. Acad. sci. hung.,
1980, 48, n2-3, 323-331

● (Coel HgH) III

02

Commerce 10628

1980.

Lane J; et al.

interp CARs

a-better

J. Raman Spectrosc.,
1980, 9(6), 353-360

O₂

1980

CHICITP

93: 212685x Rotational variation of predissociation linewidths for the Schumann-Runge bands of molecular oxygen. Lewis, B. R.; Carver, J. H.; Hobbs, T. I.; McCoy, D. G.; Gies, H. P. F. (Res. Sch. Phys. Sci., Aust. Natl. Univ., Canberra, Australia). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1980, 24(5), 365-9 (Eng). Predissocn. linewidths are presented as a function of rotation for the (3-0)-(14-0) Schumann-Runge bands of O₂. While there may be a slight tendency overall for the linewidths to increase with rotation, previous assumptions of linewidths const. with rotation are generally valid within the exptl. error for the range of rotation studied, $N'' \leq 21$. There is no evidence for the sudden increase in linewidth with rotation reported elsewhere.

C.A. 1980. 93 v22

1980

O₂

19 Б146. Интенсивности спин-запрещенных переходов в молекулярном кислороде и избирательное влияние тяжелых атомов. Minaev B. E. Intensities of spin-forbidden transitions in molecular oxygen and selective heavy-atom effects. «Int. J. Quantum Chem.», 1980, 17, № 2, 367—374 (англ.)

Интенсивности $a^1\Delta_g - X^3\Sigma_g^-$ и $b^1\Sigma_g^+ - X^2\Sigma_g^-$ переходов в молек. кислороде вычисляются на основе полуэмпирич. метода молек. орбиталей с учетом спин-орбитального взаимодействия с помощью теории возмущений второго порядка. Показано, что первый переход ($a-X$) заимствует свою интенсивность у $^3\Pi_g - ^3\Sigma_g^-$ и $^1\Pi_g - ^1\Delta_g$ переходов. Вычисленные силы осцилляторов этих переходов находятся в хорошем согласии с эксперим. значениями. В конденсированной фазе интенсивность интеркомбинац. переходов увеличивается в результате межмолек. обменного взаимодействия с тяжелым внешним атомом А. Роль А в увеличении интенсивности $b-X$ перехода объясняется образованием столкновительного комплекса O_2-A . Рассмотрен механизм селективного влияния этого взаимодействия на интенсивность $b-X$ перехода.

2.

интенси.
спин-запр.
переходов

X. 1980 IV 19

В. И. Захарьин

O₂

1980

unpublished

P. A. 1980.
92 N 14

92: 118699n Intensities of spin-forbidden transitions in molecular oxygen and selective heavy-atom effects. Minaev, B. F. (Karaganda State Univ., 470061 Karaganda, USSR). *Int. J. Quantum Chem.* 1980, 17(2), 367-74 (Eng). Intensities of $a^1\Delta_g \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ transitions in O₂ were calcd. on the basis of the INDO method taking into account spin-orbit coupling by perturbation theory. The transitions are magnetic dipole in nature. The 1st of them (a -X) steals its intensity from $^3\Pi_g \leftarrow ^3\Sigma_g^-$ and $^1\Pi_g \leftarrow ^1\Delta_g$ transitions, which are detd. by the orbital angular-momentum operator. This source is not the principal one for the intensity of the 2nd (b -X) transition. Its intensity is stolen principally from microwave transitions between spin sublevels of the ground $^3\Sigma_g^-$ state. The last source explains the large difference in intensities of the a -X and b -X transitions. Calcd. oscillator strengths are in a good agreement with expt. The same integrals that det. the intensity also det. the parameters of the spin Hamiltonian for the ground $^3\Sigma_g^-$ state. These parameters are in good agreement with expt. also, showing the validity of the whole calcn. In a condensed phase, the investigated transitions are enhanced by intermol. exchange interaction. An external heavy atom (EHA) enhances the b -X transition of O in soln., but does not influence the a -X transition. In the collision complex O₂-EHA, which has a geometry without inversion symmetry, the microwave transitions between spin sublevels of the $^3\Sigma_g^-$ state obtain elec.-dipole moments, which are stolen from the charge-transfer transition. This mechanism explains the selective effect of EHA.

O₂

1980

Иткеншвн.
Иткерковд.
перекргов

/ 95: 123108k Intensity of spin forbidden transitions in an oxygen molecule and selective action of an external heavy atom. Minaev, B. F. (Karagand. Univ., Karaganda, USSR). *Usp. Kvantovoi Khim. Kvantovoi Biol., Tr. Mezhdunar. Konf.* 1980, 1, 275-83 (Russ). Edited by Petrov, E. G.; Loewdin, Per Olov; Zener, M. Izd. Naukova Dumka: Kiev, USSR. The intensity of the singlet-triplet transitions $a^1\Lambda_g \rightarrow X^3\Sigma_g$ at 12,700 Å and $b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ at 7620 Å of O₂ was calcd. by the INDO method with consideration of the spin-orbited interaction.

C.A. 1981, 95, N14.

O₂

ommueu 9954

1980

4

Murrell J. N.

u. n.

Israel J. Chem., 1980,
19, 283-289

обзор

O_2 , O_2^-

1980

(Электрон.
структура,
биол.
активн.)

97: 150815m Oxygen and its radicals. I. Electron structure. Mira, Lourdes; Manso, Carlos (Inst. Quim. Fisiol., Fac. Med. Lisboa, Lisboa, Port. 1600). *Rev. Port. Bioquim. Apl.* 1980, 3(3), 181-94 (Port). A review with 9 refs. of the electronic structure of O_2 and of its derivs. with biolog. activity: O_2^- , OH , OH^- , H_2O_2 , and O_3 . E. Grunhut.

(редкор)

(75) ~~18~~

O_2^- , OH , OH^- , H_2O_2 , O_3

C.A. 1982, 97, N18

O₂

1980
15 Б98. Спектроскопия электронного удара O₂ в области энергетических потерь 6,5—10,5 эВ. Newell W. R., Khakoo M. A., Smith A. C. H. Electron impact spectroscopy of O₂ for energy losses in the range 6,5 to 10,5 eV. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 24, 4877—4896 (англ.)

Методом спектроскопии электронного удара исследовано неупругое рассеяние электронов молек. кислородом в области энергетических потерь 6,5—10,5 эВ (энергия падающих электронов $E=100-500$ эВ, углы рассеяния $5-40^\circ$). Описаны и обсуждены конструктивные особенности электронного спектрометра. В спектре наблюдались континуум Шумана—Рунге (I) ($\sim 7,0-9,5$ эВ) и полосы $\sim 9,8$ эВ (II) и $10,3$ эВ (III). В I получена плохо разрешенная колебательная структура ($v'=0-3$), связанная с возбуждением состояния $^3\Pi_g$, и ряд подполос, связанных с диссоциативными процессами в результате пересечения потенциальной кривой валентного состояния $B^3\Sigma_u^-$ с потенциальными кривыми отталкивательных состояний $^1\Pi_u$, $^3\Pi_u$ и $^5\Pi_u$. Для I сопоставляются имеющиеся данные по положению максимума интенсивности, верхнему и нижнему энергетич.

по методу,
кривые,
спектр

2.1981. №15

пределам и оптич. силе осциллятора (f), полученные методами фотопоглощения и электронного удара. Приведены эксперим. данные (I—III) по зависимости: f от K^2 (K — перенос момента) и абсолютных дифференциальных сечений ($d\sigma/d\Omega$) от угла рассеяния. Рассчитаны кажущиеся обобщенные силы осцилляторов и $d\sigma/d\Omega$ для I—III при различных углах рассеяния (с интервалом 5°) и E (интервал $\Delta E = 100$ эВ). Получены значения f для II и III ($E = 100$ — 500 эВ). Обсуждена природа полос II и III.

В. М. Ковба

1980

O_2 (triplet)

cf. sex.
pacem

Paxiari A.H., et al.,

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, 18 (3), 661-73.

(cell. H₂; III)

1980

O₂

2 Д547. Влияние температуры и магнитного поля на полосы перехода $b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ молекулы O₂ в твердом растворе в α -N₂. Павлощук В. А., Пикус Ю. Г., Шанский Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1980, 49, № 5, 867—875

Обнаружена температурная зависимость интенсивности магнитодипольного перехода $b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ в молекулах O₂, изолированных в матрице α -N₂ обусловленная особенностями структуры уровней основного состояния молекулы O₂. Наблюдаемое во внешнем магн. поле изменение контура и интенсивности бесфононной линии этого перехода в твердом растворе O₂ в α -N₂ связано с расщеплением триплетного основного состояния O₂.

Резюме

Спектр

Ф.1981.N2

7980

94: 9492k Effect of temperature and magnetic field on O_2 transition bands of an oxygen molecule in a solid solution in α -nitrogen (α -N₂). Pavloshechuk, V. A.; Pikus, Yu. G.; Shanskii, L. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1980, 49(5), 867-75 (Russ). The temp. dependence of intensity of the magnetic dipole transition O_2 of the O_2 mol isolated in α -N₂ matrixes is specified by structure features of the ground state level of the O_2 mol. In external magnetic fields changes were obsd. in contour and intensity of phononless lines of this transition in solid solns. of O_2 in α -N₂ that are coupled with splitting of the triplet ground O_2 state.

умелеева,

Ж;

P. A. 1981. N 2, 94

1980

O₂

Влияние t°
и магнитн.
поля на
полосы пере-
хода $b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$

4 Б149. Влияние температуры и магнитного поля на полосы перехода $b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ молекулы O₂ в твердом растворе в α -N₂. Павлощук В. А., Пикус Ю. Г., Шанский Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1980, 49, № 5, 867—875.

- Обнаружена т-рная зависимость интенсивности магнито-дипольного перехода $b^1\Sigma_g^+ \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ в молекулах O₂ изолированных в матрице α -N₂, обусловленная особенностями структуры уровней основного состояния молекулы O₂. Наблюдаемое во внешнем магнитном поле изменение контура и интенсивности бесфононной линии этого перехода в тв. р-ре O₂ в α -N₂ связано с расщеплением триплетного основного состояния O₂. Резюме

х. 1981. N4

O₂

оптесск 10304

1980

O₂⁺

3 Д95. Изучение ридберговских состояний O₂ не-
эмпирическим методом конфигурационного взаимодей-
ствия. II. Расчеты состояний $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$ и $^1\Sigma_g^+$.
Ab initio configuration interaction study of the Rydberg
states of O₂. II. Calculations on the $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$,
and $^1\Sigma_g^+$ symmetries. Sax on Roberta P., Liu B.
«J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 2, 876—880 (англ.)

Методом, описанным в предыдущей статье (ч. I см.
реф. 3Д94), получены диабатич. кривые низших рид-
берговских состояний симметрии $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$ и
 $^1\Sigma_g^+$. Отмечено, что форма этих потенц. кривых близи
минимума практически одинакова. Для состояния $^1\Pi_g$
энергии колебательных уровней сопоставлены с соот-
ветствующими данными для иона O₂⁺.

В. И. Барановский

кв. мех.
расчет

(+1) Я

ф. 1984 № 3

O₂

000000 10304

1980

kb. sllk,
pacer

93:120743m Ab initio configuration interaction study of the Rydberg states of diatomic oxygen. II. Calculations on the $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$, and $^1\Sigma_g^+$ symmetries. Saxon, Roberta P.; Liu, B. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). J. Chem. Phys. 1980, 73(2), 876-80 (Eng). CI calcs. were performed for the $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$, and $^1\Sigma_g^+$ symmetries of O₂. The lowest diabatic Rydberg state for each symmetry is presented. Vibrational energy levels of the $^1\Pi_g$ Rydberg state are given. The extent of Rydberg-valence interaction is discussed and the $^3\Sigma_u^-$ state is occupied with a previous calcn.

CA 1980.93 N12

O₂

потенц.
кривые

Оттиск 10304

1980

4 Б28. Исследование ридберговых состояний O₂ эмпирическим методом конфигурационного взаимодействия. II. Расчеты состояний $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$ и $^1\Sigma_g^+$. Saxon Robert A., Liu B. Ab initio configuration interaction study of the Rydberg states of O₂. II. Calculations on the $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$, and $^1\Sigma_g^+$ symmetries. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 2, 876—880 (англ.)

В рамках вычислительной схемы, предложенной для расчета adiaбатич. потенциальных кривых ридбергов. состояний двухатомных молекул (см. пред. реф.) проанализированы состояния симметрии $^3\Sigma_g^-$, $^3\Sigma_u^-$, $^3\Pi_g$, $^1\Pi_g$ и $^1\Sigma_g^+$ молекулы O₂. Размерности пространств много конфигурац. функций состояния составляли от 3639 (для $^1\Sigma_g^+$) до 9222 ($^3\Pi_g$). Выделены adiaбатич. потенциальные кривые низших ридбергов. состояний,

ари:

2. 1031.14

коррелирующие с диссоциац. пределами $O(^5P) + O(^3P) - (^3\Sigma_g^- \text{ и } ^3\Sigma_u^-)$, $O(^3S) + O(^3P) (^1\Sigma_g^+, ^1\Pi_g)$, $O(^3P) + O(^5S) (^3\Pi_g)$. Отмечено, что вследствие высоких порядковых номеров корней векового уравнения, отвечающих ридберговым состояниям, относит. расположение потенциальных кривых ридбергова и возбужденных (в первую очередь ионных) состояний в каждом типе симметрии может быть неверным. Однако взаимное расположение ридберговских состояний разных симметрий должно быть правильным. С полученными потенциальными кривыми рассчитаны колебательные уровни $^3\Pi_g$ - и $^1\Pi_g$ -состояний, к-рые сопоставлены с эксперим. данными. Отмечены отличия найденной потенциальной кривой ридбергова состояния $^3\Sigma_u^-$ от кривой, рассчитанной ранее Бюнкером и Пейеримхоф.

А. В. Немухин

Оттиски 10305 1980

O₂

4 Б27. Исследование ридберговых состояний O₂ неэмпирическим методом конфигурационного взаимодействия. I. Общая вычислительная процедура для адиабатических молекулярных ридберговых состояний и пробные расчеты ³Π_g-состояний O₂. Saxon Robert a P., Liu B. Ab initio configuration interaction study

of the Rydberg states of O₂. I. A general computational procedure for diabatic molecular Rydberg states and test calculations on the ³Π_g states of O₂. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 2, 870—875 (англ.)

Обсуждена вычислительная схема расчетов адиабатических потенциальных кривых ридберговых состояний двух атомных молекул. Расчет проводится методом конфигурац. взаимодействия (КВ), для каждого межъядерного расстояния анализируются многоконфигурац. ф-ции состояния и найденные при решении векового уравнения коэф. в этих ф-циях перед отдельными конфигурациями, после чего состояния с малыми весами конфигураций, построенных из валентных или основных орбиталей, относятся к ридберговым. При изменении межъ-

потенц.
кривая

2-1981. N4

ядерного расстояния ридбергов характер может оказаться присущим, вообще говоря, др. адиабатич. состоянию, поэтому диабатич. потенциальная кривая ридбергова состояния получается сложной кривой, пересекающей ряд адиабатич. потенциальных кривых. Изложенная схема применена к анализу ридбергова 3P_g -состояния молекулы O_2 , коррелирующего с диссоциац. пределом $O(^3P) + O(^5S)$ [следующим за низшими пределами $O(^3P) + O(^3P)$, $O(^3P) + O(^1D)$, $O(^3P) + O(^1S)$, $O + (^4S) + O - (^2P)$]. При вычислениях использован базисный набор слейтеровских функций s -, p - и d -типа. Коэф. разложений МО по базисным орбиталям найдены в рамках многоконфигурац. метода ССП с набором конфигураций, позволяющим качественно правильно описать диссоциацию рассмотренных состояний. Проанализированы несколько вариантов выбора окончательных разл. КВ, различающихся способом учета корреляц. эффектов при описании валентных и ридберговских состояний. Отмечено, что во всех случаях получаются близкие результаты для диабатич. потенциальной кривой ридбергова состояния. Найдено, что в рассмотренном примере взаимодействие валентных и ридбергова состояний достаточно мало. Вблизи минимума рассчитанная потенциальная кривая ридбергова состояния O_2 близка к потенциальной кривой 2P_g -состояния O_2^+ , известной на основании анализа методом РКР.

А. В. Немухин

O₂

Phonetic 10305

1980

93:122757t Ab initio configuration interaction study of the Rydberg states of diatomic oxygen. I. A general computational procedure for diabatic molecular Rydberg states and test calculations on the $^3\Pi_g$ states of diatomic oxygen. Saxon, Roberta P.; Liu, B. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(2), 870-5 (Eng). CI calcs. were performed on the $^3\Pi_g$ symmetry of O₂ which establish a general computational procedure for diabatic mol. Rydberg states. Three different calcs. which include varying amts. of electronic correlation for the Rydberg and valence states are reported. The interaction potentials for the lowest diabatic Rydberg state from these 3 calcs. are in excellent agreement showing that semi-internal correlation energy of Rydberg states has little effect on the potential curves. The Rydberg state is exceedingly similar to the O₂⁺ $^2\Pi_g$ state to which the $^3\Pi_g$ Rydberg series converges. Energies for the lowest 4 Rydberg vibrational levels are presented.

kb. see X.
pacer

CA 1980 93 v12

O₂

Оттиск 103 05

1980

3 Д94. Изучение ридберговских состояний O₂ не-
эмпирическим методом конфигурационного взаимодейст-
вия. I. Общая методика расчета для адиабатических мо-
лекулярных ридберговских состояний и тестовые рас-
четы состояний ³Π_g молекулы O₂. Ab initio configura-
tion interaction study of the Rydberg states of O₂. I. A
general computational procedure for diabatic molecular
Rydberg states and test calculations on the ³Π_g states
of O₂. Saxon Robert A P., Liu B. «J. Chem. Phys.»,
1980, 73, № 2, 870—875 (англ.)

На примере расчета ридберговского состояния (PC)
³Π_g молекулы O₂ опробована методика получения
адиабатич. кривых PC двухатомных молекул, которая
заключается в следующем. Методом КВ проводятся
расчеты адиабатич. кривых ряда возбужденных состоя-
ний, и для каждого межатомного расстояния выбирается
состояние, носящее ридберговский характер; через
отобранные таким образом точки проводится кривая.

Кв. мех.
расчет

Ф.1981/13

которую можно рассматривать как адиабатическую. Расчеты $^3\Pi_g$ РС O_2 производились в расширенном (главным образом за счет диффузных ф-ций) слэтеровском базисе. Выполнено три серии расчетов, отличающихся степенью учета внутренней и полувнутренней корреляционной энергии РС. Оказалось, что учет указанных корреляций мало влияет на форму потенц. кривой РС $^3\Pi_g$. Структура колебательных уровней этого состояния очень близка к структуре колебательных уровней O_2^+ ($^2\Pi_g$). Отмечены сложности, возникающие при теоретич. изучении смещения валентных и ридберговских состояний.

В. И. Барановский

ин.
прс
г

O₂

commuck 10769

1980

Sexton B.A., Madix R.J.

Heppner
Chen, J.

Chem. Phys. Lett., 1980,

Do

76 (2), 294-97.

Chen, J.

Vibrational spectra of molecular and atomic  oxygen on Ag(110)

O₂

1980

Shimizu T., et al

u.v. excmp.

Appl. Phys., 1980, 21, N1,
29-34.



con NH₃ ; III

1980

O₂

спектр
полюс.

Steele W.A., et al.,
J. Chem. Phys., 1980,
72, N 4, 2250-2259

(см. N₂; III)

1980

O₂

2 Д108. Спектроскопия электронного совпадения для O₂: распределение импульсов валентных электронов и энергии связывания. Electron coincidence spectroscopy of O₂: valence electron momentum distributions and binding energies. Suzuki L. H., Weigold E., Brion C. E. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1980, 20, № 4, 289—303 (англ.)

Спектроск.
Э.м. совпад.

Методом $(e, 2e)$ -спектроскопии получены спектры распределения импульсов для валентных орбитальных переходов и энергии связывания для молекулы кислорода. Найдено, что внешняя орбиталь Π_g значительно более диффузна в импульсном пространстве, чем орбитали Π_u . На основе анализа распределения импульсов пики 39 и 47 эВ отнесены к ионным состояниям $^2\Sigma_g^-$ и $^4\Sigma_g^-$. Распределение по моменту импульсам и наблюдаемая интенсивность перехода 32,5 эВ подтверждают отнесение этого перехода к состоянию $^2\Pi_u$. Измеренные относит. интенсивности для различных переходов типов Π_u и Σ_u качественно согласуются с результатами расчетов методами конфигурац. взаимодействия и ф-ции Грина.

А. Дементьев,

пр. 1981.12

1980

O₂Электронная
спектроскопия

2 Б90. Электронная спектроскопия по методу совпадений молекулы O₂: энергии связи и импульсные распределения валентных электронов. Suzuki I. H., Weigold E., Brion C. E. Electron coincidence spectroscopy of O₂: valence electron momentum distributions and binding energies. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1980, 20, № 4, 289—303 (англ.)

Методом (e, 2e)-спектроскопии исследованы энергии связи и импульсные распределения валентных электронов в молекуле O₂. (e, 2e)-Спектры были получены при возбуждении молекулы пучком перв. электронов с энергиями 400 и 1200 эв. Установлено, что верхняя П_g-МО в O₂ описывается волновой функцией, значительно более протяженной в импульсном пространстве, чем более глубокая П_u-МО. Этот результат связан с однократной

X. 1981 N 2

заселенностью МО $1 \Pi_g$ в основном состоянии $X^3\Sigma_g^-$ молекулы O_2 . Пики в $(e, 2e)$ -спектре при энергиях связи 39 и 47 эВ на основании импульсного распределения соотв-щих МО отнесены к состояниям $4,2\Sigma_g^-$ иона O_2^+ , а пик с энергией связи 32,5 эВ отнесен к $2\Pi_u$ -состоянию иона. Относит. интенсивности пиков в измеренных спектрах качественно согласуются с результатами расчетов методом конфигурац. взаимодействия и функций Грина. Проведенные измерения показали, что энергетич. зависимость сечений $(e, 2e)$ -рассеяния слабо зависит от энергии перв. пучка электронов, что указывает на применимость импульсного приближения для описания процессов $(e, 2e)$ -рассеяния.

И. А. Тополь

O₂

1980

Tossell J. A., et

J. Phys. Chem. Solids 1980,
41(10), 1047-52

no. mex.
packet

Te; De

env. O₂⁻ - III

1980

 O_2 NO N_2 NH

Chemical

Reaction.

V92: 171932j Chemiluminescence of molecular nitrogen, imidogen, and molecular oxygen in argon matrices. Van de Bult, C. E. P. M.; Allamandola, L. J.; Baas, F.; Van Ijzendoorn, L.; Greenberg, J. M. (Lab. Astrophys., Huygens Lab., 2300 Leiden, Neth.). *J. Mol. Struct.* 1980, 61, 235-8 (Eng). The chemiluminescence spectra from O_2 , NO , N_2 and NH were obtained during warm-up of vacuum UV photolyzed mixts. of Ar contg. small amts. of H_2O and/or NH_3 . The spectra can be explained by recombination reactions between the trapped (ground state) atoms $N(^4S)$ and $O(^3P)$, and in the case of the obsd. NO_2 system, also by the excited $N(^2D)$ atoms. The presence of $N(^2D)$ atoms during sample warm-up is further evidenced by the obsd. $N(^2D) \rightarrow N(^4S)$ transition.

③ 4

CA 1980 92 v20

O₂

Comstock 9740 1980

Varandas A. J. C.

packet.

Nomencl.

97-94-8

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. II, 1980, 76,
129 - 135

1980

0₂

2 Д544 ДЕП. Параметры спектральных линий красных полос молекулярного кислорода. Войцеховская О. К., Макушкин Ю. С., Сулакшина О. Н. Ред. ж. «Изв. вузов СССР. Физ.». Томск, 1980. 21 с., библиогр. 15 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 3 нояб. 1980 г., № 4658—80 Деп.)

(2i)

Для количеств. оценок ослабления монохроматич. излучения, распространяющегося в реальной атмосфере, необходимо учитывать поглощение энергии магнитно-дипольными переходами в молекулярном кислороде. Проведен расчет интенсивностей и центров линий поглощения кислорода по методике, предложенной Уотсоном для переходов между синглет-триплетными состояниями. Автореферат

Ф.1981. N2

O₂

1980

($3\Sigma_g^- \rightarrow 1\Sigma_g^+$) 96:76818a Parameters for spectral lines of the red bands of molecular oxygen. Voitsekhovskaya, O. K.; Makushkin, Yu. S.; Sulakshina, O. N. (USSR). *Deposited Doc.* 1980, VINITI 4658-80, 22 pp. (Russ). Avail. VINITI. The rotational line intensities in $3\Sigma_g^- \rightarrow 1\Sigma_g^+$ electronic transitions in the absorption spectra of atm. O₂ were calcd. using the J. K. G. Watson (1968) method.

расчет
интенсив-
ностей

C. A. 1982, 96, N10

П₂

оттиск 9564

1980

19 Б157. Состояние $A'^3\Delta_u$ O_2 и связанные с ним спектры. Wraight P. C. The $A'^3\Delta_u$ state of O_2 and related spectra. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, № 1, 127—130 (англ.)

Более детально обосновывается сделанное ранее предположение, что состояние $A'^3\Delta_u$ молекулы кислорода обращенное, т. е. компонента с $\Omega=3$ — наиболее низколежащая по энергии. С этой точки зрения обсуждаются нек-рые результаты выполненных ранее исследований, в частности объясняется факт наблюдения излучательных переходов только из компоненты $\Omega=3$ в состояние $a'\Delta_g$ и только из компонент $\Omega=1, 2$ в состояние $X^3\Sigma_g^-$. Рассматривается механизм заселенности компонент состояния $^3\Delta_u$ при рекомбинации атомов кислорода.

В. М. Ковба

Составщик:
 $A'^3\Delta_u$

Х. 1980 N 19

O₂

оттиски 9564

1980

У) 8 Д304. Состояние $A'^3\Delta_u$ молекулы O_2 и связанные с ним спектры. The $A'^3\Delta_u$ state of O_2 and related spectra. Wraight P. C. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, № 1, 127—130 (англ.)

Проанализированы спектральные данные по состоянию $A'^3\Delta_u$ молекулы O_2 . Показано, что это состояние является инвертированным (наинизшей компонентой является $\Omega=3$). В связи с этим отмечена необходимость внесения корректив во многие ранее опубликованные работы. Объяснены хорошо известные факты: для компоненты с $\Omega=3$ наблюдается радиационный переход лишь в состояние $a^1\Delta_g$, а для компонент $\Omega=1,2$ — только в состояние $X^3\Sigma_g^-$. Рассмотрены возможные причины неравновесного заселения спиновых компонент состояния $A'^3\Delta_u$. Библ. 21.

В. С. Иванов

спектры

фр 1980 N 8

O₂

1980

спектр
поглощения
в Si и Ge.

11 Д317. ИК-поглощение кислорода в кремнии и германии при низких температурах. Infrared absorption of oxygen in silicon and germanium at low temperatures. Xu Zhen-jia, Chen Yu-zhang, Jiang De-sheng, Song Chun-ying, Li He-cheng, Song Xiang-fang, Ye Yi-ying. «Ули сюэбао, Acta phys. sinica», 1980, 29, № 7, 867—877 (кит.; рез. англ.)

Методом фурье-преобразования исследованы ИК-спектры ($4000-400\text{ см}^{-1}$) кислорода (I) в кремнии и германии при t -рах $6-300^\circ\text{K}$ и разрешении полос $\sim 0,5\text{ см}^{-1}$. Проведен анализ пределов чувствительности аппаратуры и методов определения концентрации I в Si и

Ф. 1980 N 11

Ge. Отмечено, что в образце толщиной 2 см миним. конц-ия I в Si и Ge при т-ре 20°K составляет $9,6 \cdot 10^{14}$ атом/ см^3 и $3,0 \cdot 10^{14}$ атом/ см^3 соответственно. Показано, что конц-ия I в монокристаллич. Ge в значительной мере определяется способом и режимом выращивания монокристалла. Изучены изменения интенсивности компонент тонкой структуры ИК-полосы 1106 см^{-1} Si при изменении т-ры для образцов с различным содержанием I. Предположено, что в исследованном температурном интервале конц-ия I в монокристаллах Si может быть оценена путем анализа структуры ИК-полосы 1106 см^{-1} кристаллич. матрицы.

И. В. А.

O₂

литтиса 9369

1980

8 Д128. Численное исследование сходимости квадратичной и приближенно-квадратичной многоконфигурационных процедур Хартри — Фока. A numerical study of the convergency of second and approximate second-order multiconfiguration Hartree-Fock procedures. Yeager Danny L., Jørgensen Poul. «Mol. Phys.», 1980, 39, № 3, 587—596 (англ.)

Кв. мех.
расчет

Проведено подробное численное исследование сходимости квадратичной и приближенно-квадратичной процедур Хартри—Фока. Рассчитаны возбужденное $2p^2\ ^1S$ состояние Be и нижние состояния симметрии $^3\Sigma_g^+$, $^1\Delta_g$, $^1\Sigma_g^+$, $^1\pi_g$, $^3\pi_g$ молекулы O_2 . Расчеты O_2 включали все конфигурации, которые можно построить из дважды занятых основных орбиталей с 8 электронами в валентных оболочках $3\sigma_g$, $1\pi_u$, $1\pi_g$, $3\sigma_u$. В расчетах с квадратичной процедурой сходимость достигается за 4—6 итераций даже в тех случаях, когда приближенно-квадратичная процедура не дает сходимости. А. Н. Ермошкин

ср 1980 № 8

O₂

Оттиск 12823

1981

4 Д559. Магнитный дипольный переход $a^1\Delta_g - X^3\Sigma_g^-$ в послесвечении кислорода. The magnetic dipole $a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ transition in the oxygen afterglow. Amiot C., Verges J. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 10, 1391—1398 (англ.; рез. фр.)

М.П.

Магнитный дипольный переход $O_2(a^1\Delta_g - X^3\Sigma_g^-)$ зарегистрирован впервые при рекомбинации атомов ^{16}O в кислородном послесвечении. Полоса 0—0 этого перехода исследована с высоким разрешением с использованием фурье-интерферометра. В результате совместного анализа ИК- и микроволн. данных определены значения спектроскопич. постоянных для уровней $v=0$ состояний $a^1\Delta_g$ и $X^3\Sigma_g^-$. Библ. 27.

Ф. 1982, 18, № 4.

O₂

Ommex 12823

1981

$a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g^-$

95: 228621a The magnetic dipole $a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ transition in the oxygen afterglow. Amiot, C.; Verges, J. (Lab. Phys. Mol. d'Opt. Atmospherique, F91405 Orsay, Fr.). *Can. J. Phys.* 1981, 59(10), 1391-8 (Eng). The magnetic dipole $a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ transition was obsd. for the 1st time during the recombination of ¹⁶O atoms in an afterglow. The spectrum of the 0-0 band was recorded with a high resolu. Fourier transform interferometer. Accurate mol. consts., obtained by combining IR and microwave data, are given for the $a^1\Delta_g$ and $X^3\Sigma_g^-$ ($v = 0$) electronic levels.

C.A. 1981, 95, N26

O₂

1981

~~12 Д773.~~ Двухфотонная, индуцированная лазером флуоресценция атомов кислорода и азота. Two-photon laser-induced fluorescence in oxygen and nitrogen atoms. Bischel William K., Perry Bryce E., Crosley David R. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 1, 85—88 (англ.)

флуоресценция

Третьей антистоксовой компонентой комб. рас. в H₂ от второй гармоники излучения импульсного лазера на красителе осуществлялось двухфотонное возбуждение атомов кислорода и азота. Плотность атомов, создаваемых в потоке в газовом разряде, составляла $(1-5) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Длительность импульсов 8 нс, энергия возбуждения $\sim 30 \text{ мкДж}$ в импульсе на длинах волн 226 нм (переход $2p^3P-3p^3P$ для OI) и 211 нм ($2p^3^4S^0-2p^33p^4D^0$ для NI). Ширина линий возбуждения $\sim 0,3 \text{ см}^{-1}$. Регистрировался сигнал флуоресценции при переходах $3p^3P-3s^3S$ в OI ($\lambda=845 \text{ нм}$) и $2p^33p^4D^0-2p^23s^4P$ в NI ($\lambda=869 \text{ нм}$). Получены значения попереч-



(+1)

ф. 1981, 18, N 12. → N₂

ных сечений двухфотонных переходов ($3 \cdot 10^{-28}$ и $2,4 \cdot 10^{-28}$ см⁴/Вт), радиационных времен жизни возбужденных состояний ($39,1 \pm 1,4$ и 27 ± 3 нс) и констант тушения при столкновении с молекулами N₂ ($(2,5 \pm 0,1) \cdot 10^{-10}$ и $(2,4 \pm 0,6) \cdot 10^{-10}$ см³/с) для OI и NI, соответственно.

Е. Антонов



O₂

оммчек 12815

1981

обзор,
теорет.
расчет.
модельно-
орбиталь,
геометрия,
γ

Bohm M.C., Gleiter R.

Theor. chim. acta,
1981, 59(2), 153-179.

O₂

1981

Скорости
тушения
молек. CO₂
(ударная
труба)

12 Д792. Исследование в ударной трубе тушения синглетного кислорода ($^1\Sigma_g^+$) двуокисью углерода. A discharge flow/shock tube study of the quenching of singlet oxygen ($^1\Sigma_g^+$) by carbon dioxide. Borrell P. M., Borrell P., Grant K. R. — European Conference on the Dynamics of Excited States, Pisa, 14—16 th Apr., 1980. — «Nuovo cim.», 1981, B63, № 1, 68—75 (англ.; рез. итал., рус.).

В ударной трубе измерены константы скорости тушения O₂($^1\Sigma_g^+$) молекулами CO₂ при т-рах 600—1300 К. Установлено, что константы скорости тушения уменьшаются при увеличении т-ры.

ф. 1981, 18, N 12.

O₂

Commue 11222

1981

Borrell P. M., et al.

J. Chem. Soc. Faraday Trans. II
1980, 76, 1442-49.

A study of Three Dimol Emissions
of Singlet Oxygen O₂ (¹Δ_g), ...

O₂

Оттиск 13834

1981

2 Д107. Неэмпирический расчет спин-орбитального взаимодействия в многоатомных молекулах при использовании волновых функций гауссова типа. Ab initio calculation of spin-orbit interaction in polyatomic molecules using Gaussian-type wavefunctions. Breulet Jacques. «J. Comput. Chem.», 1981, 2, № 3, 244—250 (англ.)

Разработан комплекс программ для расчета спин-орбитального взаимодействия в многоатомных молекулах, который может применяться совместно с программой GAUSSIAN 76, при использовании базиса из

сгруппированных гауссовых ф-ций. В качестве примеров проведены расчеты параметров спин-орбитального взаимодействия для молекул O₂ ($X^3\Sigma_g^-$), NH ($X^3\Sigma_g^-$) и CH₂ (X^3B_1). Показано, что полученные параметры хорошо согласуются с аналогичными величинами, найденными при использовании базисов из слэтеровских ф-ций.

Е. А. Ж.

Ув. мех.
расчет

⊠
(+2)

ф. 1982, 18, №2.

O₂

Оттиск 12261

1981

3 Б234. Новая оптически запрещенная ридберговская серия O₂, сходящаяся к пределу O₂⁺(c⁴Σ_u⁻). Dillon M. A., Spence David. A new, optically forbidden Rydberg series in O₂ converging to the O₂⁺cΣ_u⁻ limit. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6070—6074 (англ.)

М. П.

Проведено эксперим. исследование неупругого рассеяния электронов с энергией 75—400 эВ (для углов рассеяния 2—12°) на кислороде. Дано краткое описание использованной техники, обсуждена точность эксперимента. Изучение потерь энергии при больших углах рассеяния позволило отобрать четыре полосы (21,85; 23,30; 23,80; 24,06 эВ), относенные к запрещенной ридберговской серии, сходящейся к O₂⁺(c⁴Σ_u⁻). Квантовый дефект оценен как 0,75. Высказано мнение, что найденные полосы отвечают возбужденным состояниям типа ³Σ_g⁻, получаются при переходах типа σ_u2s → nрσ_u для n = 3, 4, 5, 6.

В. И. Пупышев

Х. 1982, 19, № 3.

O₂

ommua 11397

1981

(94:216798c The vibration-rotation Raman spectra of molecular oxygen ¹⁸O₂, ¹⁷O¹⁸O, ¹⁷O₂ and ¹⁶O₂. Edwards, H. G. M.; Long, D. A.; Najm, K. A. B.; Thomsen, M. (Sch. Chem., Univ. Bradford, West Yorkshire, Engl. BD7 1DP). *J. Raman Spectrosc.* 1981, 10(Sergio Porto Commemorative Issue), 60-3 (Eng).

The vibration-rotation Raman spectra of the oxygen species ¹⁸O, ¹⁷O¹⁸O, ¹⁷O₂ were recorded and analyzed; the spectra of the ¹⁷O¹⁸O and ¹⁷O₂ species are reported for the 1st time. The I_e and α values from these analyses were used to calc. values for the equil.-state rotational const., B_e , and hence the bond lengths, r_e . A weighted mean $r_e = 120.754 \pm 0.001$ pm for the O₂ mol. was obtained.

колебам.
вращам.
спектр
 r_e

C.A. 1981. 94 N 26.

Оттиски. 11397 1981

Q₂

9 Д474. Колебательно-вращательные спектры комбинационного рассеяния $^{18}\text{O}_2$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{17}\text{O}_2$ и $^{16}\text{O}_2$. The vibration-rotation Raman spectra of $^{18}\text{O}_2$, $^{17}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{17}\text{O}_2$ and $^{16}\text{O}_2$. Edwards H. G. M., Long D. A., Najm K. A. B., Thomsen M. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 10, Jan., 60—63 (англ.)

ММ.

Получены колебательно-вращательные спектры комб. рас. молекул $^{18}\text{O}_2$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{17}\text{O}_2$ и $^{16}\text{O}_2$ при возбуждении лазерной линией 488,0 нм мощностью 1,2 Вт. Идентифицированы компоненты вращательной структуры O-, Q- и S-ветвей полосы колебания перечисленных молекул. Определены спектроскопич. постоянные B_0 , α , B_e и длины связей r_e для равновесных вращательных состояний. Отмечено удовлетворительное согласие теоретич. и эксперим. значений частот вращательных переходов в изотопически-замещенных молекулах O_2 со средней ошибкой $\nu_{\text{эксп.}} - \nu_{\text{выч.}} = \pm 0,002 \text{ см}^{-1}$. Показано, что спектроскопич. константы изотопически-замещенных молекул O_2 , определенные путем анализа колебательно-вращательных спектров комб. рас. коррелируют с аналогичными постоянными, вычисленными при сопоставлении полос чисто вращательных переходов в молекулах O_2 и его изотопич. аналогах. Библ. 11.

Ф. 1981 №9

И В А

02

оттиски 11397

1981

16 B295. Колебательно-вращательный спектр комбинационного рассеяния $^{18}\text{O}_2$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{17}\text{O}_2$ и $^{16}\text{O}_2$. Edwards H. G. M., Long D. A., Najm K. A. B., Thomsen M. The vibration-rotation Raman spectra of $^{18}\text{O}_2$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$, $^{17}\text{O}_2$ and $^{16}\text{O}_2$. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 10, Jan., 60—63 (англ.)

Записан спектр КР (изотопных разновидностей $^{18}\text{O}_2$ (I), $^{18}\text{O}^{17}\text{O}$ (II), $^{17}\text{O}_2$ (III), $^{16}\text{O}_2$ (IV) молекулы кислорода в области 1500 см^{-1} . Спектр отнесен к O, Q и S ветвям стоксовой $v=1 \leftarrow v=0$ полосы. Спектр обработан по известным полиномиальным ф-лам для колебательно-вращательной энергии невырожденного электронного состояния двухатомной молекулы. Для всех разновидностей I—IV молекулы кислорода установлены значения $B_0 D_0$ (вращательной, центробежной постоянных основного колебательного состояния) и $\alpha = -(B_1 - B_0)$. Из них для I—IV вычислены величины

спектр
К, Р.

М. П.

2.1981.N16

равновесных вращательных постоянных B и длин связей r_e : $^{16}\text{O}_2$: $B_e = 1,28458 \pm 0,00003 \text{ см}^{-1}$, $r_e = 120,756 \pm 0,003 \text{ пм}$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$: $B_e = 1,32270 \pm 0,00003 \text{ см}^{-1}$, $r_e = 120,754 \pm 0,002 \text{ пм}$, $^{17}\text{O}_2$: $B_e = 1,36041 \pm 0,00003 \text{ см}^{-1}$, $r_e = 120,754 \pm 0,002 \text{ пм}$, $^{16}\text{O}_2$: $B_e = 1,44559 \pm 0,00002 \text{ см}^{-1}$, $r_e = 120,754 \pm 0,002 \text{ пм}$. Получено среднее значение $r_e = 120,754 \pm 0,001 \text{ пм}$ для молекулы кислорода. Приведены наблюдаемые и вычисленные волновые числа колебательно-вращательных линий для вращательного квантового числа N от 1 до 15—19. Отмечено хорошее согласие полученных значений для B_0 , D_0 , r_e с лит. данными.

В. М. Михайлов

A2

1981

9 Д448. Микроволновые спектры молекул $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ и $^{18}\text{O}^{17}\text{O}$. Microwave spectra of $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ and $^{18}\text{O}^{17}\text{O}$. Caz-zoli G., Degli Esposti C., Favero P. G., Se-veri G. «Nuovo cim.», 1981, B62, № 1, 243—254 (англ.; рез. итал., рус.)

микроволновые
спектры

В диапазоне 50—120 ГГц исследованы микроволн. спектры молекул $^{16}\text{O}^{17}\text{O}$ и $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$. Идентифицированы линии магнитно-дипольных переходов с $J \leq 12$ в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом электрического квадрупольного и магнитного спин-вращательного взаимодействий. Определены значения параметров этих взаимодействий. М. Р. Алиев

М. Р.

Ф. 1981 N9

$^{16}\text{O}^{17}\text{O}$, $^{17}\text{O}^{18}\text{O}$

1981

(146 cm⁻¹ cm⁻¹)
(Ze)

' 95: 15356f Microwave spectra of oxygen-16-oxygen-17 and oxygen-18-oxygen-17. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Favero, P. G.; Severi, G. (Lab. Spettrosc. Mol., CNR, 40126 Bologna, Italy). *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. B* 1981, 62B(1), 243-54 (Eng). The millimeter wave spectra of $^{16}\text{O}-^{17}\text{O}$ and $^{17}\text{O}-^{18}\text{O}$ were obsd. and analyzed. Five parameters of the fine-structure Hamiltonian and 3 of the hyperfine-structure Hamiltonian were detd. for both isotopic species. The r_e and approx. r_e structures were also detd.

C.A. 1981, 95, N2.

1931

O₂

(Di)

16 Б180. Изучение бимолекулярного испускания возбужденного молекулярного кислорода в области 0,6344 мкм. Fisk G. A., Hays G. N. A study of the 0.634 μ m dimol emission from excited molecular oxygen. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 79, № 2, 331—333 (англ.)

Определена константа скорости (k_d) бимолек. излучательного процесса $2O_2(a^1\Delta_g) \xrightarrow{E_d} 2O_2(X^3\Sigma_g^-) + h\nu$ ($\lambda = 0,634$ мкм, $k_d = (4,4 \pm 1,3) \times 10^{-23}$ см³/молекула·сек). Использовали два источника возбуждения молек. кислорода — микроволновый и химический. Одновременно с бимолек. излучением регистрировалось мономолек. излучение связанное с переходом $O_2(a^1\Delta_g) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-)$ ($\lambda = 1,27$ мкм). Сделан вывод, что k_d не зависит от давл. кислорода вплоть до $P_{O_2} = 4,5$ мм и давл. аргона $P \leq 77$ мм.

В. М. Ковба



X.1981.N16

Q₂

Lammica 12732 | 1981.

Fliszar S., et al.

Кв. мек,
расчет

Canad. J. Chem., 1981,
59, 1074-82.

02

Витмиск 12760

1981

1 9 Б149. Экспериментально определенные силы осцилляторов и ширины линий для системы полос Шумана — Рунге молекулярного кислорода. III. Полосы от (7—0) до (19—0). Gies H. P. F., Gibson S. T., McCoy D. G., Blake A. J., Lewis B. R. Experimentally determined oscillator strengths and linewidths for the Schumann—Runge band system of molecular oxygen. III. The (7—0) to (19—0) bands. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 26, № 6, 469—481 (англ.)

М.А.

С разрешением 0,006 нм измерены спектры поглощения молек. кислорода в области системы полос Шумана—Рунге ($B^3\Sigma_u^- - X_3\Sigma_g^-$, 175—200 нм) в интервале давл. 1—300 Тор и при т-рах от комнатной (полосы 11-0—15-0) до —90 К (полосы 15-0—19-0). Измерены и проанализированы полосы 7-0—14-0. С. Б. Осин

X. 1982, 19, N9.

O₂

Ommuck 12760 1981

/ 95: 228588v Experimentally determined oscillator strengths and linewidths for the Schumann-Runge band system of molecular oxygen. III. The (7-0) to (19-0) bands. Gies, H. P. F.; Gibson, S. T.; McCoy, D. G.; Blake, A. J.; Lewis, B. R. (Dep. Phys., Univ. Adelaide, Adelaide, 5001 Australia). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1981, 26(6), 469-81 (Eng). Exptl. oscillator strengths and predissocn. linewidths were derived from equiv. width measurements at room temp. for the (11-0) to 15-0) Schumann-Runge bands of mol. O, and at low temp. for the (15-0) to (19-0) bands, using the Adelaide 6 m vacuum UV monochromator operated at a resoln. of 0.006 nm. Photometric methods were used to measure the UV absorption for 40 groups of rotational strengths and pre-dissocn. linewidths. The variation of the oscillator strengths with N'' within each band was found to agree well with theor. predictions of A. C. Allison (1975), while the mean band oscillator strengths derived from the results are in good agreement with previous measurements. The results demonstrate the need for accurate data about multiplet line splittings. A revised anal. of previous data for the (7-0) to (14-0) bands is also presented.

fmm;

C. A. 1981, 95, N 26.

D₂

[Ommuck 13408]

1981

KB. Mex.
paper

Gollisch H.,

J. Phys. B: Atom and
Mol. Phys., 1981, 14, N23,

● 4457 - 4467.

O₂

ommu 12271 1981

мор.
сиргужа
(одзоп)
Di

Gorman A. A.

Chem. Soc. Rev., 1981,
10 (2), 205-231.

●
Singlet Molecular Oxygen.

O₂

1981

Hamaguchi Hiro-o, Suzuki
I., et al.,

Кв. экз.
расчет

Mol. Phys., 1981, 43,
N 4, 963- 973.

(see. H₂; III)

O₂

Commuck 12183 1981.

(O₂)

Hasanein A. A., et al.

kb. sec.
factor,
numbers.
Kubice

Advanc. Mol. Relax.
and Interact. Processes
1981, 20, 215-231.

O₂

1981

Horjou N., et al.

Chem. Phys. 1981,
57 (3), 475 - 485.

(I; кв. мех.
расчета).



(Сел. N₂; III).

1981

O₂E³ Σ

6 Д71. Обобщение приближения Ньютона—Рафсона и независимого от вырождения приближения Ньютона—Рафсона в теории многоконфигурационного метода Хартри—Фока. Generalizations of Newton—Raphson and multiplicity independent Newton—Raphson approaches in multiconfigurational Hartree—Fock theory. Jørgensen Poul, Olsen Jeppe, Yeager Danny L. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 12, 5802—5815 (англ.)

Проведен анализ сходимости итерационных процедур Ньютона — Рафсона и Чебышева, применяемых для решения ур-ний многоконфигурац. метода Хартри—Фока. Показано, что простая процедура Ньютона—Рафсона обладает плохой сходимостью в случае малых собственных значений матрицы гессиана и расходится при нулевых собств. значениях гессиана. В этой связи рассмотрены различные пути обобщения схемы Ньютона—Рафсона и предложена методика, позволяющая избе-

Ф. 1982, 18, № 6.

гатель плохой сходимости, вызванной малыми собственными значениями гессиана. Проведенный тестовый расчет состояния $E^3 \Sigma$ молекулы O_2 демонстрирует эффективность развитой методики. В работе выведены также общие выражения для построения итерационных схем решения уравнений ССП, обладающих кубической, кватертичной и т. д. скоростями сходимости и проанализированы условия стабильности решений многоконфигурационного метода ССП. А. И. Дементьев



O₂

ОТТИСК 11977 1981

2 Д648. Полосы поглощения I , I' и I'' молекулы O_2 в области 790—865 Å. The I , I' , and I'' absorption bands of O_2 in the region 790—865 Å. Katayama D. H., Tanaka Y. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 88, № 1, 41—50 (англ.)

Спектр поглощения молекул $^{16}O_2$ и $^{18}O_2$ сфотографирован в области 790—865 Å с линейной дисперсией 0,619 Å/мм. Расположенные в этой области диффузные полосы приписаны трем колебательным прогрессиям I , I' и I'' , отвечающим переходам с уровня $v''=0$ основного состояния. На основании анализа изотопных сдвигов выполнена нумерация колебательных полос и определены колебательные постоянные верхнего электронного состояния. Величина квантового дефекта и колебательные постоянные этого состояния близки к соответствующим величинам состояния $a^4\Pi_u$ иона O_2^+ , что указывает на ридберговский характер этого состояния. Дополнительным подтверждением того, что верхнее состояние имеет симметрию $^3\Pi_u$ служит измеренное значение величины спин-орбитального расщепления и особенности вращательной структуры полос. Библ. 26.

В. А. Е.

М.Л.

ф. 1982, 18, №2.

O₂

Оттиск 11977

1981

4 Б208. Полосы поглощения I , I' и I'' O₂ в области 790—865 А. Katayama D. H., Tanaka Y. The I , I' , and I'' absorption bands of O₂ in the region 790—865 А. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 88, № 1, 41—50 (англ.)

Сфотографированы спектры поглощения $^{16}\text{O}_2$ и $^{18}\text{O}_2$ в области 790—865 А. Наблюдаемые полосы отнесены к переходам I ($^3\pi_u$) ($v'=0-6$)— $X^3\Sigma_g(r''=0)$, I' ($^3\pi_u$) ($v''=0-9$)— $X^3\Sigma_g(v''=0)$ и I'' ($^3\pi_u$) ($v'=0-7$)— $X^3\Sigma_g(v''=0)$. Для первой и третьей систем полос разрешены компоненты спинového расщепления. Определены абс. нумерация полос по v' из анализа изотопных сдвигов и тип верхнего электронного состояния из спин-орбитального расщепления и анализа вращательной структуры нек-рых полос в спектре. Значения v_e и колебательных постоянных ω_e и $\omega_e x_e$ ($^{16}\text{O}_2$, в см⁻¹): состояние $I(^3\pi_u)$ — 116 463; 1049, 14,5; состояние $I'(^3\pi_u)$ — 117 836; 1046,2; 11,0; состояние $I''(^3\pi_u)$ — 118 134;

м.п;

X. 1982, 19, 24

1035; 10,8. Приведены также данные для $^{18}\text{C}_2$. Колебательные постоянные всех трех состояний близки к соотв-щим значениям для $\text{O}_2^+(a^4\pi_{u,i})$. Это, а также величина квантового дефекта указывают на ридбергов характер состояний I , I' и I'' . Обсуждена диаграмма энергетич. уровней высоколежащих возбужденных электронных состояний молек. кислорода. В. М. Ковба

$^{16}\text{O}_2$, $^{18}\text{O}_2$

Ommuck 11977

1981

(чекмы
получены)

105774v The I, I', and I'' absorption bands of diatomic oxygen in the region 790-865 Å. Katayama, D. H.; Tanaka, Y. Air Force Geophys. Lab., LKO, Hanscom Air Force Base, MA 01931 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 88(1), 41-50 (Eng). The absorption spectra of $^{16}\text{O}_2$ and $^{18}\text{O}_2$ in the wavelength region 790-865 Å were photographed with a 6.65-m vacuum spectrograph. The bands are diffuse, and most of them are classified as members of 3 vibrational progressions, I, I', and I'', which originate from the $v = 0$ level of the ground state. Abs. vibrational quantum no. assignments were made for each of the progressions based on isotope shift anal. The vibrational consts. of their upper electronic states are reported for $^{16}\text{O}_2$ and $^{18}\text{O}_2$. The similarity in vibrational consts. between these electronic states and those for the $a^4\Pi_{ui}$ state of O_2^+ , as well as quantum defects suggest that they are Rydberg states. In addn., the magnitude of their spin-orbit splitting and the rotational structure for some of these bands indicate that the upper electronic state for each of these 3 progressions has $^3\Pi_u$ symmetry.

C.A. 1981, 95, N12.

O₂

1981

4 Б1692. Некоторые физические и химические характеристики состояний $A^3\Sigma_u^+$, $A'^3\Delta_u$ и $^1\Sigma_u^-$ молекулярного кислорода. - Кеннер R. D., Огрызлов Е. А., Some physical and chemical properties of the $A^3\Sigma_u^+$, $A'^3\Delta_u$ and $^1\Sigma_u^-$ states of molecular oxygen. «J. Photochem.», 1981, 17, № 1—2, 112 (англ.)

Развита методика получения больших количеств молекул O₂ в электронновозбужденных состояниях $A^3\Sigma_u^+$, $A'^3\Delta_g$ и $^1\Sigma_u^-$. Определены константы скорости тушения нижних колебательных уровней и изучены реакции с высших колебательных уровней этих состояний.

А. Дарманиян

спектр

Х. 1982, 19, № 4.

O_2 (24)

1981

/98: 134525g Stimulated absorption during $^3\Sigma_g^- \rightarrow ^1\Delta_g$ and $^1\Sigma_g^+$ transitions in liquid oxygen. Klinkov, V. K.; Mukhtarov, Ch. K.; Nadtochii, Yu. G.; Palitsyna, I. A. (Inst. Obshch. Neorg. Khim., Moscow, USSR). *Deposited Doc.* 1981, VINITI 1151-82, 12 pp. (Russ). Avail. VINITI. A concn. dependence of O_2 integral near-IR absorption coeffs. at 0.764, 1.06, and 1.26 μ m, corresponding to the transitions $^3\Sigma_g^- \rightarrow \Delta_g$ and $^3\Sigma_g^- \rightarrow ^1\Sigma_g^+$, were obtained for liq. O_2 and its solns. in N_2 at 78 K. The exptl. obsd. absorption characterized by band halfwidths narrower than those reported earlier (Dianov-Klekov, V. I., 196.), was sep'd. into intrinsic and collision-stimulated contributions using a simple bimol. model for describing the colliding system. The corresponding values of oscillator strengths were also det'd.

check

C. A. 1983, 98, N16.

(O₂) и

Спектр

1982

14 Б160. Индуцированное поглощение при переходах $^3\Sigma_g^- \rightarrow ^1\Delta_g$ и $^3\Sigma_g^- \rightarrow ^1\Sigma_g^+$ в жидком кислороде. Клинков В. К., Мухтаров Ч. К., Надточий Ю. Г., Палицына И. А.; Ин-т общ. и неорганич. химии АН СССР. М., 1981 г. 17 с. Библиогр. 17 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 15 марта 1982 г., № 1151—82 Деп.)

В жидком кислороде и его р-рах с азотом при 78° К исследованы полосы поглощения 0,764; 1,06 и 1,26 мкм. Найдена концентрац. зависимость интегральных интенсивностей и половинных ширин полос поглощения для жидких смесей O₂ и N₂. В рамках бимолек. модели для индуцированного момента перехода проведено разделение наблюдаемого поглощения на индуцированную и неиндуцированную части. Определены соотв. силы осцилляторов.

Автореферат

Х. 1982, 19, N 14.

O₂

1981

12 Д553. Расчет спектра поглощения кислорода в миллиметровом диапазоне с использованием малой ЭВМ. Calculation of millimeter wave oxygen absorption spectra on a small microcomputer. Kozakoff D. J., Britt P. P. «6 Int. Conf. Infrared and Millimeter Waves, Miami Beach, Fla, Dec. 7—12, 1981. Conf. Dig.» New York, N. Y., 1981, T.4.9/1—T.4.9/2 (англ.)

Спектр

На малой ЭВМ выполнен расчет кривой поглощения для линий магнитно-дипольных переходов молекулы кислорода вблизи 60 и 120 ГГц. При этом форма линии выбрана в виде ф-ции Ван-Флека и Вайскопфа и использованы литературные данные для молекулярных постоянных. М. Р. Алиев

9. 1982, 18, N 12

O₂

1981

излучение
при фотодис-
социации
HO₂

12 Д592. Излучение O₂($b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$) при фотодиссоциации HO₂ под действием излучения KrF-лазера. O₂($b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$) emission following HO₂ photodissociation by KrF laser photons. Lee L. C., Helm H.,

Chang J. S. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 3, 537—540 (англ.)

Молекулы HO₂, образующиеся в трехчастичной реакции $H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$, возбуждали излучением KrF-лазера ($\lambda = 248$ нм), при этом зарегистрировано излучение в области 7620 Å, приписанное переходу O₂($b^1\Sigma_g^+ \rightarrow X^3\Sigma_g^-$). Механизм возбуждения этого излучения связан с фотодиссоциацией HO₂ с образованием O(¹D) и последующим возбуждением O₂ в реакции O(¹D) + O₂. Библ. 14.

В. С. Иванов

ср. 1981, 18, N 12.

O₂

(X³Σ_g⁻)

М.Л., Д.

Оттиск 13085

1981

13 Б43. Метод расчета молекулярных корреляционных энергий. Приложение к определению энергий диссоциации двухатомных и многоатомных молекул. Lievin Jacques, Breulet Jacques, Verhaegen Georges. A method for molecular correlation energy calculations. Application to the determination of dissociation energies of diatomic and polyatomic molecules. «Theor. chim. acta», 1981, 60, № 4, 339—353 (англ.)

Расчет корреляц. энергии молек. систем предложено производить комбинацией методов конфигурац. взаимодействия и атомов в молекуле. Для ряда молекул элементов 1- и 2-го периодов сопоставлены различные оценки корреляц. поправок к энергии диссоциации. Схема расчета описана для молекулы O₂(X³Σ_g⁻).

В. И. Пупышев

Х. 1982, 19, N13.

1981

O₂

8 Д113. Новая реализация приближения графической унитарной группы для расчетов прямым методом конфигурационного взаимодействия с многоконфигурационной ссылочной функцией. New implementation of the graphical unitary group approach for multireference direct configuration interaction calculations. Lischka Hans, Shepard Ron, Brown Franklin B., Shavitt Isaiah. «Int. J. Quantum. Chem.», 1981, Quantum. Chem. Symp. № 15, 91—100 (англ.)

В рамках формализма унитарной группы предложен алгоритм и составлена программа для расчета молекул прямым методом конфигурационного взаимодействия (КВ) с включением двукратно возбужденных конфигураций по отношению к многоконфигурационной ф-ции ссылочного состояния. Проведены тестовые расчеты полной энергии электронного состояния ${}^3\Sigma_g^-$ молекулы O₂, в которых ссылочная ф-ция являлась линейной комбинацией 14 конфигураций, а пространство КВ включало 43552 конфигурации. Время выполнения отдельных этапов расчета сравнено с временем, затраченным на те же этапы при использовании метода КВ с одноконфигурац. ссылочной функцией.

А. И. Дементьев

программа
для
расчета

ф. 1982, 18, №8.

O₂

1983

23 Б198 Деп. Влияние межмолекулярного взаимодействия на запрещённые переходы в молекуле кислорода. Минаев Б. Ф.; Караганд. ун-т. Караганда, 1983. 26 с., ил. Библиогр. 25 назв. (Рукопись деп. в ОНИИТЭХИМ, г. Черкассы 14 июля 1983 г. № 727хп—Д83.)

Приведены результаты расчётов интенсивностей и тонкой структуры атмосферных полос, а также полос Герцберга и Чемберлена в спектре молекулы кислорода. Дано объяснение влияния р-рителя на излучательные и безызлучательные синглет-триплетные переходы в молекуле O₂ на основе расчета контактных комплексов O₂ с молекулами H₂, N₂, H₂O, NH₃, C₂H₄, ClCH₃. Все расчеты выполнены по методу МЧПДП/3 КВ с учетом одно- и двукратновозбужденных конфигураций, а также с учетом спин-орбитального возмущения. Показано, что в комплексах с O₂ на атомах диамагнитной молекулы индуцируется заметная спиновая плотность, к-рая долж-

спектр

Х. 1983, 19, № 23

на приводить к парамагнитным химсдвигам в спектрах ЯМР под действием р-ренного кислорода. Рассчитаны р-ции O_2 с H_2 и C_2H_4 в различных спиновых состояниях и рассмотрены способы снятия запрета по спину в этих реакциях. Автореферат

O₂

оттиск 12303 | 1981

Pamidimukala K. M.
etal.

приобр.
Стихмф.
мскм

J. Chem. Phys., 1981,
75 (3), 1116-1122.

O₂

[ommuch 11273] 1981.

Ramakrishna T.V., et al.

(Do)

J. Quant. Spectrosc. and
Radiat. Transfer, 1981,
25, 295-98 ●

O₂

DM. 17556

1981

✓ 3 Д385. Наблюдение электрических квадрупольных переходов в фундаментальной полосе O₂ в области 1600 см⁻¹. Observation of electric quadrupole transitions in the fundamental band of O₂ in the 1600-cm⁻¹ region. Reid John, Sinclair R. L., Robinson A. M., McKellar A. R. W. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1981, 24, № 4, 1944—1949 (англ.)

спектр

С использованием перестраиваемого полупроводн. лазера и многоходовой оптич. кюветы зарегистрированы квадрупольные переходы S(5) и S(7) в полосе 1—0 спектра поглощения газообразных молекул ¹⁶O₂. Давление газа варьировалось в пределах 10—80 мм рт. ст. Установлено, что обнаруженные полосы имеют триплетную структуру вследствие спинового расщепления вращательных уровней O₂. Величина расщепления (0,02—0,04 см⁻¹) хорошо согласуется с данными, полученными методом микроволн. спектроскопии. Интегр. интенсив-

ф. 1982, 18, N5.

17556

ность квадрупольной полосы O_2 (1—0) составляет $(1,77 \pm 0,63) \cdot 10^{-5}$ см⁻¹/м.амага. Оценена верхняя граница значения интегр. интенсивности полосы магнитно-дипольного перехода в системе O_2 (1—0): $0,86 \cdot 10^{-5}$ см⁻¹/м.амага. Отмечено, что данная работа является второй успешной попыткой наблюдения квадрупольных колебательных переходов в молекуле (после H_2). Библ. 24. М. Т.

02

1981

7 Л166. Спектроскопические исследования высокой чувствительности с использованием диодного лазера с перестраиваемой частотой. Определение квадрупольных переходов молекулы O_2 и изотопа ^{14}C . High sensitivity spectroscopy with tunable diode lasers. Detection of O_2 quadrupole transitions and ^{14}C . Reid J. «Laser Spectrosc. 5. Proc. 5 Int. Conf., Jasper, 29 June—3 July, 1981». Berlin e. a., 1981, 7—75 (англ.)

С помощью спектрометра, снабженного диодным лазером с перестраиваемой длиной волны излучения, и многоходовой газовой кюветы исследованы ИК-спектры газов O_2 и CO_2 в области слабого поглощения. При сканировании в интервале $1603,5—1604,1 \text{ см}^{-1}$ в спектре кислорода зарегистрированы 3 линии, идентифицированные как спиновый триплет перехода $S(7)$ полосы квадрупольного поглощения $1 \leftarrow 0 \text{ } O_2$. Величина расщепления линий хорошо согласуется с имеющимися данными о

м.п., V_i ,

ср. 1984, 18, м.г.

спектрах комб. рас. и микроволн. поглощения O_2 . При исследовании спектра CO_2 предпринята попытка зарегистрировать линию $P(20)$ полосы ν_3 изотопа $^{14}CO_2$, выбранную как наиболее удобную для наблюдений на основе модельных расчетов. Непосредственные измерения показывают, что указанная линия сильно перекрывается с линией горячего перехода основного изотопа. Отмечено, что для обнаружения линий изотопа $^{14}CO_2$ необходимо использовать низкотемпературные измерения.

Н. Ф.



1981

 O_2 O_2^+

19 Б152. Фотоионизация молекулярного кислорода в $X^3\Sigma_g^-$ - и $a^1\Delta_g$ -состояниях. Roche Anne-Lise, Kirby K., Guberman S. L., Dalgarno A. Photoionization of molecular oxygen in the $X^3\Sigma_g^-$ and $a^1\Delta_g$ states. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1981, 22, № 3—4, 223—235 (англ.)

В области энергий возбуждения от 10 до 60 эВ рассчитаны сечения процессов фотоионизации молек. кис-

Спектр; сечение
фотоионизации

лорода из основного $X^3\Sigma_g^-$ (I) и метастабильного $a^1\Delta_g$ (II) состояний до конечного состояния $X^2\Pi_g$ иона O_2^+ . Волновые ф-ции начальных и конечного состояний рассчитывались в приближении Борна—Оппенгеймера методом конфигурац. взаимодействия. Волновая ф-ция выбитого электрона аппроксимировалась с помощью кулоновских волновых ф-ций, центрированных на середине связи O—O, к-рые затем ортогонализовались ко всем связанным состояниям. Рассчитанные сечения фотоионизации состояния I удовлетворительно согласуются с эксперим. данными, кроме области вблизи порога, в к-рой существенную роль играют автоиониза-

(41) ☒

Ж 1981 N19

ционные процессы. Отношения сечений для процессов
 фотоионизации из состояний I и II меняется от 0,8 на
 пороге до ~ 1 при энергии фотоэлектронов свыше 2 эВ.
 На основе экспериментальных данных для процессов
 фотоионизации $X^3\Sigma_g^-$ -состояния O_2 в различные воз-
 бужденные состояния O_2^+ , лит. теор. данных и полу-
 колич. оценок проведены оценки сечений процессов
 фотоионизации из состояния II в конечные возбужден-
 ные состояния иона O_2^+ : $A^2\Pi_u$, $2^2\Pi_u$, $3^2\Pi_u$, $2^2\Phi_u$, $2^1\Delta_g$ и
 $2^1\Delta_u$. С помощью всех полученных данных построена
 зависимость полного сечения фотоионизации молекуляр-
 ного кислорода в состоянии II от энергии возбуждения.

О. А. Басченко

O₂

4 Д487. Исследование лазерного магнитного резонанса на вращательных переходах кислорода в метастабильном состоянии $a^1\Delta_g$. Laser magnetic resonance measurement of rotational transitions in the metastable $a^1\Delta_g$ -state of oxygen. Scalabrin Artemio, Saykally Richard J., Evenson Kenneth M., Radford H. E., Mizushima Masataka. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 89, № 2, 344—351 (англ.)

С помощью генерирующего в длинноволн. ИК-области лазера с оптич. накачкой CO₂-лазером получены спектры лазерного магн. резонанса кислорода, возбужденного в СВЧ-разряде в состояние $a^1\Delta_g$. Активной средой лазера служили метанол, фтористый метилен, дифторэтилен и хлорэтилен. Поглощающая ячейка помещалась внутри резонатора. Точность измерения магн. поля составляла $5 \cdot 10^{-5}$ Тл. Измерения проведены при давлении кислорода < 1 мм рт. ст. Приведены значения резонансных полей и отнесение резонансов к

М.П.

Ф. 1982, 18, № 4.

1981 12409 1861
Отмеч

вращательным переходам с уровнями $J=3, 4, 6, 7, 8$ и правилами отбора $\Delta M=0\pm 1$. Определены вращательные частоты магн. переходов для нулевого поля с точностью 10^{-6} . Рассчитаны вращательная постоянная молекулы O_2 и константы центробежного растяжения и Λ -удвоения. Библ. 16. М. В. Т.

O₂

Оттиск 12409

1981

7 Б285. Измерение методом лазерного магнитного резонанса вращательных переходов в метастабильном состоянии $a^1\Delta_g$ кислорода. Scalabrin A., Saykalily R. J., Evenson K. M., Radford H. E., Mizushima M. Laser magnetic resonance measurement of rotational transitions in the metastable $a^1\Delta_g$ state of oxygen. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 89, № 2, 344—351 (англ.)

М.П.;

Метод лазерного магнитного резонанса применен для измерения вращательных переходов молекулы кислорода $^{16}\text{O}^{16}\text{O}$ в метастабильном состоянии $a^1\Delta_g$, $v=0$. Использованы шесть линий лазера для длинноволновой ИК-области, накачиваемого CO_2 -лазером. Вращательные переходы регистрировали путем сканирования магнитного поля до совпадения перехода с лазерной линией. С известными g -факторами получены значения частот пяти вращательных переходов ($J+1 \leftarrow J$) в нулевом поле (в ГГц): 340,0085(6) ($4 \leftarrow 3$), 424,9810(9) ($5 \leftarrow 4$), 424,9810(9) ($7 \leftarrow 6$), 594,870(1) ($8 \leftarrow 7$); 764,658(1) ($9 \leftarrow 8$). Подгонкой методом наименьших квадратов этих измеренных частот по формуле для

Х. 1982, 19, № 7.

вращательной энергии $(E/h) = B_0[J(J+1) - 4] - D_0[J(J+1) - 4]^2 + (-1)^J (1/2) q J(J+1)[J(J+1) - 2]$ определены
 спектроскопич. постоянные $B_0 = 42,50457(10)$ ГГц, $D_0 =$
 $= 153,14(110)$ кГц, $q = 0,050(90)$ кГц. В. М. Михайлов

$^{16}\text{O}_2$

Оммух 12409

1981

спектр
лазерн.
магнит.
резонанса

/ 95: 159273z Laser magnetic resonance measurement of rotational transitions in the metastable $a^1\Delta_g$ state of oxygen. Scalabrin, Artemio; Saykally, Richard J.; Evenson, Kenneth M.; Radford, H. E.; Mizushima, Masataka (Time and Frequency Div., Natl. Bur. Stand., Boulder, CO 80303 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 89(2), 344-51 (Eng). Laser magnetic resonance for 5 rotational transitions, $J = 4 \rightarrow 3, 5 \rightarrow 4, 7 \rightarrow 6, 8 \rightarrow 7, 9 \rightarrow 8$, of $^{16}\text{O}^{16}\text{O}$ in its metastable state, $a^1\Delta_g, v = 0$, were obsd. by using 6 far-IR laser lines. Taking the known values of the g -factors, their zero-field frequencies are 340.0085(6), 424.9810(9), 594.870(1), 679.780(1), and 764.658(1) GHz, resp. They are fit by $(E/h) = B_0[J(J+1) - 4] + D_0[J(J+1) - 4]^2 + (-1)^J (1/2)qJ(J+1)[J(J+1) - 2]$, where $B_0 = 42.50457(10)$ GHz, $D_0 = 153.14(110)$ kHz, and $q = 0.050(90)$ kHz.



C, A. 1981, 95, N18.

B_0, D_0, q

O₂

1981

current
C. A. 1981

/ 94: 217342p O₂(c¹Σ_u⁻ → X³Σ_g⁻) Emission in the terrestrial nightglow. Slanger, T. G.; Buestis, D. L. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *JGR, J. Geophys. Res.*, [Sect.] A 1981, 86(A5), 3551-4 (Eng). Synthetic spectra were calcd. incorporating 3 O₂ emission systems, A³Σ_u⁺ → X³Σ_g⁻, A³Δ_u → a¹Δ_g, and c¹Σ_u⁻ → X³Σ_g⁻, and matched to the 3100- to 4500-Å nightglow spectrum. The synthesis necessitated the inclusion of the c¹Σ_u⁻ → X³Σ_g⁻ system, which has never been previously identified in the airglow, although it is a dominant system in the Venusian nightglow. The emissions from the extremely metastable A³Δ_u and c¹Σ_u⁻ states account for half the radiation in the 3100- to 4500-Å region, from which it may be deduced that the mesospheric concns. of O₂(A³Δ_u) and O₂(c¹Σ_u⁻) are much higher than that of O₂(A³Σ_u⁺). The vibrational distributions are quite unrelaxed for all 3 states.

C. A. 1981, 94 N 26

O₂

Лотт. 12626

1981

12 Д472. Поглощение и дисперсия в микроволновом спектре O₂ при атмосферном давлении. Absorption and dispersion in the O₂ microwave spectrum at atmospheric pressures. Smith Earl W. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6658—6673 (англ.)

поглощен.
и дисперсия
(расчёт)

С использованием метода возмущений для учета вклада недиагональных элементов матрицы рассеяния в ударной теории уширения линий выполнен расчет поглощения и дисперсии кислорода в диапазоне 40—140 ГГц при давлении 10—800 мм. Показано; что метод возмущений применим для расчета поглощения при давлениях вплоть до 5 атм, т. е. в рамках примени-

МН

Ф. 1981, 18, N 12.

мости модели парных соударений. В то же время перенос возбуждения при неупругих соударениях (т. е. интерференция линий) не является основным механизмом поглощения даже при высоких давлениях, когда линии сливаются и образуют сплошную полосу. Однако дисперсия весьма чувствительна к эффекту интерференции линий, причем вблизи центра линии при низких давлениях этот эффект характеризуется одним параметром, определяемым разностью коэф. связи соседних линий. Рассмотрена схема эксперимента для измерения параметров интерференции линий. М. Р. Алиев

O₂

Отт. 12626

1981

24 Б281. Поглощение и дисперсия в микроволновом спектре O₂ при атмосферных давлениях. Smith E. W. Absorption and dispersion in the O₂ microwave spectrum at atmospheric pressures. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6658—6673 (англ.)

Модернизированным методом Розенкранца (Rosenkranz P. W. «IEEE Trans Antennas Propag.», 1975, 23, 498), выполнен расчет поглощения и дисперсии в области 50—70 ГГц МВ-спектра O₂ при давл. от нескольких мм до 1 атм. Рассмотрен переход при увеличении давл. O₂ от случая изолированных спектральных линий к случаю непрерывной полосы поглощения с учетом вклада упругих и неупругих соударений. При рассмотрении физ. процессов уширения использованы коэф. взаимодействия линий, связанные с переносом возбуждения от одного радиац. состояния к другому. В то время как поглощение практически не чувствительно к значению коэф. взаимодействия линий, дисперсия об-

ел-л.

Х. 1981, 19, № 24.

наруживает высокую чувствительность к этим коэф. вплоть до изменения знака дисперсии. Благодаря высокой чувствительности к значениям коэф. дисперсионные измерения могут быть использованы для определения амплитуд неупругих переходов между состояниями. Полученные результаты сопоставлены с известными эксперим. данными.

С. Н. Мурзин

O₂

Отмиск 11734

1981

1 Б191. Исследования валентных состояний $^3\Pi_g(V)$ и ридберговского состояния $^3\Pi_g(R)$ в континууме Шумана—Рунге по спектрам испускания и рассеяния электронов. Spence David. Studies of the O₂ $^3\Pi_g(V)$ valence states and $^3\Pi_g(R)$ Rydberg state in the Schumann—Runge continuum from ejected and scattered electron spectra. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 7, 3898—3904 (англ.)

спектры

Изучены спектры энергетич. потерь электронов O₂ в области энергетич. потерь 7—10 эВ. В области континуума Шумана—Рунге наблюдается дискретная структура, связанная как с рассеянными электронами вследствие возбуждения ридберговских состояний и диссоциирующих состояний O₂, так и с испускаемыми электронами, возникающими при распаде резонансных состояний Фешбаха иона O₂⁻ с образованием валентных электронных состояний: $e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow (O_2^{*-}) - O_2^3\Pi_g(V) + e_{\text{исп.}}$. Измерены энергии рассеянных электронов и рассчитаны эффективные функции возбуждения нек-рых ко-

Х. 1982, 19 АБ, № 1.

лебат. уровней ридберговского состояния ${}^3P_g(R)$. Измерены также энергии испускаемых электронов и с использованием известных значений энергий O_2^* рассчитан интервал потенц. функции состояния ${}^3P_g(v)$ (от 7,60 до 7,80 эВ), перекрывающий область Франка—Кондона основного состояния O_2 . Отмечено, что этот результат плохо согласуется с теор. расчетами и имеющимися эксперим. данными и указывает, что смешивание валентных и ридберговских состояний 3P_g может быть больше, чем это предсказывается теорией. С. Б. Осин

O₂

ommuca 11734

1981

94:183043z Studies of the diatomic oxygen $^3\Pi_g(V)$ valence states and $^3\Pi_g(R)$ Rydberg state in the Schumann-Runge continuum from ejected and scattered electron spectra. Spence, David (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(7), 3898-904 (Eng). Electron-impact energy-loss spectra are obtained in O₂ in the energy-loss range of 7 to 10 eV. These spectra contain some discrete features

Chen inf

resulting from scattered electron following excitation of Rydberg states, and other features from ejected electrons following decay of O₂⁺ Feshbach resonances into valence electronic states in the continuum via the reaction $e + O_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow (O_2^+) \rightarrow O_2(^3\Pi_g(V)) + e_{ejected}$. From the known O₂⁺ energies and from measurements of the ejected electron energies, the $^3\Pi_g(V)$ state extends over an energy range of only ~ 0.20 eV in the Franck-Condon region of the ground state, contrary to some previous exptl. and theor. results. From measurements of scattered electrons, effective excitation functions of several vibrational levels of the $^3\Pi_g(R)$ Rydberg state are obtained. Of the many O₂⁺ Feshbach resonances known to exist in this energy regions, only one decays strongly into the $^3\Pi_g(R)$ state.

C.A. 1981, 94, N22

O₂

[ommuck 11823]

1981

Staemmler V., et al.

кв. мех.
фрагмент

Theor. chim. acta,

$\Delta E(st)$

1981, 59, 501-515.

O₂

[номер 12533] 1981

Танака Т.

образован.
при диссоц.

Т. Photochem., 1981,
17, 487-94.

NO₂

пенант.

Кривая O₂
спектр пенантанта

O₂

1981

Uwata Syunro.

J. Spectroscop. Soc. Jap.,
1981, 30, N2, 77-92.

метод
реверсия
молекулы

●
(сер. H₂ ; III)

O₂

[Dmmuck 12917]

1981

Valentini F. F., et al.,

Chemmp

Chem. Phys. Lett. 1981,
83 (2), 217-221.



O₂

Отмиск 13725

1981

8 Д271. Расчет энергий электронных возбуждений, сил осцилляторов и поляризуемостей методом МК ПСФ (МК ВХФ). Применение к O₂. The evaluation of MCRPA(MCTDHF) electronic excitation energies, oscillator strengths, and polarizabilities: application to O₂. Yeager Danny L., Olsen Jeppe, Jorgensen Poul. «Int. J. Quantum. Chem.», 1981, Quantum. Chem. Symp. № 15, 151—162 (англ.)

Li

Описан вывод ур-ний многоконфигурац. приближения случайных фаз (МК ПСФ), основанный на приравнивании выражений для сил осцилляторов электронных переходов (СОП) через матричные элементы импульса и дипольного момента. Полученные ур-ния совпадают с ур-ниями многоконфигурационного временного метода Хартри — Фока (МК ВХФ). Представлено доказательство справедливости правила энергетически взвешенных сумм в рамках МК ПСФ. Метод применен к расчету

ф. 1982, 18, N 8.

энергий электронных возбуждений, СОП и поляризуемостей молекулы O_2 . В расчёте использован базис из 50 орбиталей слэтеровского типа. Проведено сравнение результатов с эксперим. данными. Показано, что дополнительное включение ограниченного взаимодействия конфигураций может улучшить расчетные значения энергий возбуждений; СОП при этом меняются незначительно.

А. В. Зайцевский



O₂

Ommuck 13725 1981

fnm

meopem.
pacem

C.A. 1982,

96, N 14.

96: 112433g The evaluation of MCRPA(MCTDHF) electronic excitation energies, oscillator strengths, and polarizabilities: application to molecular oxygen. Yeager, Danny L.; Olsen, Jeppe; Joergensen, Poul (Chem. Dep., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1981, 15, 151-62 (Eng). The multiconfigurational RPA (MCRPA) was derived by requiring the equivalence between the length and velocity forms of the oscillator strength. The MCRPA is also justified in terms of the equations of motion formalism. The final equations and techniques developed are the same as the multiconfigurational time dependent Hartree-Fock (MCTDHF). The validity was explicitly demonstrated of the energy-weighted sum rule for the MCRPA-MCTDHF. A modification of the previously derived MCTDHF technique is introduced. This involves the incorporation of addnl. CI-states from different symmetry blocks than the symmetry block of the MCSCF ref. state into the MCRPA equations. For a 50 STO calcn. on O₂ mol., the results for the low-lying vertical excitation energies are in excellent agreement with expt. and with large-scale CI. Oscillator strengths, frequency dependent polarizabilities, and the energy weighted sum rule are also reported.

O₂

1982

Baerends E. J., Post D.

пачеііі Quantum Theory Chem.
с. н., React. Vol. 3. Dordrecht.
Do e. a., 1982, 15-33.

(с. Ce₂; III)

O₂

Ommuck 14999

1982

kv. mex.
pocrem,
De, We, Ze,
M

Becke A.D.,
J. Chem. Phys., 1982,
76, N 12, 6037-6045.

O₂

1982

3 Б274. Температурная зависимость ширины вращательных линий комбинационного рассеяния кислорода. Temperature dependence of rotational raman linewidths of oxygen. Bérard M., Cèbe J. P., Giraud M., Lallemand P. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8th Int. Conf., Bordeaux, 6—11 Sept., 1982». Chichester e. a., 1982, 289—290 (англ.)

спектр

Исследована температурная ($T=100\div 400$ K) зависимость полуширин вращательных линий O₂ (I) при плотностях $n=5\text{—}40$ амага. Кювету с I помещали внутри резонатора Ag-лазера, разрешение на спектрах $\sim 0,2$ см⁻¹. Оценены значения полуширин, коэф. уширения и сечений КР для различных вращательных линий ($J=1\text{—}27$). Показано, что помимо линий лоренцевской формы на спектрах присутствует фон пропорциональный n^2 . Как показало сравнение со спектром КР Ag фон индуцируется столкновениями. В рамках полуклассич. приближения Смита — Жирода — Купера («J. Chem. Phys.», 1976, 65, 1256) теоретически оценены сечения КР для

X. 1983, 19, № 3.

различных переходов. Рассматривали классич. траектории молекул I и возмущение матрицы рассеяния анизотропным потенциалом. Получено хорошее согласие с эксперим. данными. Уширение линий вызывается в основном вкладом отталкивания в анизотропный потенциал. Метод расчета сечений позволяет проследивать за зависимостью сечений от скорости молекул.

А. В. Бобров

O₂

1982

Boeyens Jan C. A.

No, ser. n. J. Crystallogr. and
Spectrosc. Res., 1982,
12, N3, 245-254.

●
(cr. C₂H₄ ; III).

O₂

Оттиск 14840

1982

3 Б1369. Интенсивности горячих полос в эмиссионных спектрах димолей синглетного молекулярного кислорода ($^1\Delta_g$). Intensities of hot bands in the dimol emissions of singlet molecular oxygen, $O_2(^1\Delta_g)$. Bodaghians Razmik, Borrell Patricia M., Borrell Peter, Grant Kevin R. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 8, 1195—1209 (англ.)

спектр

На комбинированной разрядно-струевой установке с ударной трубой исследованы т-рные зависимости в области 295—1500 К интенсивностей трех полос испускания димолей 1O_2 при 634, 703 и 579 нм, обусловленных процессами: $O_2(^1\Delta_g, v_1) + O_2(^1\Delta_g, v_2) \rightarrow O_2(^3\Sigma_g^-, v_1') + O_2(^3\Sigma_g^-, v_2' + hv)$, где $v_1 = v_2 = v_1' = v_2' = 0$, $v_1 = v_2 = v_1' = 0$ и $v_2' = 1$; $v_1' = 1$ и $v_2 = v_1' = v_2' = 0$ соотв. В опытах использовали смеси O_2 с CO_2 , к-рые добавляли для ускорения колебательной релаксации. Интенсивность полос увеличивается с ростом т-ры и конц-ии

Х. 1983, 19, № 3

$O_2(^1\Delta_g)$ сначала в соответствии с уравнениями $I = k[O_2(^1\Delta_g)]^2$ и $I \sim T^{1/2}$, характерными для бимолекулярных реакций, но при температурах выше 1000 К рост интенсивности ускоряется. Показано, что это ускорение связано с термическим возбуждением кол. уровней молекул $O_2(^1\Delta_g)$, приводящим к появлению горячих полос, налагающихся на полосы испускания димолей. Определены относит. излучательные способности для этих полос и константы скорости семи процессов возбуждения испускания димолей с участием колебательно-возбужденных молекул $O_2(^1\Delta_g)$.

В. Е. Скурат

O₂

Оттиск 14840

1982

2 Д500. Интенсивность горячих полос в бимолекулярном излучении синглетного кислорода O₂(¹Δ_g). Intensities of hot bands in the dimol emissions of singlet molecular oxygen, O₂(¹Δ_g). Boodaghians Razmik, Borrell Patricia M., Borrell Peter, Grant Kevin R. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 8, 1195—1209 (англ.)

Спектр

В ударной трубе исследованы зависимости интенсивности бимолекулярного излучения O₂(¹Δ_g) в полосах 579, 634 и 703 нм от т-ры газа в диапазоне 295—1500 К. Наблюдаемый дополнительный рост интенсивности полос с увеличением т-ры сверх обусловленного кооперативным характером процесса, объяснен вкладом горячих переходов в колебательно-возбужденных молекулах O₂(¹Δ_g), а для полосы 703 нм — также и O₂(¹Σ_g⁺). Рассчитаны константы скорости бимолекулярных излучательных процессов O₂(¹Δ_g, v₁') + O₂(¹Δ_g, v₂') → O₂(³Σ_g⁻, v₁'') + O₂(³Σ_g⁻, v₂'') + hν для значений квантовых чисел v = 0 ÷ 3. Установлено, что для каждой

гр. 1983, 18, № 2

полосы значения констант увеличиваются с ростом числа колебательных квантов в верхнем состоянии, однако эти изменения не соответствуют зависимости от ν коэф. Франка—Кондона для мономолекулярных переходов. Сделан вывод, что вероятности кооперативных электронных переходов в сильной степени зависят от межмолекулярного расстояния. Библ. 32. С. Литке



O₂

1982

Buenker R. J., Hirsch G.
et al.

теор. Stud. Phys Theor. Chem.
расчет, 1982, 21, 81-97.
мол. сб-ба

(ссыл. $\bullet$ CH₂⁺; III)

O₂

1982

Carzky P., et al.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 88 (1), 17-20.

●
(сер. CH₂; III)

теорет.
расчет
возбужд.
состоям.

O₂

1982

24 Б126. Усиленные резонансом формы нефранк-кондоновские эффекты при фотоионизации валентной оболочки O₂. Dittman P. M., Dill D a n, Dehmer J. L. Shape-resonance-induced non-Franck-Condon effects in the valence-shell photoionization of O₂. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 5703—5709 (англ.)

С помощью X_α метода рассеянных волн проведены расчеты парциальных сечений фотоионизации σ и параметров асимметрии углового распределения фотоэлектронов β для уровней 3 σ_g , 1 π_u и 1 π_g молекулы O₂. Кинетич. энергия фотоэлектронов изменялась от 0,01 до 2,5 Re. Для учета колебательных эффектов зависимости $\sigma(h\nu)$ и $\beta(h\nu)$ вычислялись при 12 значениях межъядерного расстояния R в диапазоне $2,2828 \pm \pm 0,4372$ ат. ед. и усреднялись по основному колебательному состоянию, к-рое аппроксимировалось с помощью потенциала Морзе (с использованием эксперим. значений частоты колебаний и энергии диссоциации).

Спектр

X. 1982, 19, N 24.

Результаты указывают наличие резонанса формы в канале σ_u конечного состояния, причем положение резонанса очень сильно зависит от межъядерного расстояния: увеличение R сдвигает резонанс в направлении меньших кинетич. энергий и сужает его, а уменьшение R приводит к уширению резонанса и сдвигу в сторону больших энергий. В целом усреднение по основному колебательному состоянию примерно удваивает ширину и соотв. уменьшает интенсивность резонанса. Для ионизации $3\sigma_g$ уровня (переходы $X^3\Sigma_g^- \rightarrow B^2\Sigma_g^-$ и $X^3\Sigma_g^- \rightarrow b^4\Sigma_g^-$) и $1\pi_g$ -уровня (переход в состояние $X^2\Pi_g$) учет колебаний улучшает согласие с эксперим. зависимостями $\sigma(h\nu)$ и $\beta(h\nu)$. Для ионизации $1\pi_u$ уровня (переходы в состояния $^2\Pi_u$ и $^4\Pi_u$) не наблюдается резонансов формы. Проведено сопоставление с результатами расчетов др. методами. М. Гофман.



O₂

1982

Drake Michael C.

CKP

Opt. Lett., 1982, 7, N9,
440-441.

(see: H₂; III)

O₂

1982

Efstathiou L., Thomas E. W.

ενεργειών Nucl. Instrum. and
Meth., 1982, 194, N1-3,
● 589-591.
(cer. N₂; III)

O₂

Om. 15258

1982

3 Д476. Микроволновые резонансные линии $^{16}\text{O}_2$ в основном электронном состоянии ($X^3\Sigma_g^-$). Microwave resonance lines of $^{16}\text{O}_2$ in its electronic ground state ($X^3\Sigma_g^-$). Endo Yasuki, Mizushima Masataka. «Jap. J. Appl. Phys.», 1982, Part 2, 21, № 6, L379—L380 (англ.)

Исследован микроволн. спектр молекулы $^{16}\text{O}_2$ вблизи 60 и 119 ГГц. Идентифицирована тонкая структура линий вращательных переходов с $F \leq 41$ в основном колебательном состоянии и переходов с $J \leq 21$ в первом возбужденном колебательном состоянии. Определены значения вращательной и центробежной постоянных и постоянных электронного спин-спинового и спин-вращательного взаимодействий.

М. Р. Алиев

М. П;

ор. 1983, 18, №3

O₂

Ommuck 15258

1982

' 97: 63366x Microwave resonance lines of molecular oxygen-16 in its electronic ground state ($X^3\Sigma_g^-$). Endo, Yasuki; Mizushima, Masataka (Inst. Mol. Sci., Myodaiji, Okazaki, Japan: 444). *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* 1982, 21(6), 379-80 (Eng). Low intensity absorption lines of $^{16}\text{O}_2$, in $v = 0$ and $v = 1$ states, are obsd. in the 119 and 60 GHz regions. New sets of values for the mol. parameters, including λ_D which has not been obsd. yet, are obtained.

MB check

C. A. 1982, 97, N 8.

O₂

1982

Ghodgaonkar A. M.,
Ramani K.

परिचय
Do;

Acta phys. pol., 1982,
A61, N 1-2, 151-154.

( Cu. O₂⁺; III)

O₂

Оттиск 14902

1982

5 Б80. Определение производных анизотропии поляризуемости двухатомных молекул. III. Молекула кислорода в основном состоянии $^3\Sigma_g^-$. Determination of derivatives of the polarizability anisotropy in diatomic molecules. III. The oxygen molecule in the $^3\Sigma_g^-$ ground state. Hamaguchi Hiro-O., Buckingham A. D., Jones W. J. «Mol. Phys.», 1982, 46, № 5, 1093—1098 (англ.)

М.П., спектр

Дано краткое описание эксперим. методики исследования колебательно-вращательных спектров КР молекулы кислорода в основном состоянии. Приведены теор. выражения для интенсивностей переходов двухатомной молекулы в состоянии, отвечающем случаю связи «b» по Хунду. Полученные результаты использованы для численных оценок отношения анизотропии поляризуемости γ_0 и пр-ной величины $\partial\gamma_0/\partial R \cdot R = \gamma_1$, где R — межъядерное расстояние. Отмечено, что для значений вращательного квантового числа, больших 9,

Х. 1983, 19, N5

влиянием спина на значение γ_1/γ_0 при равновесной геометрич. конфигурации ядер можно пренебречь. Полученная оценка указанного отношения для кислорода, составляющая $2,85 \pm 0,17$, сопоставлена с др. имеющимися эксперим. оценками этой величины. Сообщ. II см. Hamaguchi H., Buckingham A. D., Jones W. J. «Molec. Phys.», 1981, 43, 1311. В. И. Пупышев

O₂

Оттиск 14902 1982

2 Д69. Определение производных от анизотропии поляризуемости в двухатомных молекулах. Ч. III. Молекула кислорода в основном состоянии. Determination of derivatives of the polarizability anisotropy in diatomic molecules. III. The oxygen molecule in the $^3\Sigma_g^-$ ground state. Hamaguchi Hiro-O., Buckingham A. D., Jones W. J. «Mol. Phys.», 1982, 46, № 5, 1093—1098 (англ.)

Численный метод анализа экспериментально измеренных относительных интенсивностей линий в колебательно-вращательных спектрах комб. рас., развитый в ч. I (Hamaguchi H. et al. «Molec. Phys.», 1981, 43, 963) этой серии для двухатомных молекул в электронном состоянии (ЭС) $^1\Sigma$, применен к мультиплетному ЭС $^3\Sigma_g^-$ молекулы O₂. Показано, что эффект спиновой мультиплетности, учет которого необходим в таком ЭС, становится гораздо менее существенным с увеличением вращательного квантового числа N , а для $N \geq 9$ пренебре-

М.П;

Фр. 1983, 18, №2

жительно мал. Определено также отношение первой производной анизотропии поляризуемости $\gamma_1 = (\partial \alpha_{\parallel} / \partial R - \partial \alpha_{\perp} / \partial R)_e \cdot R_e$ к равновесному значению $\gamma_0 = (\alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp})_e$ и выполнено сравнение с эксперим. данными, для которых спиновый эффект не рассмотрен. В. В. Россихин



O_2

1982

Huber - Walchli Peter,
et al .

KAPC
спектр
в сверхзвук.
сдув.

J. Chem. Phys. 1982,
76 (1), 273-284.

●
(сер. N_2 ; III)

O₂

10mmuck 16060/ 1982
om. 15882

кварупольн. R. P., et al.,
геометри. Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N 6, 506-507.

O₂

1982

Kerr K.

гиперсен-
ситивизация
пресов-
ания

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1982, 86, N 9,
812-820

(ср. He; I)

O₂

1982

1 Б104. Возбуждение электронным ударом атомов кислорода, молекулярного кислорода и молекулярного кислорода в возбужденном состоянии. Совместное электрон-фотонное возбуждение $1^1S \rightarrow 2^3S$ перехода в гелии. Electron impact excitation of atomic oxygen, molecular oxygen and excited molecular oxygen. Joint electron-photon excitation of the $1^1S \rightarrow 2^3S$ transition in helium. Khakoo M. A., Newell W. R., Toner W. T., Eason R. W. «Acta phys. pol.», 1982, A61, № 6, 589—605 (англ.)

Кривые
потери.
Жерниш

Представлены результаты измерений дифференциальных сечений (σ) неупругого рассеяния электронов энергий $E_0 = 100 \times n$ эВ ($n = 1, 2, \dots, 5$) на атомах O (I), молекулах O₂ в основном (II) и возбужденном (III) состояниях. Для I и III угол рассеяния θ равнялся $2,5^\circ \times m$, а для II — $\theta = 5^\circ \times m$ ($m = 1, 2, \dots, 8$). Для II значения σ приведены в трех областях потерь энергии электронов $E = 7,0—9,5$; $9,74—10,14$ и $10,18—10,44$ эВ, для I — в области перехода $^3P \rightarrow ^3S$ ($E = 9,51$ эВ), а для III — $E = 7—10$ эВ. Молекулы O₂ в возбужденном состоянии получались с помощью мик-

X. 1983, 19, N1

роволнового газоразрядного источника и особенности в измеренных спектрах потерь энергии электронов (СПЭЭ) отнесены к переходам $O_2 a^1\Delta_g (v=0) \rightarrow O_2^1\Pi_u (v'=0, 1, \dots 7)$. На основе анализа относит. интенсивностей пиков в СПЭЭ для III определены параметры функции Морзе, описывающей кривую потенциальной энергии для $^1\Pi_u$ состояния O_2 . Кроме того, на примере перехода $1^1S \rightarrow 2^3S$ в He сделаны оценки эксперим. условий, необходимых для измерений сечений возбуждения при совместном действии электронного и фотонного пучков. Описана установка и обсуждены предв. эксперим. данные.

О. А. Басченко

O₂

1982

KAPC)

/98: 24890q Application of classical theory of CARS to diatomic molecules in the gas phase. Kiefer, W. (Phys. Inst., Univ. Bayreuth, D-8580 Bayreuth, Fed. Rep. Ger.). *NATO Adv. Study Inst. Ser., Ser. C* 1982, 93(Non-Linear Raman Spectrosc. Its Chem. Appl.), 241-60 (Eng). Simple classical CARS theory is used to explain exptl. obsd. CARS spectra of diat. nonabsorbing mols. in the gas phase. Special emphasis is given to interference effects between neighboring spectral lines such as the rotational lines within a Q-branch of a diat. mol. Simulated CARS spectra for various different bandwidths are given, which significantly influence the magnitude of the interactions. The interference is examd. between 2 individual lines as a function of the bandwidth to frequency sepn. ratio. The Q-branch spectra are calcd. for O₂, N₂, and NO at various spectral bandwidths and compared with exptl. data.

(42) ☒

C. A. 1983, 98, N 4.

O₂

1982

97: 82184c The oxygen singlet or red emission. Levy, G.
(Serv. C.A.P.E.S. - Agregation, Univ. Paul-Sabatier, Toulouse,
Fr.). *Bull. Union Physiciens* 1982, 76(644), 909-13 (Fr).
Chemiluminescence from O₂ (¹Δ_g) is obsd. on the addn. of
Cl-satd. CCl₄ to alk. H₂O₂ soln. The use of Br-satd. CCl₄ gives
less spectacular results.

Rememo-
mories.

C.A. 1982, 97, N10

O_2, O_2^+

1982

Mc Lean A.D., Lin B.,
et al.

Kb. lux.
paerim

Cloment Wale Funct, 2
Meet, Adelaide, 18-24
Febr., 1982. New York,
1982, 90-100.



(see B₂;

1982

 O_2 (K)при высоких
давлениях

1 Д845. Твердый O_2 при высоких давлениях: спектры комбинационного рассеяния, электронные спектры и фазовые равновесия. Solid O_2 at high pressures: Raman spectra, electronic spectra, and phase equilibria. Nicol Malcolm. «High Pressure Res. and Ind. 8 AIRAPT Conf., 19 EHPRG Conf. Inst. Phys. Chem. Univ. Uppsala, 17-22 Aug., 1981. Proc. Vol. 2». Uppsala, 1982, 527—533 (англ.)

Проведена предварительная интерпретация результатов исследования молекулярного кислорода в области высоких давлений методами спектроскопии комб. рас., электронного поглощения и дифракции рентгеновских лучей. Эксперименты проводились в температурном интервале 100—350 К в диапазоне давлений до 40 ГПа. Установлено, что при $t_{ре}$ 298 К при давлении 5,9 ГПа происходит переход кислорода в твердую β -фазу, которая при дальнейшем росте давления обнаруживает

СКР,

электрон.
спектры

и фазов. равн.

ср. 1983, 18, N 1

два фазовых превращения при 9,6 ГПа ($\beta \rightarrow \alpha$) и при 9,9 ГПа ($\alpha \rightarrow \epsilon$). Поглощение кристаллов β -O₂ в видимой области спектра связано с переходами $^1\Sigma_g^- \leftarrow ^3\Sigma_g^-$, $2^1\Delta_g \leftarrow 2^3\Sigma_g^-$ и $^1\Delta_g + ^1\Sigma_g^+ \leftarrow 2^3\Sigma_g^-$, которые сильно поляризованы и испытывают смещение в область высоких энергий по мере роста давления. Кристаллы ϵ -O₂ в области давлений выше 20 ГПа обнаруживают сильное поглощение во всей видимой области спектра, обусловленное π - π^* -переходами. В. С. З.



O₂

1982

Ohwada Ken.

papers J. Chem. Phys., 1982,
Cust. notes. 77, N1, 424-428.
4 E.

(see BeB; III)

O₂

[Omneek 13987]

1982

Okwada K.,

Кв. сек.
расшир

J. Chem. Phys., 1982,
76, № 5, 2565-2568.



O₂

1982

Mitev V. M., Simeonov
B.B., et al.

CKP

Raman Spectrosc.: Line-
ar and Nonlinear. Proc.
8 Int. Conf. Bordeaux, 6-11
Sept., 1982, ● Chichester e.a., 1982,
291-292. (cer. N₂ ; III)

O₂

1982.

McC Master Blair N.,
Smith Vedene H., et al.

расчет

эксперим. Mol. Phys., 1982, 46,
поименований. N 3, 449-463.

●
(см. O₂; III)

O₂

1982

12 Д1410. Параметры линий полосы А кислорода и расчеты пропускания атмосферы для полос А, В и γ. Line parameters of the oxygen A band and calculation of the atmospheric transmission functions for the A, B, and γ bands. Nakazawa Takakiyo, Yamanouchi Takashi, Tanaka Masayuki. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1982, 27, № 6, 615—625

Получен спектр поглощения газообразного кислорода вблизи 762 нм в слое 506 м при т-ре 296 К. Наблюденный спектр связан с колебательной полосой $O-O$ электронного перехода ${}^1\Sigma_g^+ \leftarrow {}^3\Sigma_g^-$, разрешенного за счет магнитного дипольного момента. При регистрации спектра использовано разрешение 24 см^{-1} и давление 0,1—2 атм. Изучен спектр смеси кислород—азот. Измерены эквив. ширины и построены кривые роста по данным работы и литературным источникам. Из сравнения этих кривых определены оптимальные наборы параметров для изученной полосы. Результаты использованы для расчетов пропускания стандартных атмосфер субарктики, средних широт и тропиков зимой и летом в области полос $0-0$, $1-0$ и $2-0$ изученного электронного перехода. Библ. 24.

М. В. Т.

Спектр

ор. 1982, 18,
N 12

O₂

1982

3 Д1554. Изучение вращательной релаксации в свободно расширяющейся реактивной струе методом когерентного антистоксова комбинационного рассеяния света. Cars studies of rotational relaxation in free jet expansions. Nibler Joseph W., Huber-Wälchli Peter, Hou Shih-Yue, Pubanz George. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8 Int. Conf., Bordeaux, 6—11 Sept., 1982». Chichester e. a., 1982, 161—162 (англ.)

Изучены спектры когер. антистоксова комб. рас. (КАКР) молекул O₂ (I) в сверхзвуковом потоке при давлении I в различных участках струи от 1,7 до 0,3 мм рт. ст. Сопоставлены распределения интенсивности по компонентам вращательных подуровней Q-ветви I в статич. условиях и в сверхзвуковой струе. В рамках простой релаксационной модели рассчитана эффективная вращательная т-ра I в различных участках струи, составляющая 11—45 К. Определено число

спектр

ф. 1983, 18, №3.

столкновений молекул I в потоке, приводящее к преобразованию энергии вращательных состояний в энергию трансляционных движений, равное 14 ± 4 . Отмечено, что необходимое число столкновений в газообразных D₂ и H₂ для аналогичного процесса энергетич. релаксации соответственно в 10 и 30 раз больше. Вычислены плотности молекул I в сверхзвуковой струе. Сделан вывод о перспективности исследования энергетич. релаксаций в сверхзвуковых потоках газовых смесей методом КАКР.

Н. 3.



O₂

1982

расчёт
энергии
состояния
 $E^3\Sigma^-$

1 Д100. Кубические вклады в расчетах многоконфигурационным методом самосогласованного поля (МК ССП). Cubic contributions in multiconfigurational self-consistentfield (MCSCF) calculations. Olsen Jørgensen Poul, Yeager Danny L. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 356—370 (англ.)

Предложена обобщенная кубич. процедура Ньютона—Рафсона для поиска локальных минимумов функционала энергии в методе МК ССП. При использовании кубич. схемы удается получить глобальную сходимость процесса согласования без использования спец. ограничений на длины шагов для части переменных, что часто применяется в стандартной квадратичной методике. При подходе к минимуму функционала (локальная сходимость) предлагается использовать обычные методы минимизации второго порядка. На примере расчёта энергии состояния $E^3\Sigma^-$ молекулы O₂ в базисе слэтеровских орбиталей показана эффективность разработанной кубич. схемы решения ур-ний МК ССП.

А. И. Дементьев

р. 1983, 18, № 1

O₂

1982

8 Д102. Многоконфигурационное хартри-фоковское исследование псевдопересечения кривых с использованием метода Ньютона—Рафсона. Multiconfigurational Hartree—Fock studies of avoided curve crossing using the Newton—Raphson technique. Olsen Jeppe, Jørgensen Poul, Yeager Danny L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 1, 527—542 (англ.)

В рамках многоконфигурац. метода Хартри—Фока с процедурой Ньютона—Рафсона исследованы различные причины, усложняющие расчет поверхностей потенц. энергии, особенно в области их псевдопересечения. К ним относятся появление малых или лишних отрицат. собств. значений в гессиане и переворот корней секулярного ур-ния. Подробно описаны эффективные приемы устранения этих трудностей и, в частности, автоматич. контроль шага итерации. Предлагаемая методика успешно проиллюстрирована на примерах расчета двух нижних состояний симметрии $^3\Sigma_u^-$ в молекуле O₂ и трех нижних состояний симметрии $^4\Pi$ в молекуле BO, для которых имеет место явление псевдопересечения.

А. Воронин

Кв. мех-
расчет

 BO

ф. 1982, 18, № 8

O₂

1982

Olsen Jeppe, Jorgensen
Poul.

pacruii J. Chem. Phys., 1982,
77, N12, 6109-6130.

(ср. Мемог pacruii mod.-1; III)

O₂

[Ommuck 16283]

1982

Sheepers
C6834

Painter G. S., Averill F. W.,
Phys. Rev. B. Condens.
Matter, 1982, 26, N4,
781-790.

O₂

1982

3 Д693. Определение времени жизни O₂(¹Δ_g) с помощью измерений разрешенной во времени ИК-люминесценции. Lifetime of O₂(¹Δ_g) in liquid water as determined by time-resolved infrared luminescence measurements. Rodgers Michael A. J., Snowden Paul T. «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 20, 5541—5543 (англ.)

Вероятность
переходов

При возбуждении с помощью удвоенного по частоте импульсного излучения лазера на ИАГ: Nd³⁺ (λ_{возб} = 532 нм, τ_{возб} ≈ 10 нс, E_{возб} = 50 мДж) измерены времена жизни ИК-люминесценции (τ_{люм}) синглетного молекулярного, кислорода (O₂(¹Δ_g)) в H₂O, D₂O и смесях H₂O с D₂O. Для регистрации кинетики короткоживущего свечения O₂(¹Δ_g) при 1,27 мкм использовался малоинерционный Ge-фотодиод с временным разрешением < 1 мкс. В качестве фотосенсибилизатора образования O₂(¹Δ_g) был применен тетраакс(4-сульфо-

р. 1983, 18, №3

натофенил)-порфин. Найдено, что величины $\tau_{\text{люм}}$ в H_2O и D_2O составляют соответственно 4,4 и 56 мкс. Отмечено, что полученные значения $\tau_{\text{люм}}$ $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ в H_2O находятся в хорошем согласии с определенными ранее одним из авторов с помощью не прямых измерений. Т. А. Ш.

Библ. 22.

O₂

Ommuck 13807

1982

Roos B.O., Linse P., et al.

М. И.,
Кв. мех.,
расчет.

Chem. Phys., 1982, 66,
N 1-2, 197 - 207.

O₂

1982

12 Д629. ИК-магнитные дипольные полосы атмосферного кислорода. Magnetic dipole infrared atmospheric oxygen bands. Rothman Laurence S. «Appl. Opt.», 1982, 21, № 13, 2428—2431 (англ.)

Проанализированы литературные данные по спектрам магнитных дипольных переходов ИК-атмосферной системы $X^3\Sigma_g^- \rightarrow a^1\Delta_g$ молекулы O₂. Используя результаты лабор. и астрономич. исследований колебательных полос 0—0 (1,27 мкм) и 1—0 (1,07 мкм), автор определил колебательные и вращательные постоянные уровней $v=0$ и $v=1$ метастабильного электронного состояния $a^1\Delta_g$ молекулы O₂. Аналогичные оценки проведены также для метастабильного электронного состояния изотопа $^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.

А. В. Н.

спектр,

м.п.

р. 1982, 18, N 12

Атлас мнений О₂

1982

в спектре
полюсов.
атмосферы

Sci. Tech. Atmosp.

Rep. 1982, 20 (6),

Abstr. No N82-18853.



, сел. H₂O; III,

O₂

1982

Shibuya K., et al.

J. Chem. Phys., 1982,
76, N2, 1184-1186.

спектр

●
(cell. N₂; III)

O₂

1982

' 96: 223433b Newton-Raphson approaches and generalizations in multiconfigurational self-consistent field calculations. Yeager, Danny L.; Lynch, Diane; Nichols, Jeffrey; Joergensen, Poul; Olsen, Jeppe (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(12), 2140-53 (Eng). MC Hartree-Fock procedures based on unitary exponential operators are developed and reviewed. The Newton-Raphson equations demonstrate quadratic convergence. Particularly when far from convergence, small eigenvalues of the Hessian may give extremely large step length amplitudes. Two procedures are discussed, mode damping and mode controlling, which are used to reduce large step length amplitudes. With both procedures mode reversal is also used to assure that the proper no. of neg. eigenvalues is present for each iteration. Calcd. results are given for the first excited $1\Sigma_g^+$ state of C_2 and the 2^1A_1 state of CH_2 . For an optimized MC-SCF state the generalized Brillouin's theorem is satisfied. Generalizations of Newton-Raphson and the multiplicity independent Newton-Raphson approaches are discussed. It is shown how fixed Hessian-type approaches will demonstrate quadratic, cubic, quartic, ... convergency. Calcns. are presented for the $E^2\Sigma_u^-$ state of O_2 .

neopemurec
paorem

C.A. 1982, 96, N 26.

1982

O₂
O₂⁺

спектр

12 Б146. Использование многодетекторного электронного спектрометра для изучения в области 14,8—20,3 эВ потерь энергии электронов, рассеянных молекулами кислорода. Electron energy-loss studies of molecular oxygen in the region 14,8—20,3 eV using a multidetector electron spectrometer. York T. A., Comer J. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 24, 4629—4635 (англ.)

Сконструирован спектрометр с многоканальной системой регистрации электронов и дифференциальной откачкой области столкновения электронного и молек. пучков. На этом спектрометре в области 14,8—20,3 эВ измерены спектры потерь энергии электронов, рассеянных молекулами O₂. Разрешение спектров составило 30 мэВ. Энергия перв. пучка электронов (E) варьировалась в пределах от 10 до 100 эВ, а угол рассеяния (Θ) изменялся в диапазоне от 0° до 90°. В полученных спектрах обнаружено большое число ранее не известных особенностей. Проведен анализ изменений относит.

(H) X

X. 1983, 19, N 12

O₂⁺

интенсивностей этих линий при варьировании E и Θ . На основе полученных результатов идентифицированы четыре ридберговские серии (РС), две из к-рых сходятся к $b^4\Sigma_g^-$, а две остальных к $B\Sigma_g^-$ состояниям O_2^+ с энергиями 18,17 эВ (четвертый потенциал ионизации O_2) и 20,296 эВ соотв. Каждая пара РС, сходящаяся к определенному состоянию, представляет собой ряды дипольно-запрещенных переходов на $ns\sigma_g$ и $nd\sigma_g$ уровни. В измеренных спектрах также обнаружено несколько изолированных пиков, связанных с переходами, запрещенными по спину. О. А. Басченко

O₂

1982

Tossell John A, Moore
John H., et al.

Фурье-
анализ

J. Amer. Chem. Soc.,
1982, 104, N26, 7416-
● -7423.

(en. CD; III)

02

1983

8 Д579. Экспериментальный и теоретический анализ температурной зависимости ширины вращательных линий комбинационного рассеяния кислорода. Experimental and theoretical analysis of the temperature dependence of rotational Raman linewidths of oxygen. Bégar M., Lallemand P., Cebe J. P., Giraud M. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 2, 672—687 (англ.)

спектр

Получены вращательные спектры комб. рас. газообразного кислорода при плотностях 5—40 амага в интервале t -р 100—400 К с разрешением $0,2 \text{ см}^{-1}$, возбужденные лазером Ag^+ . Внутррезонаторное расположение образца позволило работать с мощностью возбуждающего света $\sim 25 \text{ Вт}$ в линии 488 нм. Описана конструкция температурной кюветы высокого давления. Обнаружено, что в условиях эксперимента вращательный спектр кислорода представляет собой совокупность дискретных линий, налагающихся на континуум неизвестной природы, а контур отдельной линии является

СР, 1983, 18, N 8

лоренцевым. Измерены коэф. уширения вращательных линий до $J=24$. Выполнен расчет этих коэф. методами полуклассич. теории с использованием модельного потенциала, содержащего притяжение и отталкивание в изотропной и анизотропной частях. Варьированием параметров потенциала получено согласие с эксперим. данными. Процедура показывает важную роль анизотропной части потенциала отталкивания в уширении спектральных линий. Библ. 38. М. В. Т.



D₂

om. 18878

1983

No,
ab initio
pacrim.

Binkley J.S., Frisch M.J.,
Int. J. Quantum Chem.: Quan-
tum Chem. Symp., 1983, N 14:
Proc. Int. Symp. Atom., Mol.
and Solid-State Theory, Col-
lis, Phenom., and Comput. Quan-
tum Chem., ● Flagler Beach,
Fla, 3-12 March, 1983, 331-337

O₂

1983

12 Б4312. Введение. Introduction. Cauquis G.
«Bull. Dir. étud. et rech.», 1983, А, № 1—2, 11—18 (фр.;
рез. англ.)

Рассмотрено современное состояние изучения электрон-
ной структуры молекулы O₂ в основном триплетном и
двух возбужденных синглетных состояниях. Рассмотрены
также структура, методы получения и хим. св-ва про-
стых ионов и радикалов, образующихся из O₂ (в основ-
ном, супероксид-иона O₂^{•-}, а также O^{•-}, O₂^{2•-}, HO₂^{•-},
НО^{•-}, O₂²⁻ и O₃^{•-}). Подробно рассмотрены к-тно-основ-
ные равновесия с участием этих частиц, а также их
восстановление. Я. Н. Малкин

Стеклов

X. 1984, 19, N 12

O₂

1983

12 Б4311. Кислород: возбужденные состояния и [образующиеся из них радикальные состояния]. Oxygène: états excités et espèces radicalaires dérivées. «Bull. Dir. étud. et rech.», 1983, А, № 1—2, 4—129 (фр.; рез. англ.)
Доклады на состоявшемся 13 мая 1982 г. междисциплинарном симпозиуме, организованном Электрич. о-вом Франции. Содержание: Cauquis G. Введение; Ferradini C., Pucheault S. Физ. химия супероксид-иона; Buvet R., LePort L., Sechand P., Martin F. Электрохим. и хим. восстановление кислорода в водн. среде; Braun A. M., Oliveros E., Maurette M. T. Фотоокисление; Gareil M., Pinson J., Savéant J. M. Нуклеофильные р-ции супероксид-иона. Замещение в галоидзамещ. ароматич. соединениях; Lecheheb A., Takakubo M., Faure J., Belloni J.

X. 1984, 19, N 12

Р-дионная способность супероксид-иона по отношению к комплексам Co^{2+} и Co^{3+} ; Oliveros E., Maugrette M. T., Braun A. M. Идентификация и анализ супероксид-иона и синглетного кислорода в гетерог. фазе. Я. Н. Малкин

O₂

Om. 19233/1983

1 B1159. Миллиметровый и субмиллиметровый спектр кислорода в состоянии $a^1\Delta_g$. Millimeter and submillimeter wave spectrum of oxygen in the $a^1\Delta_g$ state. Cazzoli G., Degli Esposti C., Favero P. G. «Chem. Phys. Lett», 1983, 100, № 1, 99—101 (англ.)

В миллиметровом и субмиллиметровом диапазоне измерены два вращательных перехода ($J=3\leftarrow 2$ и $J=4\leftarrow 3$) молекулы O₂ в состоянии $a^1\Delta_g$. Использовались системы регистрации с накоплением и численным сглаживанием сигнала, позволяющие улучшить отношение сигнала к шуму, и низкотемпературный (1,4 K) InSb-детектор. Метастабильные молекулы O₂($a^1\Delta_g$) образовывались непосредственно в поглощающей ячейке ($l=4$ м) в условиях разряда постоянного тока в атмосфере кислорода. Значения молек. постоянных (МГц): $B_0=42504,523$, $D_0=0,1526$, $q=7,8\cdot 10^{-5}$. В. М. Ковба

М.П.

X. 1984, 19, N1

O₂

(Om. 19233)

1983

99:166166c Millimeter and submillimeter wave spectrum of oxygen in the $a^1\Delta_g$ state. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Favero, P. G. (Inst. Spettrosc. Mol., CNR, 40126 Bologna, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1983, 100(1), 99-101 (Eng). The measurements of 2 rotational transitions of O in the $a^1\Delta_g$ electronically excited state in the millimeter and submillimeter wave region allowed a more accurate detn. of the mol. parameters of this mol. The newly detd. values in MHz are $B_0 = 42504.523(4)$, $D_0 = 0.1526(1)$; $q = 7.8(55) \times 10^{-5}$.

(mm. cm. mp)

c. A. 1983, 99, N20

O₂

1983

Chen E. C. M., Went-
worth W. E.

Ac;

J. Phys. Chem. 1983,
87 (1), 45-49.

(see NO; III)

O₂

Om-17039

1983

12 Д108. Энергетическое тестирование качества локализованных базисных систем: молекула O₂. Total energy assessment of the quality of localized basis sets. O₂ molecule. Delley B., Freeman A. J., Weinert M., Wimmer E. «Phys. Rev. B: Condens. Matter», 1983, 27, № 10, 6509—6511 (англ.)

расчет D_0 ;

На пример расчета методом дискретного варьирования энергии диссоциации (D_e) молекулы O₂ сравнивается относит. эффективность различных базисов АО, центрированных на ядрах. Найдено, что включение в базис орбиталей, полученных для положительного атомного иона, сильнее понижает полную энергию молекулы, чем использование виртуальных АО нейтрального атома. Действительно, добавление АО 3s- и 3p-нейтрального атома кислорода к базису (2s, 2p) увеличивает энергию диссоциации O₂ на 1 эВ, в то время как включение ф-ций 2s и 2p иона O⁺ увеличивает D_e на 3 эВ.

А. И. Дементьев

ср. 1983, 18, N 12

O₂

1983

Dmitrieva I.K., Zenevich
V.A.

Прочитан
ст. 12.

Chem. Phys. Lett., 1983,
96, N2, 228-231.

● (ex. H₂; III)

02

1983

1) 4 Л135. Микроволновые линии поглощения молекулы $^{18}\text{O}_2$ в основном электронном состоянии $X^3\Sigma_g^-$. Microwave absorption lines of $^{18}\text{O}_2$ in its electronic ground state ($X^3\Sigma_g^-$). Endo Yasuki, Mizushima Masataka. «Jap. J. Appl. Phys.», 1983, PT2, 22, № 8, 534—536 (англ.)

и.л., теоретр,
структура

В диапазоне 50—380 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы $^{18}\text{O}_2$. Идентифицирована тонкая структура магнитно-дипольных вращательных переходов с $J \leq 44$ основного и первого возбужденного колебательного состояния основного триплетного электронного состояния $X^3\Sigma_g^-$. Определены значения вращательной и центробежной постоянных ($B_0 = 38313,761$ МГц, $D_0 = 0,1180$ МГц), постоянных спин-спиновых ($\lambda = 59,4966831$ ГГц) и спин-вращательного взаимодействия ($\gamma = -224,4441$ МГц), а также параметров γ_D , λ_D и λ_{DD} , характеризующих центробежную поправку к этим взаимодействиям.

М. Р. Алиев

ср. 1984, 18, № 4

O₂

[Om. 17843]

1983

99: 221409m Microwave absorption lines of molecular oxygen-18 in its electronic ground state ($X^3\Sigma_g^-$). Endo, Yasuki; Mizushima, Masataka (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* 1983, 22(8), 534-6 (Eng). Microwave absorption lines of $^{18}\text{O}_2$, in $v = 0$ and $v = 1$ states, were obsd. in the 119 and 60 GHz regions. Precisely detd. mol. parameters for the $^{18}\text{O}_2$ species were compared with those of $^{16}\text{O}_2$ previously detd., and isotope dependence of the parameters are briefly discussed.

MB chempr

C.A. 1983, 99, n 26

O₂

[Om. 16886]

1983

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

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

ab initio
parvum

O₂

1983

Fauvel Manfred.

Adv. Atom. and Mol.

Phys. Vol. 19. New York

e.e., 1983, 345-394.

сечение
взаим.
возбужд.

( $\text{Na}_2 - \text{Ar}; \text{III}$)

02

1983

4 Л188. Температурная зависимость фотопоглощения молекулы кислорода в континууме Шумана—Рунге. Temperature dependence in the Schumann-Runge photo-absorption continuum of oxygen. Gibson S. T., Gies H. P. F., Blake A. J., McCoy D. G., Rogers P. J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1983, 30, № 5, 385—393 (англ.)

Измерена температурная зависимость сечения поглощения молекулы кислорода в области континуума Шумана—Рунге ($X^3\Sigma_g^- - B^3\Sigma_u^-$) (140—174 нм) с разрешением 0,01 нм в диапазоне т-р 295—575 К. Точность относит. значений коэф. поглощения не превышает 0,2%, а абсолютных 5%. На основании полученных данных с использованием процедуры «подгонки» определены потенциал отталкивательного состояния и зависимость дипольного момента перехода от межъядерного расстояния $R_e(r)$. Результаты проведенного анализа сопоставлены с расчетами ab initio зависимости $R_e(r)$. Библи. 39. В. А. Елохин

ср. 1984, 18, 44

O₂

1983

Golab Joseph T., Yeager
Danny L., et al.

расчёт
м.п.,
Ес

Chem. Phys., 1983,
78, N2, 175-199.

● (см. CH₂; III)

O₂

1983

1 Г37. Кривые потенциальной энергии при диссоциативной рекомбинации. Potential energy curves for dissociative recombination. G u b e r m a n S t e v e n L. «Phys. Ion—Ion and Electron—Ion Collis. Proc. NATO Adv. Summer Inst., Baddeck, 13—26 Sept., 1981». New York; London, 1983, 167—200 (англ.)

Приведен обзор результатов обширных орбитальных расчетов отталкивательных потенц. кривых O₂, H₂, He₂, характеризующих диссоциативную рекомбинацию ионов O₂⁺, H₂⁺, He₂⁺. Обсуждается выбор базисных атомных ф-ций, используемых для построения одноэлектронных молекулярных орбиталей, и построение на их основе с помощью пермутационных операторов суперпозиций, описывающих полную молекулярную волн. ф-цию. Использовались базисные атомные ф-ции, аппроксимированные комбинациями гауссовых ф-ций. Обсуждаются одно- и многоконфигурац. методы с самосогласованным

расчет
потенц.
кривых

(+2)

ср. 1984, 18, N 1

H₂, He₂

полем в рамках минимизации энергии при построении волн. ф-ции молекулы и учет межконфигурац. взаимодействия, а также общие характеристики вычислительных программ. Выполнены расчеты всех 62 валентных состояний O_2 , возникающих из атомов $O(^3P)$, $O(^1S)$ и $O(^1D)$, и состояний $X^2\Pi_g$ и $^4\Pi_u O_2^+$. Приведена таблица энергий 18 состояний O_2 , которые можно было сравнить с появившимися ранее расчетами и экспериментом. На основе приведенных графиков отталкивательных потенц. кривых качественно обсуждаются возможности и вероятность диссоциации при рекомбинации к различным атомарным состояниям. Аналогичное обсуждение и обзор эксперим. данных по диссоциативной рекомбинации выполнены для $H_2^+ + e$ и $He_2^+ + e$.

В. Н. Сошников

02

1983

1 Г37. Кривые потенциальной энергии при диссоциативной рекомбинации. Potential energy curves for dissociative recombination. G u b e r m a n S t e v e n L. «Phys. Ion—Ion and Electron—Ion Collis. Proc. NATO Adv. Summer Inst., Baddeck, 13—26 Sept., 1981». New York; London, 1983, 167—200 (англ.)

Приведен обзор результатов обширных орбитальных расчетов отталкивательных потенц. кривых O_2 , H_2 , He_2 , характеризующих диссоциативную рекомбинацию ионов O_2^+ , H_2^+ , He_2^+ . Обсуждается выбор базисных атомных ф-ций, используемых для построения одноэлектронных молекулярных орбиталей, и построение на их основе с помощью пермутационных операторов суперпозиций, описывающих полную молекулярную волн. ф-цию. Использовались базисные атомные ф-ции, аппроксимированные комбинациями гауссовых ф-ций. Обсуждаются одно- и многоконфигурац. методы с самосогласованным полем в рамках минимизации энергии при построении

потенц.
кривые

ф. 1984, 18, и 1

(42) ☒

He , He_2

волн. ф-ции молекулы и учет межконфигурац. взаимодействия, а также общие характеристики вычислительных программ. Выполнены расчеты всех 62 валентных состояний O_2 , возникающих из атомов $O(^3P)$, $O(^1S)$ и $O(^1D)$, и состояний $X^2\Pi_g$ и $^4\Pi_u O_2^+$. Приведена таблица энергий 18 состояний O_2 , которые можно было сравнить с появившимися ранее расчетами и экспериментом. На основе приведенных графиков отталкивательных потенц. кривых качественно обсуждаются возможности и вероятность диссоциации при рекомбинации к различным атомарным состояниям. Аналогичное обсуждение и обзор эксперим. данных по диссоциативной рекомбинации выполнены для $H_2^+ + e$ и $He_2^+ + e$.

В. Н. Сошников

O₂

Дм. 17697

1983

2 Б1111. Спектроскопия вынужденного комбинационного рассеяния высокого разрешения O₂. High-resolution stimulated Raman spectroscopy of O₂. Hill R.A., Esherick P., Owyong A. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 1, 119—133 (англ.)

Спектроскопия усиления КР применена для исследования колебательно-вращательного спектра КР O₂ (I) в свободно расширяющейся струе. Спектр возбуждали линией 647,1 нм одномодового криптонового лазера и перестраиваемым в области 588 нм импульсным лазером на красителе, разрешение составляло $\sim 0,002 \text{ см}^{-1}$, в спектре проведены поляризац. измерения. Охлаждение I до $\sim 40 \text{ К}$ позволило разрешить тонкую структуру Q-ветви, а также выделить Q-ветки сателлитов при 1554 и 1558 см^{-1} , обусловленных расщеплением основного состояния $^3\Sigma_g$ из-за спин-спинового и спин-вращательного взаимодействия. Анализ распределения интенсивностей вращательных компонент позволил показать, что в I реализуется промежут. случай связи по Гунду. Степень деполяризации полосы основного колебания равна $0,164 \pm 0.004$.

А. В. Бобров

Спектр, М. П.

Х. 1984, 19,
N 2

O₂

[Om. 17697]

1983

99-96069x High-resolution stimulated Raman spectroscopy of molecular oxygen. Hill, R. A.; Esherick, P.; Owyong, A. (Sandia Natl. Lab., Albuquerque, NM 87185 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 100(1), 119-33 (Eng). High-resoln. (0.002 cm⁻¹) stimulated Raman spectroscopy was applied to the study of both normal and satellite Q branches of the fundamental vibrational band of mol. O. By using a pulsed mol. free-expansion jet to adiabatically cool the O sample, satellite Q branches at 1554 and 1558 cm⁻¹ that arise due to the splitting of the ³Σ_g ground state by spin-spin and spin-rotation interactions were completely resolved for the 1st time. Measured intensity ratios for the $\Delta N \Delta J(J, N) = QO(2, 1)$ and $QR(1, 1)$ lines, and for the $QS(0, 1)$ and $QP(2, 1)$ lines compare favorably with that for a coupling case intermediate between Hund's cases (a) and (b). Depolarization ratios, measured for a series of QQ-branch (unresolved) triplets, give a value 0.164 ± 0.004 for the depolarization ratio of the fundamental vibrational band.

(CKP)

c. A. 1983, 99, N 12

O₂

1983

Hušač Ivan, Čársky
Petr.

paciente
M. N.

Int. J. Quantum Chem.,
1983, 24, n2, 141-148.

(ca. Be ; III)

O₂

Muxley P., Murrell J. N. 1983

потенц.

ср-из
основн.

соед.

J. Chem. Soc., Faraday

Trans 2 1983, 79 (2),

323-328.

(сер. Li; III)

O₂

[Om- 16713] 1983

/ 99: 181734e Electron impact excitation from a $^1\Delta_g$ state of molecular oxygen. Khakoo, M. A.; Newell, W. R.; Smith, A. C. H. (Dep. Phys. Astron., Univ. Coll., London, UK WC1E 6BT). *J. Phys. B* 1983, 16(10), L317-L322 (Eng). Energy-loss features obsd. in the electron-impact excitation of discharged mol. O are assigned to the transitions O_2 a $^1\Delta_g$ ($v = 0$) $\rightarrow$ O_2 $^1\Pi_u$ ($v' = 0, 1, \dots, 7$). A Morse potential energy curve is detd. for the $^1\Pi_u$ state using the relative intensities of these energy-loss features.

$^1\Pi_u$ -потенс.
критич.
Морзе

с.А. 1983, 99, N 22

O₂

1983

98: 152157t The Schumann-Runge diatomic oxygen emission, following visible multiphoton excitation of monomeric nitrogen dioxide. Matsumi, Y.; Murasawa, Y.; Obi, K.; Tanaka, I. (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Laser Chem.* 1983, 1(2), 113-30 (Eng). The Schumann-Runge emission ($B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$) of O₂ was obsd. in the wavelength range of 220-300 nm, when NO₂ was irradiated with a focused visible laser (470-580 nm). The excitation spectrum of the emission also showed the Schumann-Runge transition from highly excited vibrational levels ($v'' = 22-26$) of the X state to the $v' = 1-3$ levels of the B state of O. The highly vibrationally excited O₂ ($E_{vib} \approx 30,000$ cm⁻¹) is once produced through a multiphoton process of NO₂ and then absorbs one more photon. The resulting excited state of O₂ emits fluorescence in the UV region. Even at 40 torr of NO₂, no rotational-vibrational relaxation in the B state was obsd. The mechanism of the multiphoton process is discussed.

($B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$)

C. A. 1983, 98, N18.