O_2^+

Johnson R. C. 1924

Mere.

Proc. Roy. Soc. A
1924, 105, 683

39

O_2^+, m.n.

ОХМ

O_2^+ 17

b-a

1926-

Frerichs R.

Z. Phys., 1926, 35, 683

О структуре отрицат. полос кислорода

Разрядная трубка J=0,5-1,5 A V=500-600 v

Δ=2,6 A/mm Р.С. - 60000

2ой порядк. 6,4 м спектрогр. с решеткой. Эксп. 15 мин.

0,0	ν_0=16592,2
1,0	15577,0
2,0	14584,0
0,1	17754,7
0,2	18881,5

Проведен вращат. анализ. пост. нет

Holland Z. wiss. Phot., 23, 342, 1925

✓ 1927

O_2^+

Ellsworth V. M., Hopfield J. J.

Phys. Rev, 1927, 29, 79

Полосы кислорода в УФ

Высоковольтный разряд $p = 0{,}02-0{,}03$ мм Hg

Однометровый спектрограф с решеткой 1⁵⁄₈ пор. и вакуумный спектрограф с решеткой 0,5 м

Канты *набл. впервые

n' \ n''	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0					OH	29427	27757	26104	29490	22912*
1					OH	OH	28611	26976		
2				OH	32853	OH	29466	27821		
3			37188	OH	33670	OH	OH			
4		39785	37978	36202	OH					
5		40551	38739	36953						
6	43126	41281	39474	37701						
7	43837*	41991	40181							
8	44506*	42668	40589							
9	45174*	43326*								
10	45789*	43950*								

Ф-ла Бордиса:

$$\nu = \begin{matrix}38303\\38108\end{matrix} + (887n' - 13{,}4n'^2) - (1859{,}9n'' - 16{,}53n''^2)$$

Эта ф-ла верна, если далее в УФ нет более прогрессий

V

O_2^+

1931

Stevens D.S.

Phys. Rev., 1931, 37, 1711

Вращательный анализ 1-й отрицат. группы полос кислорода $(O_2)^+$. Кр. сообщ.

Разр. в полом катоде

2-й порядк. 21 пр. спектрографа с решеткой

Провед вращ. анализ +6,0-6, +7,0-7 $^2\Pi-^2\Pi$

31.75

Низш. сост. относится к случ. Гунда а, высш. Верхн. $^2\Pi$ относится к случ. b. Низш. $^2\Pi$ сост. регулярное с дубл. расщепл. = 195 см$^{-1}$!

$B' = 1{,}043 - 0{,}027v'$

$B'' = 1{,}583 - 0{,}009v''$

$r_e' = 1{,}41$

$r_e'' = 1{,}15$

✓ O_2^+

1931

Stevens D.S.

Phys. Rev., 1931, 38, 1292

Вращательный анализ первой отрицательной группы кислородных (O_2^+) полос

Разряд в полом катоде (Frerichs) λ=1,54 2147.7 γ-линия Cd 132 Å

Колеб. анализ впервые Элливорт и Хопфield. Мэллисон Ph.R., 1928, 32, 213 изменил нумерацию согласно распред. интенсивностей. Стабилберг, что эта нумерация более вероятно по принципу фрамка Кондона

Вращ. анализ 1-8, 0-8, 1-9, 0-9 (по Ел. корр.: 1-6, 0-6, 1-7 и 0-7)

Термы верхн. $^2\Pi$ сост. представл. по Хиллу и Ван-Флеку

	v'=0	v'=1	v''=8	v''=9
B_1	1,050	1,030	1,525	1,520
B_2	1,047	1,037	1,550	1,538
B(av)	1,048	1,034	1,538	1,529

~~B_1 (v=0) 1,050, v=1 1,030~~
~~B_2~~

$^2\Pi_{верх}$

$A' = +8,2\ см^{-1}$

$B' = 1,048 - 0,014\,v'$

$D'_{расч} = 5,6 \cdot 10^{-6}$

$D'_{набл} = 5 \cdot 10^{-6}$

$r_e = 1,41$ Å

$^2\Pi_{нижн.}$

$A'' = +195\ см^{-1}$

$B'' = 1,610 - 0,009\,v''$

$D'' = 4,6 \cdot 10^{-6}$

$D_{расч} =$

$r_e = 1,44$ Å

$p = 0,036;\ q = 0,0027$

1-8 0,8

первые полосы

			1,9	0,9
$^5R_{21}$	28620,64 ($J''+1/2=1$)	27747,31 ($J''=1/2$)	26972,33 (1/2)	25913,54 (3/2)
$^9R_2$	28607,31 ($J''=5/2$)	27735,41 ($J''=5/2$)	26961,61 (5/2)	25899,61 (5/2)
R_1	28613,73 ($J''=1/2$)	27740,12 ($J''=1/2$)	26965,72 (1/2)	25905,01 (3/2)
P_1	28605,92 ($J''=3/2$)	27732,71 ($J''=3/2$)	26959,11 (3/2)	25898,52 (3/2)

вторые полосы

R_2	28429,42 ($J''=3/2$)	27557,92 ($J''=3/2$)	26785,04 (3/2)	26102,43 (1/2)
P_2	28415,34 ($J''=5/2$)	27543,71 ($J''=5/2$)	26771,64 (5/2)	26091,14 (5/2)
$^9R_{12}$	28420,62 ($J''=3/2$)	27549,43 ($J''=3/2$)	26776,74 (3/2)	26095,05 (1/2)
$^0P_{12}$	28413,22 ($J''=3/2$)	27542,31 ($J''=3/2$)	26769,71 (3/2)	26088,41 (3/2)

$^2\Pi_{1/2}(a)$ $\Delta\nu = p(J+1/2)$

Λ-удвоен.

$^2\Pi_{3/2}(a)$ $\Delta\nu = [p/\gamma^2 + 2q/\gamma](J-1/2)(J+1/2)(J+3/2)$ Steinschelberg. Ph.R., 1929, 34, 66.

Mulliken R. S.

Ulen. Rev. Mod. Phys. 1932, 4, 51

52

O_2^+; м.п.

Tate J. T., Smith P. T.

Uen. Phys. Rev. 1932, 39, 270

49 O_2^+, ch. n., 1. p.

O_2^+ 8 1933

Mulliken R.S., Stevens D.S.

Phys. Rev., 1933, 44, 720

Новые полосы O_2^+. Энергия диссоциации O_2^+ и ионизационный потенциал O_2

$D = 6{,}45 \pm 0{,}1$ эв. $J = 12{,}2 \pm 0{,}1$ эв. для 2ой отриц. системы

Исправлена нумерация Elsworth'a и Hopfield'a

Источник - разрядная трубка

Кванты: 2ой отрицат

15,0	48536	1,13	маск	11,1	44559	3,0	19972				
	48334		17606		44375	2,0	18878				
14,0	48042	1,14	16381	0,10	21368	1,0	17751				
	47824		маск		21177	0,0	16589				
13,0	47520			1,11	20714	0,1	15574				
	47329				20496	0,2	14581				
12,0	46383			0,11	19855	0,3	13606				
	46197				19655	0,4	12669				
				0,12	18367						
					18182						

1ой отрицат.

$B'' = 1{,}592 - 0{,}009v$

Вр - 5462 - 1

33.80

✓ 1935

O_2^+

Bozoky L., Schmid R.

Phys. Rev., 1935, 48, 465

Additional 1ый отрицат. сист. полос кислорода

В.г. разряд

v' \ v''	0	1	2	3	4
0	16589	15575	14581	13606	12669
1	17751	16736	15741		
2	18878	17860	16871		
3	19972	18953	17959	16992	
4				18043	17097

(2,2) набл. Steubing Ann. Phys. 1910 31, 553

(2,0), (1,0), (0,0), (0,1) и (0,2) измерены раньше Mulliken, Stevens

(3,0), (0,3), (0,4)

Price W.C., Collins

Ulen.

Phys. Rev. 1935, 48, 714

55.

O^+_2, m.n., l.p.

1937

O_2^+

Bozorth L.

Z. Phys., 1937, 104, 275

Вращательный анализ. $^2\Pi \to {}^2\Pi$-полос O_2^+

Высокочастотн. разряд. Решетка с $D = 1{,}2$ Å/мм, 6,5 м

$B_e' = 1{,}0617$ $B_e'' = 1{,}6722$

$\alpha_1' = 0{,}01906$ $\alpha_1'' = 0{,}01984$

$\alpha_2' \geqq 0{,}000195$ $r_e'' = 1{,}21$ Å

$r_e' = 1{,}406$ Å

По Stevens и Mulliken:

3829,5 0,7
3706,0 1,7
3602,6 0,6
3492,9 1,6

λ 4363,1 0,9
λ 4399,6 0,9
λ 4081,7
4113,8 0,8
λ 3299,6
3220,8 1,5
λ 2580,8
2593,8 5,2
λ 2532,7
2545,3 6,2

λ 2381,0
2392,1 7,1
λ 2343,0
2353,8 8,1

Данные табл. вращ. анализ и полн. разл.

$$B'_v = 1{,}0617 - 0{,}01906\,(v+1/2) - 0{,}000195\,(v+1/2)^2$$

1937

O_2^+

b-a

Nevin T. E.

Nature, 1937, 140, 1101

Вращательный анализ полос O_2^+ в видим. обл.

21 фт. решётка. Разряд O_2+He

λ5632 (1,0) 4 компоненты в 39 ветвях $^4\Sigma_g^- \to {}^4\Pi_u$

λ6026 (0,0)

λ6419 (0,1)

Расщепл $^4\Pi_{1/2} - {}^4\Pi_{1/2}$ increasing с J во всех случаях и оч мало в $^4\Pi_{3/2}$ и $^4\Pi_{5/2}$ сост. Тонк. структ. $^4\Sigma$ совпад. с формой вида $\varepsilon = 0{,}146$ и $\gamma \sim 0$.

$A = 46{,}9$;

$B_e' = 1{,}292$ $B_e'' = 1{,}108$

$\alpha_e' = 0{,}027$ $\alpha_e'' = 0{,}018$

$r_e = 1{,}274$ Å $D_e' = -6 \cdot 10^{-6}$ $D_e'' = -5 \cdot 10^{-6}$ $r_e = 1{,}346$ Å

V

O_2^+

1938

Nevin T.E.

(?) 45

Phyl. Trans. roy. Soc. A, 1938, 237, 47

Вращательный анализ первой отри-

0,1 λ6438 цательной системы полос шилорокс

0,0 λ6026 В стримат. свечении разряда через O_2 при низк. дав.

1,0 λ5632

2й порядк. 21 фут решетки $D = 1,22$ Å/мм

	$^4\Sigma$	$^4\Pi$	
$v=0$	$B_0 = 1{,}2763$ $D_0 = -5{,}92\cdot10^{-6}$	$B_0 = 1{,}1057$ $D_0 = -4{,}76\cdot10^{-6}$	$Y \sim 43{,}8$ $A \sim 48{,}0$
$v=1$	$B_1 = 1{,}2546$ $D_1 = -6{,}30\cdot10^{-6}$	$B_1 = 1{,}0811$ $D_1 = -4{,}75\cdot10^{-6}$	$Y \sim 44{,}4$ $A \sim 48{,}0$
	$B_e = 1{,}2871$ $D_e = -5{,}73\cdot10^{-6}$ $\alpha_e = 0{,}0217$ $\beta_e = -0{,}38$ $r_e = 1{,}2732\,Å$ $\varepsilon = 0{,}1487$ $\gamma = 0{,}00033$	$B_e = 1{,}1046$ $D_e = -4{,}76\cdot10^{-6}$ $\alpha_e = 0{,}0157$ β_e от. мало $r_e = 1{,}3743\,Å$	

$^4\Sigma$

$$f_1(K) = -\frac{3}{2}\varepsilon\left(1 - \frac{3}{2K+3}\right) + 3\gamma K$$

$$f_2(K) = +\frac{3}{2}\varepsilon\left(1 + \frac{3}{2K+3}\right) + \gamma(K-3)$$

$$f_3(K) = +\frac{3}{2}\varepsilon\left(1 - \frac{3}{2K-1}\right) - \gamma(K+4)$$

$$f_4(K) = -\frac{3}{2}\varepsilon\left(1 + \frac{3}{2K-1}\right) - 3\gamma(K+1)$$

O_2^+ omm 5214 (& Manke Kovacs) 1940

Budo A. et al

Zeitschr. für Phys. 116 1940,

116, N 11-12, 693-700

Intensitätsverteilung in

der Quartett- Dublett- Banden!

1940

O_2^+

Nevin T. E.

Proc. roy. Soc. A, 1940, 174, 371

Вращательный анализ первой отрицательной системы кислорода II

Разряд в смеси He и O_2, в полом катоде

Разрш. сила прибора ~100000. 2-й и 3-й порядок решетки

Исслед 2,0 и 0,2

v' \ v''	0	1	2
0	16666,74	15651,82	14657,67
1	17829,34		
2	18957,77		

$$\nu = 16587,88 + 1196,77(v'+\tfrac{1}{2}) - 17,09(v'+\tfrac{1}{2})^2 - 1035,69(v''+\tfrac{1}{2}) + 10,39(v''+\tfrac{1}{2})^2$$

Расщепл. описывается (а не по Brandt'у и Budo, $\boxed{\text{знаки}}$ ±

$$F_1(J) = B_v\left[J(J+1) - \tfrac{3}{2}\left\{y_1 + 4J(J+1)\right\}^{1/2}\right] + D_v\left(J - \tfrac{3}{2}\right)^2\left(J - \tfrac{1}{2}\right)^2$$

$$F_2(J) = B_v\left[J(J+1) - \tfrac{1}{2}\left\{y_1 + 4J(J+1)\right\}^{1/2}\right] + D_v\left(J - \tfrac{1}{2}\right)^2\left(J + \tfrac{1}{2}\right)^2$$

$$F_3(J) = B_v\left[J(J+1) + \tfrac{1}{2}\left\{y_1 + 4J(J+1)\right\}^{1/2}\right] + D_v\left(J + \tfrac{1}{2}\right)^2\left(J + \tfrac{3}{2}\right)^2$$

$$F_4(J) = B_v\left[J(J+1) + \tfrac{3}{2}\left\{y_1 + 4J(J+1)\right\}^{1/2}\right] + \alpha + \beta J + D_v\left(J + \tfrac{3}{2}\right)^2\left(J + \tfrac{1}{2}\right)$$

$y_1 = Y(Y-4)$; $Y = A/B_v$; α и β - пост

$\Delta f_{21}(K) = 3\varepsilon - 3y - 2yK$

$\Delta f_{34}(K) = 3\varepsilon - Y + 2yK$

v	ε	Δf_{21}	Y	Δf_{34}
0	0,4258		-0,0005	
1	0,4333		-0,0007	
2	0,4247		-0,0003	
0	0,4448	-0,0003		
1	0,4476	-0,0001		
2	0,4265	+0,0003		

	$v''=0$	$v''=1$	$v''=2$
α	-0,99	-0,66	-0,75
β	+0,038	+0,027	+0,034
A	-47,95 -47,99	-47,93 -47,99	-47,92 48,01

$Y_2 = -45,02$
$A_1 = -47,96$
$A = -47,96$

$Y_1 = -47,36$
$A_0 = -47,97$

$Y_0 = -43,74$

	$^4\Sigma$	$^4\Pi$
$B_0' =$	1,27626	1,09681
$D_0 =$	$-5,91\cdot10^{-6}$	$-4,83\cdot10^{-6}$
$B_1 =$	1,25470	1,08099
$D_1 =$	$-6,07\cdot10^{-6}$	$-4,73\cdot10^{-6}$
$B_2 =$	1,23213	1,06531
$D_2 =$	$-6,28\cdot10^{-6}$	$-4,64\cdot10^{-6}$
$B_e =$	1,28729	1,10466
$D_e =$	$-5,81\cdot10^{-6}$	$-4,88\cdot10^{-6}$
$\alpha_e =$	0,02206	0,01575
$\beta_e =$	$-0,185\cdot10^{-6}$	$+0,0950\cdot10^{-6}$
$r_e =$	1,27314 Å	1,37438

ОХН М5

O_2^+

В-а

18

1941

Nevin T.E., Murphy T.

Proc. Roy. Irish Acad. A, 1941, 46, 169

Анализ (0,3)-полосы 1ой отрицат. сист. O_2^+

$D = 1{,}25$ Å/мм $\lambda 7348$ Å $^4\Sigma_g^- - {}^4\Pi_u$

$v''=3$ $\nu_0 = 13684{,}02$ $B_3'' = 1{,}05027 \pm 0{,}00002$

$13683{,}95$ $1{,}04956$

$D_3'' = -5{,}04 \cdot 10^{-6}$

$-4{,}54 \cdot 10^{-6}$

2 знач. цифр. из-за метода расчета

Zbl. 43 II. 298

Вр-279-I

1941

O_2, O_2^+

Tanaka Y, Takamine T.

Phys. Rev, 1941, 59, ~~613~~ 771

Колебательная структура $^4\Sigma_g^-(O_2^+) \leftarrow {}^3\Sigma_g^-(O_2)$

серий Ридберга

λ 740-660 Å

λ		ν_{00}
732,22 Å	0,0	146 548 cm^{-1}
725,98 Å	1,0	147 705 cm^{-1}
720,07 Å	2,0	148 831 cm^{-1}

$J(O_2^+ b^4\Sigma_g^-) = 18,08 \pm 0,01$

$\Delta G_{1/2} = 1157$ Совпад с 1162

$\Delta G_{3/2} = 1126$ 1127

из пост. $b^4\Sigma_g^-(O_2^+)$

1942

O_2, O_2^+

Tanaka Y., Takamine T.

Sci. Pap. Inst. phys.-chem. Res., Tokio, 1942, 39, 437

Колебательная структура $^4\Sigma_g^-(O_2^+) \leftarrow {}^3\Sigma_g^-$ серии Ридберга O_2

3м. вакуумн. спектрограф с решеткой

$J(O_2^+ b^4\Sigma_g^-) = 18{,}079 \pm 0{,}004$

(0,0): $\nu = 146548\ cm^{-1}$; $\lambda = 682{,}37\ Å$; $E = 18{,}079\ eV$

(1,0): $\nu = 147705\ cm^{-1}$; $\lambda = 677{,}03\ Å$; $E = 18{,}222\ eV$

(2,0): $\nu = 148831\ cm^{-1}$; $\lambda = 671{,}90\ Å$; $E = 18{,}360\ eV$

~~281 421 1101~~

(0,0)	163802 ± 50 cm^{-1}	= 20,207 eV ± 0,01	$\omega_e = 1159\ cm^{-1}$
(1,0)	164907	20,343	$\omega_e x_e = 27\ cm^{-1}$
(2,0)	165958	20,473	

OXH

1943

O_2^+

b-a

Singh N.L., Lal L.

Science and Culture, 1943, 9, 89

O_2^+ | OMM 5217 | (Guanke Kovacs) 1944

Budo A., et al.

Phys. Z. 1944, 45, 122-6.

Über die Λ-Verdopplung der $^4\Pi$ terme.

v

1948

O_2^+

A - X

Lal L.

Phys. Rev., 1948, 73, 255

Новые полосы во второй отрицательной или УФ системе полос молекулы O_2^+

Получ. в в.ч. разряде (кислород при напр. KHzD)

Фотогр. на малом призменн. спектрографе Hilger'a

v' \ v''	0	1	2	3	4	5	6
0					(2,5)	29393? 207	27710? 538
1				33735 —	32009 31803	30303 084	28611 420
2		38196 001	36365 182	34572 380	32841 628	31131 30938	— 29254
3		38990 784	37167 36954	35409 197	33657 463	31940 747	30259 —
4		39768 564	37960 765	36182 35998	34447 239	32750 550	
5		40539 340	38732 551	36954 753			
6	43120 42900	41279 079	39473 283	37682 491			
7	43813 613	41986 788	40174 39982	38412 196			

O_2^+

Франсонъ Л. М.

Phys. Rev., 79, 619 (1950)

Аномальное вращение молекул и температура верхней атмосферы

Вычислен анализ структуры полосы 8,1 системы $^2\Pi_u - ^2\Pi_g$ в молекуле с данными Стевенса найдено

$B_0' = 1{,}051 \quad \alpha = 0{,}023$

$B_0'' = 1{,}623 \quad \alpha = 0{,}015$

1950

O_2^+

Feast M.W.

Proc. Phys. Soc, A63, 557

Новые полосы второй отрицательной системы O_2^+; замечания по эмиссионным спектрам O_3 и OII.

Исследовался спектр безэлектродного разряда в чистом кислороде

В обл 2000-7000 Å использ. средний кварцевый спектрограф Hilger E-2. В обл. 6000-10000 Å - призменно-решетчатый прибор.

В обл 2000-6000Å располож. отмечены в прямые второго отрицат. спт. полос с двойными концами. Распредел. интенсивности в согласии с теорией Pillow, (неопубл)

Полос спт. исследовались:

1. Johnson, 1924, Pr. Roy. Soc A105, 583
2. Ellsworth, Hopfield, 1927, Phys. Rev, 29, 74
3. Stevens, 1931, Phys. Rev, 38, 1291
4. Mulliken, Stevens, 1933 Phys. Rev, 44, 720
5. Lal, 1948, Phys. Rev, 73, 255

Полосы отнесены к переходу $A^2\Pi_u \to X^2\Pi_g$ с дублетным расщеплением ~200см⁻¹ ($r_e' = 1{,}41$Å; $r_e'' = 1{,}14$Å). Измерен ряд кантов, представл. в таблице.

$$\nu = \begin{matrix}38596\\38796\end{matrix} + \{898{,}9(v'+\tfrac{1}{2}) - 13{,}7(v'+\tfrac{1}{2})^2\} - \{1876{,}4(v''+\tfrac{1}{2}) - 16{,}53(v''+\tfrac{1}{2})^2\}$$

ф-ла по нач. Jevons'a (1932) и Birge (1929), с поправками [2].

ν	ν''
39013	11,4 d
38615	10,4 K
38403	10,4 d
37333	8,4 K
37143	8,4 d
34955	7,5 K
34745	7,5 d
34040	6,5 d
33268	
33072	7,6 K
32564	7,6 d
32367	6,6 K
32301	6,6 d
32108	6,7 K
31625	8,7 d
30991	7,7 K
	11,9 K
[illegible]	
[illegible]	
30689	8,8 K
30178	5,7 K
29984	5,7 d
29811	7,8 d
28844	11,0 K
28225	9,0 K
28021	9,0 d
27367	8,0 d
27016	3,8 K
25445	5,10 K
25251	5,10 d
21002	5,13 K
20815	5,13 d
19595	5,14 K
19439	5,14 d

1950

O_2^+
спектр
распред.
интенсив.
расчет

Pillow M.E.

Proc. Phys. Soc., 1950, 63A, 940

Распределение интенсивности в системах полос O_2 и O_2^+

O_2 - сист. Шуман-Runge и Герцберга

O_2^+ - 2Σ отрицат. сист.

C.A, 1951, 14201

Haugstrum H.D.

Ulen

Rev. Mod. Phys. 1951, 23, 185

66

O_2^+, cu.n, 1.P.

1953

O_2^+

Inn E.C.Y.

Phys. Rev, 1953, 91, 1194

Фотоионизация молекул в вакуум. УФ.

O_2	12,04 ± 0,01
NO	9,23 ± 0,02
NH_3	10,13 ± 0,02
SO_2	12,42 ± 0,06
C_2H_4	10,47 ± 0,02

Проводится сравнение с ионизационными потенциалами по методу электр. удара и спектр. линии

O_2^+ отин 5211 (в начке Kovacs) 1955

Budo A., et al
Experiment. Techn. der Phys. 1955, Sonderheft Spektroskopie, 1-5.

Über den $^4\Pi$ Zustand des O_2^+ molekülis.

✓ отмечен 5179 (в книге Kovacs) 1955

O_2^+ Budo A., Kovacs J.

Acta Phys. Acad. Sci. Hung., 1955, 4, 273

$^4\Pi$-состояние молекулы O_2^+. (немецк.)

Мультипл. расщепл. представл. как ф-ции вращат. квант. числа отличается от ф-ции Ван Флека. Это объясняется возмущением сост. $^4\Pi$ двумя $^2\Pi$-состояниями, что дает совпадение с экспериментом. Отсюда можно вычисл. приближ. положе и мультиплетность терма $^2\Pi$.

По предположн. авторов новое $^2\Pi^c$-сост. лежит ~ 8500 см$^{-1}$ над $^4\Pi_{v=0}$ уровнем или на ~1700 см$^{-1}$ над $A^2\Pi$. мультиплетность ~ −104 см$^{-1}$

C. A., 1955, 11395f

$6^2\pi^4\pi\ X^2\Pi_g$ $T = 12{,}3$ э-в $D = 18{,}7$

$6^2\pi^3\pi^2\ a^4\Pi_u$ $T = 16{,}1$ э-в —"—

$6^2\pi^3\pi^2\ A^2\Pi_u$ $T = 17$ э-в —"—

$6^2\pi^3\pi^2\ {}^2\Pi_u$ $T = 17{,}2$ э-в —"—

$6\pi^4\pi^2\ b^4\Sigma_g^-$ $T = 18{,}1$ э-в $D = 20{,}7$ э-в

O_2^+

1955

Budó A., Covács J.,
J. Chem. Phys., 1955, 23, 751.
О $^4\Pi$ состояниях молекулы O_2^+

Спектры 5177
Бэнкер Кочнер

O_2^+

O_2^+ A. Budó, J. Kovacs 1955

Magyar Fys. Folyóirat 3, 67,

Исслед. $^4\Pi$ состояния O_2^+

CA 53

1959 27773 f.

Якименко, Л. М.

Успехи в области электрохимического получения хлора. Хим. наука и пром-сть, т. 3, № 4, 1958, с. 424-431. Библиогр: 42 назв.

16-10б

1955

O_2^+

Jarmain W. Fraser P.,
Nicholls R.
Astrophys. J. 122, 55-61

Вероятности переходов
в колеб. спектре
N_2, NO, O_2, O_2^+, OH, CO
и CO^+.

O_2^+

(D_0)

BΦ- 187-T

1956

Watanabe K.,
Marmo F.F.,

J. Chem. Phys., 1956, V. 25, N 5 pp 965-971

O_2^+

Omnicu 3171. 1957

G. Herzberg

Mem. Soc. Roy. Sci. Liège, 1957, 18, 397-418

(Ds)

1958

D.C. Frost, C.A. Mc Dowell.

Ulen.

J. Amer. Chem. Soc.
1958, 80, 6183

65

O_2^+, m.n.

O_2^+ (м.н.) XI 1918 1959

Kovacs I.,
Proc. Intern. Meeting Mol.
Spectr. 4th Bologna, 1959,
1, 251-54

Lo

0+ 2 отмен 5180 (в папке Ковача) 1959

+ 6Б95. Роль спин-спинового взаимодействия в мультиплетном расщеплении состояния $^4\Pi$ молекулы O_2^+. Kovács I. The role of the spin-spin interaction in the multiplet splitting of the $^4\Pi$ state of the O_2^+ molecule. «Acta phys. Acad. scient. hung.», 1959, 10, № 3, 255—258 (англ.; рез. русск.).—Показано, что спин-спиновое взаимодействие вызывает в ионе O_2^+ те же самые отклонения от обычного мультиплетного расщепления состояния $^4\Pi_u$, что и спин-орбитальное взаимодействие, которым первоначально и объяснялись наблюдаемые отклонения. Таким образом эти отклонения можно объяснить обоими типами взаимодействий. А. Мальцев

Расстояние между 2 возбуждающими $^2\Pi$ состояниями, т.е. между $A^2\Pi$ и неизвестным $2^2\Pi$ состояниями около 5700 см$^{-1}$, а не 1700 см$^{-1}$ как предполагалось

ж.1961.6

O_2^+

1961

New bands in the second negative system of O_2^+. J. Byrne (Univ. Coll., Dublin, Ire.). *Proc. Phys. Soc.* (London) 78(504), 1074–5(1961). In searching for new transitions of the O spectrum, an extension of the 2nd neg. system was observed. The measurements of these new bands were reported.

P. V. Hoffman

C.A. 1964. 60. 5
4948 e

O_2^+

1961

10 B101. Новые полосы во второй отрицательной системе кислорода. Byrne J. New bands in the second negative system of oxygen. «Proc. Phys. Soc.», 1961, 78, № 5, Part 2, 1074—1075 (англ.)

Исследован спектр O_2^+ в области 400—7000 Å возбуждаемый ВЧ-разрядом в чистом кислороде. Сравнительно с известными, новых систем полос O_2^+ не обнаружено. Зарегистрированные новые полосы в области 1900—7000 Å представляют продолжение 1-й отрицат. системы. Приведен анализ спектра. В свете полученных данных обсуждаются различные интерпретации спектра разряда в кислороде. Ю. Мазуренко

РЖФ 1962
10 B 101

O_2^+ Carroll P.K. 1961

Proc. Phys. Soc. 78, N504, 1074

Новые полосы второй отрицательной системы кислорода.

Спектр O_2^+ изучен в области 400–7000Å с целью обнаружения новых систем. Только не найдены, но обнаружены ряд новых полос II отр. системы. Источник – высокотем-

тонкий разряд через чистый O_2. Вакуумный спектрограф (f = 3,0 м., 2,5 А/мм). У.у. и выделяли обл. на Хилгеде, кроме того снимался другим поляс λ 4350 Å во II порядке 21 фт. решетки. Производился замер волн и отнесение полос. Отмечается, что полосы отнесенные Фестом к O_2^+ или иону O^+ принадлежат молекуле O_2^+. Обнаружена сложная структура спектра в обл. 1870 Å, т.е. вблизи диссоциац. предела. Отмечается, что применение прибора с большей дисперсией позволит уточнить $D_0(O_2^+)$

O_2^+

1961

11 B193. Возбуждение первой отрицательной системы O^+_2 пучком протонов в воздухе и кислороде. Ferguson H, I. S., Nicholls R. W., Herman L. Excitation of the first negative system of O^+_2 by a proton beam in air and oxygen. «Publ. Groupem. avancem. méthodes spectrogr.», 1961, jan-juin, 105—107 (англ.; рез. франц.)

Проведено предварительное исследование первой отрицат. системы полос O^+_2 ($b^4\Sigma^g - a^4\Pi_u$) в области 2300—7000 Å, возбуждаемой пучком протонов с энергией 40 *кэв* при давлениях 10^{-1} и 10^{-3} *мм* рт. ст. Кроме указанной системы полос, наблюдается испускание N^+, O^+, N^+_2, а также NH, OH, H I. При исследованных давлениях пучок протонов резко ограничен и испускание происходит в центре пучка. Это указывает на первичное возбуждение свечения протонами с обменом зарядом по схеме: $H^+ + O_2\ (X^3\Sigma^-_g) \rightarrow H^* + O^+_2\ (b^4\Sigma_g)$. Были проведены аналогичные опыты с N_2, H_2, C_2H_2 и H_2O. В последнем случае наблюдалось интенсивное испускание полосы OH у 3064 Å. Библ. 16 назв. Г. Неуймин

ф. 1962. 11 В

O_2^+

1961

Excitation of the first negative system of O_2^+ by a proton beam in air and oxygen. L. Herman, H. I. S. Ferguson, and R. W. Nicholls (Univ. Western Ontario, London). *Can. J. Phys.* 39, 476(1961).—The excitation of the bands of the O_2^+ 1st neg. ($b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$) system by 40-e.kv. proton beams in air and O at low pressures is reported. The resulting emission spectra were investigated at 0.1–0.001 mm., 2300–7000 A. The leading 2 or 3 bands in each of the $\Delta v = -2, -1$, and 0 sequences of the N_2^+ 1st neg. ($B^2\Sigma - X^2\Sigma$) system, and of the $\Delta v = -1, 0$, and $+1$ sequences of the O_2^+ 1st neg. ($b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$) system, are excited together with lines of N II, O II, and H I. In air, the O_2^+ bands are much weaker than those of N_2^+. For example, the N_2^+ (0,0) band is easily recorded in a few sec., while the O_2^+ (0,0) band requires several hundred sec. Measured rotational temps. of the N_2^+ bands are close to room temp., 0.1–0.01 mm. The O_2^+ bands in pure O, on the other hand, are excited very strongly. About 60 sec. exposure is sufficient to record them photographically. H. H. Jaffé

C.A. 1961. 55. 13. 12028ab

1961

O_2^+

$6\,^4\Sigma_g^- - a\,^4\Pi_u$

Herman L., Ferguson H. I. S.,
Nicholls R. W.,
Canad. J. Phys., 1961, 39, 476 (№ 3)

Возбуждение I отриц. системы O_2^+ пропусканием разряда в воздухе и кислороде.

Чо кое 10^{-1} - 10^{-3} мм рт. ст. обн. 2300 - 2000 A, кроме спектр N^+, O^+, N_2^+, O_2^+ системы $\Delta v = -2$, -1, 0 N_2^+ [redacted] ($B\,^2\Sigma - X\,^2\Sigma$), $\Delta v = -1$, 0, $+1$ O_2^+ ($b\,^4\Sigma_g^- - a\,^4\Pi_u$).

нашел O_2^+ наличие также N_2^+ в воздухе и очень сильно в кислороде. Вероятно — западно механизм

$$H^+ + O_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow H^* + O_2^+(b^4\Sigma_g^+)$$

O_2^+

отнесен 5178
в папке Котаев

1962

3 Д55. О роли спин-спинового взаимодействия в мультиплетном расщеплении $^4\Pi$-состояния молекулы O_2^+. Kovács I. The role of the spin-spin interaction in the multiplet splitting of the $^4\Pi$ state of the O_2^+ molecule. «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 1». Oxford — London — New York — Paris, Pergamon Press, 1962, 251—254. Discuss., 254 (англ.)

См. РЖФиз, 1960, № 8, 19803.

ф.1963.3Д

O_2^+

omen. 5178

1962

Branne Kovacs

Chemp

The role of the spin-spin interaction in the multiplet splitting of the $^4\pi$ state of the O_2^+ molecule. I. Kovacs (Polytech. Univ., Budapest, Hung.). *Proc. Intern. Meeting Mol. Spectry., 4th, Bologna, 1959* 1, 251–4(Pub. 1962). The spectrum of O_2^+ is explained by allowing for 2 perturbing effects; the spin-spin interaction and the spin-orbit interaction of two $^2\pi$ terms. Assuming that the const. of the 1st for the $^4\pi_u$ state is approx. equal to that in the $^4\Sigma^-_g$ state, the hitherto unobserved $^2\pi_u$ term is found to be ~5700 cm.$^{-1}$ from the $A^2\pi_u$ term, instead of 1700 cm.$^{-1}$, as previously reported. A. L. McClellan

C.A. 1963 · 59 · 5

4678 d

2 Д72. **Об интерпретации аномального расстояния между компонентами мультиплета состояния $^4\Pi$ молекулы ионизованного кислорода.** Kovacs I., Weniger S. Sur l'interprétation de la séparation anomale des composantes du multiplet de l'état $^4\Pi$ de la molécule d'oxygène ionisée. «J. phys. et radium», 1962, 23, № 6, 377—380 (франц.; рез. англ.)

Изучение вращательной структуры полос первой отрицат. системы $^4\Sigma_g^- - ^4\Pi_u$ молекулы O_2^+ показывает, что зависимость расстояний между компонентами мультиплета $^4\Pi$ от квантового числа J не согласуется с теорией Брандта (Brandt W. H. «Phys. Rev.», 1936, 50, 778). Это расхождение объясняется спин-орбитальным и спин-спиновым взаимодействиями. Получены ф-лы для разностей между возмущенными и невозмущенными уровнями энергии компонент мультиплета. Эти разности выражаются через константы названных выше взаимодействий и через элементы матриц преобразования энергии от случая a Гунда к случаю, промежуточному между случаями a и b Гунда. По полученным ф-лам построены кривые зависимости разностей $\Delta F'_{ik} - \Delta F_{ik}$ от $J+1/2$ для значений колебательного квантового числа

1962

Ф. 1963

Оптика 5184 Физика Колеб.

$v''=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Сопоставление этих кривых с опытными данными позволяет найти численные значения констант взаимодействия для всех перечисленных значений v''.

М. Ковнер

O+ 2

Omnicu 5789 1962

в name Kovacs

Interpretation of the anomalous splitting of the multiplet components for the $^4\Pi$ state of ionized oxygen. I. Kovacs and S. Weniger (Polytech. Univ., Budapest, Hung.). *J. Phys. Radium* 23, 377–80(1962). The multiplet splitting in the $^4\Pi_u$ state of the O_2^+ mol., which is a function of the rotational quantum no., deviates from the formulas derived by Brandt (*CA* 31, 2095[1]). It can be interpreted as a perturbation of the $^4\Pi$ state by the $^2\Pi$ states, taking into account the spin-spin interaction. H. Rosenwasser

C.A. 1962. 57. 10.
11972 bc

1962

O_2^+

14 Б91. По поводу интерпретации аномального расстояния между компонентами мультиплета состояния $^4\Pi$ ионизованной молекулы кислорода. Kovacs I., Weniger S. Sur l'interprétation de la séparation anomale des composantes du multiplet de l'état $^4\Pi$ de la molécule d'oxygène ionisée. «J. phys. et radium», 1962, 23, № 6, 377—380 (франц.; рез. англ.)

Наблюдаемое расстояние между компонентами мультиплета $^4\Pi_u$ молекулы O_2^+, зависящее от вращательного квантового числа I, не согласуется с теорией Брандта (Brandt W. H. «Phys. Rev.», 1936, 50, 778). Расхождения хорошо объясняются при учете возмущения состояния $^4\Pi_u$ состоянием $^2\Pi_i$, причем во внимание принимаются спин-спиновое и спин-орбитальное взаимодействия. Расчет показывает, что в согласии с экспериментом, несмотря на сильное возмущение самих термов, разности между возмущенными и невозмущенными компонентами мультиплетов весьма малы для всех значений колебательного квантового числа v от 0 до 6. В. Дианов-Клоков

X·1963·14

O_2 (J) 1962

O_2^+ ($\mathcal{E}_i$) XI 2152

Namioka T., Ogawa M., Tanaka Y.,

Proc. Intern. Symp. Mol. Struct. Spectry

Tokyo, 1962 (B208) 4 pp 6 refs

The $b^4\Sigma_g^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ Rydberg series

of the oxygen molecule.

CA, 1964, 61, N4, 3804 b

(1962

Wallace Z.

Шен.

Astrophys. J. Suppl.
1962, 7, 165

61

O_2^+, м.п.

O_2^+

1962

12 В296. **Исследование спектра молекулярного иона кислорода в ближней ИК-области.** Weniger S. Etude du spectre de la molécule d'oxygène ionisée dans le proche infra-rouge. «J. phys. et radium», 1962, 23, № 4, 225—237 (франц.; рез. англ.)

Изучена первая отрицат. система $^4\sum_g - {}^4\Pi_u$ молекулярного иона кислорода, возбужденного в разряде постоянного тока с полым катодом при низкой т-ре. Исследование системы простирается на фотографич. ИК-область до 8780 Å. Проанализировано несколько новых полос, принадлежащих последовательностям $v' - v'' = -3, -4, -5$. Уточнены спектроскопич. константы B_v'' и ν_0 для изученного перехода в молекуле O_2^+. Ф. Ортенберг

Ф. 1962. 12В

O_2^+

1962

3Б81. Исследование спектра ионизованной молекулы кислорода в ближней инфракрасной области. Weniger S. Etude du spectre de la molécule d'oxygène ionisée dans le proche infra-rouge. «J. phys. et radium», 1962, 23, № 4, 225—237 (франц.; рез. англ.)

Исследован спектр излучения ионизованного кислорода O_2^+, отвечающий переходу $^4\Sigma_g - {}^4\Pi_u$ (первая отрицательная система) вплоть до 8800 А. Источником служила разрядная трубка с полым катодом, наполненная чистым кислородом при давл. 0,07—0,3 *мм* рт. ст. и охлаждаемая жидким азотом. Дисперсия спектрографа с решеткой, применявшегося при детальном исследовании полос, составляла 3 А/*мм*. Обнаружены новые полосы, отвечающие переходам $v' - v'' = -3, -4, -5$. Приведены таблицы наблюденных линий и результаты анализа. В. Дианов-Клоков

X. 1963. 3

O_2^+

1962

Near-infrared spectral study of the ionized oxygen molecule. S. Weniger (Observatoire Paris-Meudon). *J. Phys. Radium* 23, 225–37(1962). A d.c. discharge was used at low temp. to obtain the 1st neg. system $^4\Sigma_g - {}^4\Pi_u$ of the ionized O mol. Some new rotational bands in the sequence $\nu' - \nu'' = -3, -4$, and -5 were analyzed and mol. consts. detd. H. Rosenwasser

C.A. 1962 · 57 · 7
8034 f

1963

O_2^+

10 Д129. Электронные состояния полос испускания системы Хопфильда в кислороде. LeBlanc Francis J. Electronic states of Hopfield's oxygen emission bands. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 2, 487—488 (англ.)

Выполнен спектроскопич. анализ трех полос системы Хопфильда, полученных в разряде в смеси $He+O_2$. Сравнение полученных и известных спектроскопич. констант O_2^+ показывает, что полосы принадлежат молекуле O_2^+ и соответствуют переходу между состоянием $b^4\Sigma_g$ O_2^+ и верхним состоянием предположительно обозначенным $c^4\Sigma^-$, расположенным на 24,56 *эв* выше основного состояния и имеющим $B_v=1{,}557$ $см^{-1}$.

Ф·1963·10Д

O_2

1963

Electronic states of Hopfield's oxygen emission bands. Francis J. LeBlanc (L. G. Hanscom Field, Bedford, Mass.). *J. Chem. Phys.* 38, 487–8(1963). The Hopfield (*CA* 26, 3439) emission bands of O arise from a transition in the O_2^+ mol. The upper state is new, designated $c\ ^4\Sigma_u^-$, assuming an allowed transition, while the lower state is the known $b\ ^4\Sigma_g^-$ state. The single observed vibrational level of the $c\ ^4\Sigma_u^-$ state lies at 24.56 e.v. above the ground state of the O_2 mol. The rotational const. B of the upper state vibrational level has a value of 1.557 cm.$^{-1}$

CA

C.A. 1963 58.8
7515 be

O_2^+

6 Б46. Электронные состояния полос испускания Гопфильда для кислорода. LeBlanc Francis J. Electronic states of Hopfield's oxygen emission bands. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 2, 487—488 (англ.) 1963

Исследовано испускание полос Гопфильда от смеси He (14 *мм* рт. ст.) и O_2 (0,6 *мм* рт. ст.) в капилляре, находящемся в конденсированном разряде. Дисперсия кварцевого спектрографа составляла 1,5 А/*мм* в области 2100 А. Проведен вращательный анализ трех полос (2123; 2170; 2218А; предположительно они отнесены как 0—4, 0—5 и 0—6 соответственно). Полосы состоят из одиночных линий *P*- и *R*-ветвей, что позволяет интерпретировать переход как Σ—Σ. При сопоставлении полученных констант с известными для O_2 и O_2^+ удалось отождествить нижнее состояние полос Гопфильда с известным уровнем $b^4\Sigma_g^-$ молекулы O_2^+. Обнаружено новое верхнее состояние этой молекулы, предположительно обозначенное $c^4\Sigma_u^-$. Единственный наблюденный колебательный уровень этого состояния расположен на 24,56 *эв* выше основного уровня нейтр. мо-

см. м/об

X·1064·6

лекулы O_2; вращательная постоянная верхнего уровня $B=1{,}557$ *см*$^{-1}$. Высоко расположенный верхний уровень позволяет предположить, что в разряде происходит процесс $He^+(2S)+O_2(X^3\Sigma)\rightarrow He(1S)+O_2^+(c^4\Sigma)$, возможный вследствие того, что ионизационный потенциал He составляет 24,585 *эв*.

В. Дианов-Клоков

1963

O_2^{2+}
N_2^{2+}

Dorman F.H., Morrison J.D.
J. Chem. Phys., 1963, 39, 1906 (№ 7)
Потенциалы ионизации двойно заряженных кислорода и азота

I

$I(O_2^{2+}) = 36,3$ эв
$I(N_2^{2+}) = 42,7 \pm 0,1$ или $43,8 \pm 0,1$ эв

2 ч-б

O_2^+

1963

4 Д73. Потенциалы двукратной ионизации [молекул] кислорода и азота. Dorman F. H., Morrison J. D. Ionization potentials of doubly charged oxygen and nitrogen. «J. Chem. Phys.», 1963, 39, № 7, 1906—1907 (англ.)

Рассчитанные в работе (РЖФиз, 1962, 2В7) потенциалы двукратной ионизации двухатомных молекул хорошо совпали с эксперим. данными, за исключением кислорода. Очевидной эксперим. трудностью здесь является равенство отношения e/m для O_2^{2+} и O^+. С помощью изотопа $O^{16}O^{17}$, а также $N^{14}N^{15}$ показано, что правильно измеренные значения потенциалов двухкратной ионизации N_2 и O_2 находятся в хорошем согласии с вычисленными и составляют 36,3±0,5 *эв* для кислорода и 42,7±0,1 и 43,8±0,1 *эв* для двух состояний азота. Ю. Беляев

ф·1964·4Д

O^{2+} ?
O^{+}
g_i

1963

Gilmore F. R.

RAND Corp., Santa Monica, Calif.

Energy levels partition functions and fractional electronic populations for nitrogen and oxygen atoms and ions to 25,000° K.

(cou. N)

Gilmore F. R. 1963

D^{2+}

U.S. Dept. Com., Office Tech. Serv., AD 413,068, 40 pp.

Energy levels, partition functions, and fractional electronic populations for nitrogen and oxygen atoms and ions to 25000° K.

C.A. 1964. 60. 8774g

O_2^+; O_2 (м.и.) XI 1930 1963

Le Blanc F. J.,
J. Chem. Phys., 1963, 38, N2, 487-88

10

есть прим.

Nicholson A. J. C. 1963

Ulene. J. Chem. Phys. 1963, 39, 954

70 O_2^+, ch. n., I.P.

O_2^+

$b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$

спектр

X-1964-4

4 Б75. Интенсивности колебаний первой отрицательной системы полос O_2^+. Rao P. S. R. Vibrational intensities of the O_2^+ (first negative) bands. «Proc. Phys. Soc.», 1963, 81, № 2, 240—243 (англ.)

1963

Полосы излучения первой отрицательной системы O_2^+ ($b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$) получены в разряде переменного и постоянного тока, конденсированном разряде переменного тока и в разряднике с полым катодом. Кислород, полученный нагреванием перманганата калия, перед попаданием в разрядники пропускался через ловушки с KOH и P_2O_5. Спектры снимались на трехпризменном спектрографе с разрешением 50A *мм*$^{-1}$ при λ 6300A, причем входная щель устанавливалась достаточно широкой для размытия вращательной структуры. Полученные относительные интенсивности полос для упомянутых четырех способов возбуждения показывают, что в разряднике с полым катодом существуют наиболее благоприятные условия для появления полос с малыми квантовыми колебательными числами. Расчет эффективной колебательной т-ры по методу Пиллоу для этого случая приводит к значению 1900° К. Предполагается, что определение т-ры по интенсивности исследуемой системы полос в спектре свечения ночного неба привело бы к величине того же порядка. В. Дианов-Клоков

11

1963

3920

N_2^+; NO^+; N^+; O_2^+; O^+ (A.P.)

Paulson J.F., Mosher R.L.
Proc.Nat.Acad.Sci.India, 1963,
A33, N 4, 522-529

Production of ...

J

I-3129

O_2^+ (J) 1963

Heniger S.

Etude du spectre de la molécule d'oxygéne ionisée dans le proche infra-rouge. "J.phys.et radium", 1962, 23, N 4, 225-237 (фрагм.)

РЖ., 1963, 3,
5 81

10

1964

O_2^+ Brion C. E.

энергии возбуж. электрон. состояний

J. Chem. Phys., 1964. 40, 2995 (№ 10)

Ионизация кислорода „моноэнергетическими" электронами.

Определены ионизац. потенциалы O_2: 12,20 ± 0,05 (O_2^+, $^2\Pi_g$), 16,24 ± ± 0,03 (O_2^+, $^4\Pi_u$), 17,12 ± 0,04 (O_2^+, $^2\Pi_u$), 18,40 ± 0,03 (O_2^+, $^4\Sigma_g^-$) и 21,29 ± [illegible] 0,04 эв (O_2^+, ?), а также колебательные кванты O_2^+ в состоянии $^2\Pi_g$: 0,26 ± 0,02 (0-1),

0,25±0,02 (1–2) и 0,21±0,02 (2–3).

O_2^- (D_0 (см. ноci, ν_i) XI 1618 (1964

D_0(O-O) [в H_2O_2, O_2^+, O_2]

Creighton J. A., Lippincott E. R.,

J. Chem. Phys., 1964, 40, N6,

1779-80

20

O_2^+ Gilmore F. R. 1964

Кривые потенц. энергии

Contract AF 49(638)-700.

Potential energy curves for N_2, NO, O_2 and corresponding ions.

(см. N_2)

O_2^+ 1964

спектр

6 Д181. Спектры O_2 при соударениях с H^+. Hughes R. H., Ng D. K. W. Spectra induced by H^+ impact on O_2. «Phys. Rev.», 1964, **136**, № 5A, 1222—1224 (англ.)

Исследованы спектры испускания молекул O_2 при возбуждении соударениями с ионами H^+ (энергия 5—130 *кэв*). В спектре обнаружены серии испускания O_2^+ и O^+ и бальмеровская серия водорода. Определены поперечные сечения соударений (σ) для полос (0,0), (0,1), (1,0), (2,0), (3,1) и (2,1) перехода $b^4\Sigma—a^4\Pi$. Дана оценка значений σ для заселения уровней $v=0—3$ состояния $b^4\Sigma$ иона O_2^+. Также определены величины σ для возбуждения некоторых линий OII.

ф. 1965. 6Д

O_2^+

поперечные сечения возбуждения

1964

Spectra induced by H^+ impact on O_2. R. H. Hughes and D. K. W. Ng (Univ. of Arkansas, Fayetteville). *Phys. Rev.* 136(5A), 1222–4(1964)(Eng). Spectra induced by 5- to 130-kev. H^+ impact on O were observed in the visible region. Principal features are O_2^+, O^+, and H Balmer emissions. Abs. cross sections were detd. for excitation of the (0,0), (0,1), (1,0), (2,0), (3,1), and (2,1) bands of the $b^4\Sigma$–$a^4\Pi$ first neg. system of O_2^+. Cross sections for populating the v = 0, 1, 2, and 3 levels of the $b^4\Sigma$ state of O_2^+ were estd. Cross sections for exciting some O II were detd. RCPJ

C.A. 1965. 62. 2

1222 g

1964

O_2^+

Knof H., Mason E.A.,
Vanderslice J.T.

потенц.
кривые

J. Chem. Phys., 1964, 40, 3548 (NB

Взаимодействие энергий, поперечные сечения обмена зарядов и поперечные сечения диффузии для соударений $N^+ - N$ и
☒ $O^+ - O$. ~~(см. N_2^+)~~

O_2^+ ОИМИ 5212 (в нашем Kovacs) 1964

Kovacs J.

Acta Phys. acad. sci. hung.
1964, XVII, вып. 1-2, 67-74.

Некоторые новые результаты спектроск. исследований двухатомных молекул

J. W. McCowan, E. M. Clarke,
H. P. Hanson, R. F. Stebbings

Ulen.

Phys. Rev. Letters 1964, 13, 620

68

0^+_2, m.n., 1, P.

1964

O_2^+

R_0

21 Б47. Стабильность двухатомных кислородных образований. Tuck D. G. The stabilities of diatomic oxygen species. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1964, 26, № 9, 1525—1530 (англ.)

Рассмотрены следующие двухатомные образования из атомов кислорода: O_2^+, O_2, O_2^- и O_2^{2-}. Длины связей в этих мол. ионах соответственно равны 1,123; 1,207; 1,29 и 1,49 А. Энергии диссоциации этих же образований в том же порядке равны 149, 118, 84 и —125 *ккал/моль*; резкое уменьшение энергии связи вызвано увеличением антисвязывающего характера в этом ряду. Рассмотрены также геометрич. характеристики неорганич. соединений, содержащих пероксигруппы, координированные вокруг поливалентных атомов хрома и кобальта. В этих координационных соединениях связь О—О имеет длину 1,40—1,45 А. Обсуждается природа связи в таких соединениях с позиций донорно-акцепторных представлений.

С. Бацанов

Х.1965.21

$O_2^+, O_2, O_2^-, O_2^{2-}$

1964

The stabilities of diatomic oxygen species. D. G. Tuck (Univ. Nottingham, Engl.). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 26(9), 1525–30 (1964). The bond lengths in the species O_2^+, O_2, O_2^-, and O_2^{2-} are discussed in terms of the bonding. Values are derived for O_2^- and O_2^{2-}. The significance of this information in the formulation of inorg. complexes contg. such O species is discussed. RCJX

Gmelin Chalcogen

+½ nel

C. A. 1964 61 N-7, 7422 f.

Cairns R.B., Samson J.A.R.

Kogel H.C. Phys. Rev. 1965, 139, A 1403

209 ~~IPCO2~~ O_2^+ (m.X.)

O_2 ; O_2^+ (ξ_i, ω_i) XI 1606 1965

Codling K., Madden R. P.,
J. Chem. Phys., 1965, 42, N11,
3935-38

10 PX66

O_2^+

cuipp

Dufay M., Druetta M., 1965

Eidelsberg M.

C.R. Acad. Sci., 260, 1123.

Sur la luminescence de l'oxygene excitee par choc de particules accelerees sous 500 kev.

O_2^+

кривые потенц. энергии

отпрыск 3167

Gilmore F.R. 1965

J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer, 1965, 5, N2, 369.

(См. N_2) III

O_2^+

Judge D. L., 1965
Nessler C. L. (1965)
(USC-VAE UV-105, AD-631452)

Fluorescence spectra of the molecular ions O_2^+, N_2^+ and CO^+ excited by resonance ultraviolet radiation

+2

N66-27632 STAR

A

omm. 4556 1965

O_2^+

(Ч Чурбеа)

Kovacs J.

Rev. Roum. Chimie
1965, 10, 1175-81

(В наше Kovacs)

Rotational fine structure of...

O_2^+ Nicholls R. W. 1965

(Phys) Can. J. Phys., 43 (7), 1390-4.

Franck-Condon factors for the O_2^+ first and second negative band systems.

XI-2163

O_2^+ 1966

10 Б77. **Масс-спектрометрическое изучение фотоионизации молекул.** Brehm Burkhard. Massenspektrometrische Untersuchung der Photoionisation von Molekülen. «Z. Naturforsch.», 1966, 21a, № 3, 196—209 (нем.)

(J)

При 27° изучена зависимость относительных поперечных сечений ионизации Xe, Hg, O_2, H_2O, D_2O, C_2H_2, C_2H_4, C_4H_6, C_6H_6, CH_4 и C_7H_{16} при энергиях фотонов 7,5—14,5 *эв*. Разрешающая способность монохроматора $\Delta\lambda=1$ А. Определены потенциалы ионизации (точность $\pm 0{,}005$ *эв*) O_2^+ (12,078), H_2O^+ (12,614), D_2O^+ (12,637) $C_2H_2^+$ (11,400), $C_2H_4^+$ (10,511), $C_4H_6^+$ (9,075), $C_6H_6^+$ (9,246) и $C_7H_{16}^+$ (9,09+0,05). Рассчитаны частоты сим. вал. и деф. кол. H_2O и D_2O, а также сим. вал. кол. свя-

8

x · 1967 · 10

зи C—C в C_2H_2 и C_2H_4. Для соединений C_2H_4, C_4H_6, C_6H_6 и C_7H_{16} рассчитаны потенциалы появления основных фрагментарных ионов. Показано, что в случае C_4H_6 потенциалы появления фрагментарных ионов отличаются на 0,4—0,55 *эв* при изменении т-ры от 27 до 327°. Для метана таких различий не наблюдается. Для C_2H_6 определены потенциалы ионизации при 27, 187 и 327°; показано, что с повышением т-ры потенциал ионизации бензола незначительно уменьшается. Б. Розынов

O_2^+ (J) XI 987 (1966

Chem. and Engng News,
1966, 44, N23, 44-46

(4)

10

O_2^+

XT-165

1966

10 Г60. **Ионизация кислорода электронами. Колебательные электронные уровни O_2^+.** Emma V. Ionizzazione dell'ossigeno per urto elttronico. Livelli elettronici e vibrazionali dell'O_2^+. «Boll. sedute Accad. Gioenia sci. natur. Catania», 1966, 8, № 10, 742—752 (итал.; рез. франц., англ., нем.)

С помощью масс-спектрометра, снабженного ионным источником Фокса, получены кривые ионизации O_2 электронным ударом при энергии электронов до 21 *эв*. Определены энергии первых четырех электронных уровней иона O_2^+ и первых трех колебательных уровней $O_2^+(^2\pi_g)$. Измеренное сечение ионизации O_2^+ при энергии >4 *эв* над порогом меньше, чем полученные другими авторами, но находится в лучшем согласии с рассчитанным сечением. Резюме

99. 1968 10 Г

O_2^+

1966

19 Б118. Определение относительных вероятностей колебательных переходов для первой отрицательной системы O_2^+. Druetta M., Dufay M. Determination of O_2^+ first negative system relative vibrational transition probabilities. «Prys. Letters», 1966, 23, № 3, 239—240 (англ.)

Проведен расчет r-центроидов для системы $^4\Sigma_g^- \rightarrow {}^4\Pi_u O_2^+$ и определены относительные вероятности колебательных переходов. Резюме

относит. вероятности колебат. переходов

x · 1967 · 19

O_2^+

1966

23753z Determination of O_2^+ first negative system relative vibrational transition probabilities. M. Druetta and M. Dufay (Fac. Sci., Lyons, France). *Phys. Lett.* 23(3), 239–40(1966) (Eng). A calcn. of O_2^+ $^4\Sigma_g^- \rightarrow {}^4\Pi_u$ system *r*-centroids and a detn. of relative vibration transition probabilities are given. BGJN

Относительные вероятности

C.A. 1967. 66. 6

1966

O_2^+

ν_i

6 Д215. **Новые отнесения во второй отрицательной системе кислорода.** Linton C. New identifications in the oxygen second negative system. «Nature» (Engl.), 1966, **212**, № 5068, 1358 (англ.)

С помощью фотографич. техники исследована вторая отрицат. система полос кислорода, возбужденная в разряде, в области 1900—6500 Å. Обнаружен ряд новых полос и выполнено их отнесение; определены интегр. интенсивности полос. Приведено также новое отождествление для некоторых известных полос. Отмечено хорошее согласие с вычисленными значениями частот. Библ. 8.

С. Бурейко

ф. 1967 · 6Д

O_2

1966

14 Б186. Новые отнесения во второй отрицательной системе полос кислорода. Linton C. New identifications in the oxygen second negative system. «Nature» (Engl.), 1966, **212**, № 5068, 1358 (англ.)

С помощью фотографич. техники исследована вторая отрицательная система полос кислорода, возбужденная в разряде, в области 1900—6500 А. Обнаружен ряд новых полос и выполнено их отнесение; определены интегральные интенсивности полос. Приведено также новое отождествление для некоторых известных полос. Отмечено хорошее согласие с вычисленными значениями частот.

С. Бурейко

X · 1967 · 14

O_2

1966

42055q New identifications in the O_2 second negative system. C. Linton (Imp. Coll., London). *Nature* 212(5068), 1358 (1966)(Eng). The O_2 2nd negative band system is a result of the transition $A^2\Pi_u$–$X^2\Pi_g$. Several bands are reported which have not been reported previously and also the reassignment of vibrational quantum nos. and wavelengths for a few known bands. Walter Wagner

C.A. 1967. 66. 10

O_2^+

функции возбуждения электронным ударом.

1966

11 Д104. Измерение функций возбуждения полос первой отрицательной системы O_2^+ электронным ударом. Nishimura Hiroyuki. Measurement of the excitation function of O_2^+ first negative bands by electron impact. «J. Phys. Soc. Japan», 1966, 21, № 5, 1018—1019 (англ.)

Измерены ф-ции возбуждения полос (0,0), (1,0), (1,1), (2,1) и (5,3) 1-й отрицат. системы $O_2^+(^4\Sigma_g^+ \rightarrow {}^4\Pi_u)$ при бомбардировке O_2 электронами с энергией $E=100$—1500 *эв*). Абс. величины сечений возбуждения σ_b определялись путем сравнения с σ_b полосы (0,0) 1-й отрицат. системы N_2^+ (λ 3914 Å). Найденные величины σ_b пропорциональны сечениям ионизации σ_u O_2. Значения σ_b полос (2,1) и (1,1) составляют соответственно 0,26 и 0,14% от σ_u.

В. Скурат

ф. 1966. 11Д

Samson J. A. R.
Cairns R. B.

Mem. J. Opt. Soc. America, 1966, 56, 769

30. O_2^+, M.N. I.P., D_0

O_2^+ М 1637 1966

7 Б23. Кривые потенциальной энергии для O_2^+, N_2^+ и CO^+. Singh Ran B., Rai D. K. Potential-energy curves for O_2^+, N_2^+, and CO^+. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 4, 424—434 (англ.)

Методом Клейна — Ридберга — Риса построены потенциальные кривые ряда электронных состояний двухатомных ионов O_2^+, N_2^+ и CO^+. Предсказано возмущение $A^2\Pi$-состояния CO^+, обусловленное пересечением с основным термом $X^2\Sigma$ при $R \sim 1{,}48$ А. С точки зрения полученных результатов обсуждаются известные возмущения в спектрах N_2^+. Е. Никитин

Х·1967·7

O_2^+ .2

M 1637

1966

1 Д87. Кривые потенциальной энергии для O_2^+, N_2^+ и CO^+. Singh Ran B., Rai D. K. Potential-energy curves for O_2^+, N_2^+, and CO^+. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 4, 424—434 (англ.)

Методом Ридберга — Клейна — Риса — Вандерслайка построены эксперим. кривые потенц. энергии для двухатомных молекул O_2^+, N_2^+ и CO^+ в различных электронных состояниях. Показано, что для CO^+ колебательные уровни состояния $X^2\Sigma$ приводят к возмущению колебательных уровней состояния $A^2\Pi$. В случае молекулы O_2^+ подобных возмущений не происходит. Для спектра N_2^+ имеет место большое число возмущений как в $X^2\Sigma_g$-, так и в $B^2\Sigma_u$-состояниях. В частности, возмущения в состоянии $B^2\Sigma_u$ связаны с взаимодействием с состояниями $C^2\Sigma_u$ или $D^2\Pi_g$. В. Савельев

dr · 1966 · 12

8

N_2^+

O_2^+

М 1637

1966

7 Б23. Кривые потенциальной энергии для O_2^+, N_2^+ и CO^+. Singh Ran B., Rai D. K. Potential-energy curves for O_2^+, N_2^+, and CO^+. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 4, 424—434 (англ.)

Методом Клейна — Ридберга — Риса построены потенциальные кривые ряда электронных состояний двухатомных ионов O_2^+, N_2^+ и CO^+. Предсказано возмущение $A^2\Pi$-состояния CO^+, обусловленное пересечением с основным термом $X^2\Sigma$ при $R \sim 1{,}48$ А. С точки зрения полученных результатов обсуждаются известные возмущения в спектрах N_2^+. Е. Никитин

Х. 1967. 7

O_2^+

N_2^+

CO^+

M 1637

1966

Potential-energy curves for O_2^+, N_2^+, and CO^+. Ran B. Singh and D. K. Rai (Hindu Univ., Banaras, India). *J. Mol. Spectry.* 19(4), 424–34(1966)(Eng). Exptl. potential energy curves have been constructed for the molecules O_2^+, N_2^+, and CO^+ by the Rydberg-Klein-Rees-Vanderslice method. Perturbations in the $A^2\Pi$ state of CO^+ were predicted due to the $X\ ^2\Sigma^+$ state and the observed perturbations in the case of N_2^+ were discussed. RCKP

(Gieu nazvanie . Jingsu)

(+ Lum)

C.A. 1966. 65. 1

46a

O_2^+

Turner D. W. 1966
May D. P.

J. Chem. Phys., 45, N2, 471.

Факторы Франка-Кондона в ионизации: экспериментальные измерения

с использованием молекулярной фотоэлектронной спектроскопии.

(осн. N_2^+)

O_2^+

(7)

1966

23 Б73. **Новый метод, позволяющий определить потенциал ионизации O_2^+. Упрощенная техника, позволяющая широко применять масс-спектрометрию для исследования структуры органических ионов.**— New method gives ionization potential of O_2^+. «Chem. and Engng News», 1966, 44, № 23, 44, 46 (англ.)

Предлагается для определения потенциалов ионизации использовать метод разниц энергий распределения, в котором вместо получения кривых вероятности ионизации предложено получать зависимость $\Delta I(V)$, где ΔI — разность двух ионных токов, из которых один получен в результате ионизации N-электронами при ускоряющем напряжении V, а другой — $b \cdot N$-электронами при несколько большем напряжении V'. Использование такой методики позволяет исключить значительный термич. разброс энергий электронов им позволяет, не модифицируя прибора, получать результаты, близкие к результатам, получаемым при использовании моноэнергетич. пучка электронов. Б. В. Розынов

X · 1967

O_2^+ (Do)

O_2 (I, Do; Ae-) XI 2281 1966

Samson J.A.R., Cairns R.B

J. Opt Soc. America, 1966, 56, 769-775 (abs)

Ionization potential of O_2

Phys Rev, 1966, 12D 19-

10

4

O_2^+

1967

2 Д103. Электронная структура простых двухатомных молекул. Kayama Kunifusa, Ishiguro Eiichi. Electronic structure of the simple diatomic molecules. «Progr. Theoret. Phys. Suppl.», 1967, № 40, 20—36 (англ.)

(Обзор работ Котани)

Обзор работ Котани и его группы по теории простых двухатомных молекул. Исследуются основные $^2\Pi_g$- и возбужденные $^2\Pi_u$-состояния ионизованной молекулы O_2^+. Каждое электронное состояние обладает определенной конфигурацией и может быть описано соответствующей волн. ф-цией, сконструированной по методу МО ЛКАО слейтеровского типа. Каждая конфигурация $^2\Pi_u$-состояний оценивается по обменному взаимодействию для π-электронов и по силам осцилляторов для перехода в основное состояние. Приведены матричные элементы га-

ц. 1968 · 2Д

мильтониана для $^2\Pi_u$-состояний. Волн. ф-ции данных конфигураций выражаются далее через члены с волн. ф-циями МО для σ-электронов и волн. ф-циями валентной связи (ВС) для π-электронов. Вычислены статистич. веса и собств. значения энергии для трех наборов слейтеровских параметров как в МО, так и в приближении ВС. Показано, что вклад ионной структуры в первые два низшие возбужденные состояния мал, а в третье очень высок. Объясняется расхождение между эксперим. и теоретич. значением g-фактора для молекулы O_2. Авторы считают, что расхождение обязано примесью $^1\Pi_g{}^+$-состояния к основному $^3\Pi_g{}^-$-состоянию и учетом релятивистских спин-орбитального и спин-диполь-дипольного взаимодействий. Соответствующие вычисления дают полное согласие с экспериментом. Библ. 50.

Е. П. Гордеев

O_2^+ ВФ-248-IX 1967

Segal G. A.

Ze; сил. кост.

J. Chem. Phys., 1967, 47 N5 1876-77.

O_2^+ Sprohr R., Puttkamer E. [1947]

Z. Naturforsch., 22a, N 5, 705.

Измерение кинетической энергии фотоэлектронов и фактора Франка-Кондона для колебательных переходов некоторых молекулярных ионов (см. H_2^+) III

O_2^+

Zyl B.V., Dunn G.H. 1967

Phys. Rev., 163 (1), 43-5.

Dissociation of N_2^+ and O_2^+ by electron impact.

(cm. N_2^+)

O_2^+

$O_2(^3\Sigma)$

$= 12{,}059 \pm 0{,}00126$

Bruce

$12{,}063 \pm 0{,}00126$

Asundi R.K.

1968/69.

Current Sci (India),

37, 160, 1968

J. Ch. Ph., 1969, 51, 414, 1667

Albritton D.L.,

Schmeltekopf A.L.,

Zare R.N.

Asundi R. K.

Ulen.

Current Sci (India)
1968, 37, 160

9

O_2^+, m.n., D_0

O_2^+

спектр испускания, D_0, УР

5 Д276. **Изотопный сдвиг вторых отрицательных полос O_2^+.** Bhale G. L., Ramakoteswara Rao P. Isotope shifts in the second negative bands of O_2^+. «Proc. Indian Acad. Sci.», 1968, A67, № 6, 350—357 (англ.) 1968

В спектре испускания O_2^+ исследована вторая отрицат. система ($A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$) в области 5000—1850 Å, возбужденная микроволн. разрядом при давлениях O_2 ~0,1 *мм* рт. ст. Для измерения изотопич. сдвигов использовался кислород с содержанием O^{18} до 60%. На основании измеренных изотопич. сдвигов $\Delta\nu(^{16}O_2^+$—$^{16}O^{18}O^+)$ и $\Delta\gamma(^{16}O_2^+$—$^{18}O_2^+)$ для голов полос уточнены значения колебательных чисел v'' и v' и получены новые значения некоторых постоянных для O_2^+ в основном состоянии $X\Pi_g$: $\omega_e=1903{,}85$ *см*$^{-1}$, $\chi_e\omega_e=16{,}18$ *см*$^{-1}$, $B_e=1{,}6920$ *см*$^{-1}$, $r_e=1{,}1161$ Å. На основании исследования системы вблизи предела диссоциации получены значения энергии диссоциации $D_0(O_2^+, \Pi_g)$ и потенциала ионизации $IP(O_2, \Sigma_g^-)$; обсуждены методы получения этих величин и возможные погрешности методов. Приведены спектры. Библ. 11. Резюме

Ф · 1969 - 59

O_2^+

1968

111757w Isotope shifts in the second negative band of O_2^+ [molecular oxygen positive ions]. Bhale, G. L.; Rao, P. Ramakoteswara (Spectroscopy Div., Bhabha At. Res. Centre, Trombay, India). *Proc. Indian Acad. Sci., Sect. A* 1968, 67(6), 350–7 (Eng). The 2nd neg. bands of O_2^+ in the 1500–5000-A. region were photographed. By using ^{18}O enriched O_2, it was found that the ν'' numbering was increased by 1 unit, while the ν' numbering was unchanged. These results lead to the following revised rotational, and vibrational consts. in the $X^2\pi_g$ ground state of O_2^+: — ω_e = 1903.85 cm.$^{-1}$, $\omega_e x_e$ = 16.18 cm.$^{-1}$, β_e = 1.6920 cm.$^{-1}$, and r_e = 1.1161 A. Keith D. Root

m. n.

C.A. 1968. 69. 26

O_2 †

BP-A 1158

1968

Empedocles P.

cum. noem.

Theor. chim. Acta 1968,

10 (4), 331-6.

1968

O_2^+

12 Д295. Определение сечений возбуждения некоторых полос O_2^+ методом пересекающихся пучков. Король В. І., Кишко С. М., Скубенич В. В. Визначення перерізів збудження деяких смуг O_2^+ методом пересічних пучків. «Укр. фіз. ж.», 1968, 13, № 7, 1220—1222 (укр.); «Укр. физ. ж.», 1968, 13, № 7, 1225—1226 (русск.)

Описан метод получения интенсивного молекулярного пучка O_2^+, возбуждение его спектра излучения медленными электронами и определены значения сечений возбуждения некоторых полос первой и второй отрицат. систем O_2^+, лежащих в спектральном диапазоне 5632—2890 Å. Значения сечений, полученные при конц-ии молекул в пучке $1{,}16 \cdot 10$ *см*$^{-3}$ и энергии возбуждающих электронов 50 *эв*, лежат в пределах от $0{,}268 \cdot 10^{-19}$ до $5{,}36 \cdot 10^{-19}$ *см*^{2}. Автореферат

Ф. 1968. 12Д

1968

O_2^+

24425p Experimental evidence for high vibrational excitation in O_2^+ ground state by photoelectron spectroscopy. Natalis, P.; Collin, J. E. (Univ. Liege, Liege, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1968, 2(6), 414–16 (Eng). Photoelectron spectra of O_2 were obtained by using 584-A. photons produced in a He discharge and 736–744-A. photons in a Ne discharge. The vibrational structure of O_2^+ ($X^2\Pi_g$) ground state extends from 0–4 in the 1st case to 0–20 in the 2nd. The latter result cannot be explained on the basis of the Franck-Condon principle. JDJN

спектр колеб. высоких колеб. уровней

XI-376

С.А. 1969 · 70 · 6

O_2^+

1968

9 Б114. Экспериментальное доказательство возбуждения высоких колебательных уровней основного состояния O_2^+, полученное методами фотоэлектронной спектроскопии. Natalis P., Collin J. E. Experimental evidence for high vibrational excitation in O_2^+ ground state by photoelectron spectroscopy. «Chem. Phys. Letters», 1968, 2, № 6, 414—416 (англ.)

Получены спектры фотоэлектронов молек. кислорода O_2 при возбуждении фотонами с длиной волны 584 А (разряд в гелии) и 736—744А (разряд в неоне). В первом случае, в согласии с данными др. авторов, наблюдается возбуждение колебательных уровней до $V'=4$ основного состояния $X^3\Pi_g O_2^+$, к-рое по крайней мере качественно подчиняется правилу Франка — Кондона. Во втором случае на фотоэлектронном спектре обнаруживаются не только пики, относящиеся к колебательным

Х-376

Х·1969·9

уровням вплоть до $V'=20$ состояния $X^3\Pi_g$, но и относимые к колебаниям во втором ионном состоянии $O_2^+(a^4\Pi_u)$. Этот факт не удается объяснить на основе принципа Франка — Кондона, поскольку согласно современным данным о потенциальных кривых для $O_2X^3\Sigma_g^-$ и $O_2^+X^2\Pi_g$ вероятность переходов при $V''=0\rightarrow V'\geqslant 5$ должна быть ничтожно мала.

В. Дианов-Клоков

O_2^+

1968

7 Д285. **Применение фотоэлектронной спектроскопии для экспериментального доказательства колебательного возбуждения на высокие уровни в основном состоянии O_2^+.** Natalis P., Collin J. E. Experimental evidence for high vibrational excitation in O_2^+ ground state by photoelectron spectroscopy. «Chem. Phys. Letters», 1968, 2, № 6, 414—416 (англ.)

В области 11—17 *эв* изучены фотоэлектронные спектры кислорода, возбужденные гелиевым (λ=584 Å) и неоновым (λ=736—744 Å) разрядами. Показано, что имеет место образование возбужденного молекулярного иона O_2^+ по реакции $O_2(X^3\Sigma_g^-, v''=0) \rightarrow O_2^+(X^2\Pi_g, v'=n)$. Обнаружены переходы с возбужденных уровней v'=0—4 при гелиевом возбуждении и v'=0—20 при неоновом; последнее не согласуется с принципом Франка—Кондона. Предположено, что принцип Франка—Кондона не применим к фотоионизационным процессам, зависящим от энергии падающих фотонов. Библ. 6. С. Ф. Б.

спектр

Ф. 1969 7Д

O_2^+

1968

2 Д288. **Ридберговские серии Танака — Такамине молекулы O_2.** Ogawa Masaru. Tanaka — Takamine Rydberg series of O_2. «Canad. J. Phys.», 1968, 46, № 4, 312—313 (англ.)

Изучены ридберговские серии Танака — Такамине в спектре поглощения молекулы O_2 в вакуумной УФ-области (600—1000 Å). Наблюдавшиеся частоты отнесены к переходам из основного $X^3\Sigma_g^-$ в верхнее состояние $^3\pi_u$ молекулы. Получены значения частот членов серий $v'=0$ до $n=10$, $v'=1$ до $n=12$, $v'=2$ до $n=13$; обнаружена новая прогрессия $v'=3$ и приведены частоты входящих в нее линий с $n=3\div9$. Найдены новые, уточненные значения сериальных пределов: 163 720 $см^{-1}$ для $v'=0$; 164 830 $см^{-1}$ для $v'=1$; 165 900 $см^{-1}$ для $v'=2$. Новая серия $v'=3$ сходится к пределу при 166 925 ± ±10 $см^{-1}$. Значения колебательных констант O_2^+ найдены равными: $\omega_e=1154$ $см^{-1}$; $\omega_e\chi_e=21{,}5$ $см^{-1}$. Библ. 5.

С. Ф. Б.

спектр

(л.п.)

09.1969.2Д

O_2^+

Rothe D. E. 1968

McCaa D. J.

U.S. At. Energy Comm.,
CAL-TR-165, 70 pp.

спектр

(см. N_2) III

O_2^+

1968

Shamir, Binenboym, Claassen

J.Amer.Chem.Soc., 90, 6223

The vibrational frequency of the O_2^+ cation.

O_2^+

1968

Chiefly

69741j Excitation of molecular oxygen by low-energy electrons. Skubenich, V. V. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1968, 25(1), 169–70 (Russ). The abs. excitation cross section of bands belonging to the 1st ($b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_4$) and 2nd ($A^2\Pi_4 \rightarrow X^2\Pi_g$) neg. systems of O_2^+ were measured in the energy range 20–160 ev. A max. was observed at ~80–100 ev. G. Thirot

C.A. 1968. 69: 18

Turner D. W.

Шне. Proc. Roy Soc. A, 1968, 307, 15

22

O_2^+, сс.м., 1.P.

Yoshino K., Tanaka Y. (1968

Kogeev Ю.С.

J. Chem. Phys. 1968, 48, 4859

207

~~$I^+(O_2)$~~ O_2^+ (m.x.)

O_2^+

XI-8

1969

6 Б137. Аргумент в пользу изменения нумерации колебательных уровней основного состояния $^2\pi_g$ иона O_2^+. Albritton D. L., Schmeltekopf A. L., Zare R. N. Evidence in support of the vibrational renumbering of the O_2^+ $^2\pi_g$ ground state. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 4, 1667—1668 (англ.)

Измерены и рассчитаны относит. интенсивности ряда полос системы $A^2\pi_u$—$X^2\pi_g$ иона O_2^+. Расчет проведен в предположении принятой нумерации колебат. уровней состояния $X^2\pi_g$, а также с увеличением этой нумерации на 1 и на 2. Наилучшее совпадение с экспериментом дает 2-й вариант расчета. Д. И. Катаев

g_i

X. 1970 · 6

O_2^+

XI-8

1969

94853w Evidence in support of the vibrational renumbering of the O_2^+ $^2\Pi_g$ ground state. Albritton, D. L.; Schmeltekopf, A. L.; Zare, R. N. (ESSA Res. Lab., Boulder, Colo.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(4), 1667–8 (Eng). By using the Franck-Condon factors of D. L. Albritton, *et al.* (to be published), intensity arrays were calcd. for the O_2^+ $A^2\Pi_u$–$X^2\Pi_g$ 2nd neg. system by using the classic vibrational numbering system of the ground state of O_2^+, by using the numbering system proposed by R. K. Asundi (1968) which consists in the former numbering system increased by 1 unit, and the classic numbering system increased by 2 units. Comparison of calcd. intensities with measured relative intensities (excited by a 5-kv. electron beam) indicate that the Asundi numbering system is superior to either of the other 2 systems. Consequences of renumbering on literature data for O_2^+ are discussed. FBJN

M. N.

C. A. 1969. 71. 20

O_2^+ | Asundi R.K., Ramachandra'rao Ch.V.S 1969

Chem. Phys. Letters, 4(2), 89.

спектр

Исправленные факторы Франка-Кондона для ионизо вакансов перехода O_2 и вторая

отрицательная система полос O_2^+.

(см. O_2) III

вероятн. переходов

O_2^+

фотоионизация

XI-156

1969

2 Б24. Фотоионизация π-электронов в O_2. Dixon R. N., Hull S. E. The photo-ionization of π-electrons from O_2. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 6, 367—370 (англ.)

Представлены результаты квантовомех. расчетов состояний O_2^+, возникающую из конфигураций $\ldots(\pi_u)^3(\pi_g)^2$. Полученные данные объясняют отсутствие заметной ионизации O_2 в A^2, Π_g-состояние иона O_2^+ при облучении фотонами 21,21 *эв*. Новое состояние в O_2^+, наблюдаемое при облучении O_2 фотонами с $\lambda=304$ A и соответствующее энергии ионизации ~23,7 *эв*, отнесено к верхнему состоянию $^2\Pi_u$ этой конфигурации. Резюме

см. также O_2^+

+1

X·1970·2

Lindholm E.

Шел.

Arkiv fys. 1969, 40, 117

71

O_2^+, сл. п., I.P.

O_2^+

1969

McConkey J.W., Woolsey J.M.

J.Phys. B, 2, 529

Excitation of O_2^+ bands by electron impact.

1970

O_2^+

17 Б830. Исследование образования и реакция кластерных ионов O_2^+, O_2^- и O^- с помощью поточной системы с послесвечением. Adams N. G., Bohme D. K., Dunkin D. B., Fehsenfeld F. C., Ferguson E. E. Flowing afterglow studies of formation and reactions of cluster ions of O_2^+, O_2^-, and O^-. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 6, 3133—3140 (англ.)

Исследованы р-ции типа $\pm A + B + M \rightarrow A^{\mp} \cdot B + M$ и $A^{\mp} \cdot B + C \rightarrow A^{\mp} \cdot C + B$, где $A^{\mp} = O_2^+, O_2^-, O$; $B, C = H_2, N_2, O_2, CO_2, N_2O, SO_2$ и H_2O при 80, 200 и 300° К в области давл. 0,4—2 *мм*. Измерены константы скорости всех исследованных р-ций. Возможная ошибка составляет ±30%. Приводятся оценки энергии диссоциации кластеров.

Л. Ю. Русин

D_0 - оценка

X · 1970 · 17

X

O_2^+

1970

9180y Excitation of O_2^+ first negative bands by electron impact on oxygen. Borst, Walter L.; Zipf, Edward C., Jr. (Dep. of Phys., Univ. of Pittsburgh, Pittsburgh, Pa.). *Phys. Rev. A* 1970, [3]1(5), 1410–15 (Eng). Abs. cross sections for the electron-impact excitation of the O_2^+ 1st neg. bands were measured from threshold to 400 eV and extrapolated to 1000 eV by means of a Bethe-Oppenheimer relation. The peak cross sections for the $(n + 1,n)$ and $(n + 2,n)$ sequences were 5.30×10^{-18} cm² ± 10% and 2.10×10^{-18} cm² ± 10% at 100 eV, resp. The cross sections for the (0, 0) and (1, 0) bands had a max. value of 2.14×10^{-18} cm² ± 15% and 4.33×10^{-18} ± 15, resp. The ratio of the total ionization cross section of O_2 to the excitation cross sections of the 1st neg. bands was nearly const. over the range 30–1000 eV; it had an av. value of 64 for the (1, 0) band. The lifetime of the $v' = 1$ level of the $b^4\Sigma_g^-$ state was 1.19 μsec ± 5%. RCPJ

cuerip

C.A. 1970. 73. 2

O_2-O_{2n}^+ (D_0, ΔH^0, ΔS^0) XI 897 1970

$n = 2, 3, 4, 5$

Conway D. C., Yanik G. S.,

J. Chem. Phys., 1970, 53, № 5, 1859-66 (англ.)

Determination of the bond energies for the series O_2-O_2^+ through O_2-O_{10}^+: $O_2, O_2^+, O_4^+, O_6^+, O_8^+, O_{10}^+$

Гаир. кат. Ю, М

CA, 1970, 73, N16, 81439g

O_2^+ (J) II XI 790 1970

$O_2(E_i)$ Edqvist O., Lindholm E.,
Selin L. E., Åsbrink L.,

Phys. scr., 1970, 1, N1, 25-30 (англ.)

On the photoelectron spectrum of O_2.

Ж Хим, 1970, 22Б191 ю

(ф)

O_2^+

1970

фотоэлектр. спектр

22 Б191. **Фотоэлектронный спектр** O_2. Edqvist O., Lindholm E., Selin L. E., Åsbrink L. On the photoelectron spectrum of O_2. «Phys. scr.», 1970, 1, № 1, 25—30 (англ.)

В области 12—28 *эв* исследован фотоэлектронный спектр молек. кислорода при возбуждении линиями гелия 584 и 304 А и измерены с высокой точностью состояния иона O_2^+. Определена энергия ионизации (17,045 *эв*) ранее ненаблюдавшегося $A^2\Pi_u$-состояния. Показано, что относит. интенсивность этого состояния хорошо согласуются с последними расчетами Диксона и Хала. Полученные результаты сопоставляются также со спектральными данными для второй отрицат. полосы системы $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$.

О. Г. Гаркуша

Х. 1970. 22

O_2

фотоэлектр. спектр

ф. 1970.

11 Д551. **О фотоэлектронном спектре O_2.** Edqvist O., Lindholm E., Selin L. E., Asbrink L. On the photoelectron spectrum of O_2. «Phys. scr.», 1970, 1, № 1, 25—30 (англ.)

1970

Изучен фотоэлектронный спектр молекулярного кислорода в области 12—28 *эв*, при облучении линиями He I 584 Å и He II 304 Å. Использованный спектрометр со сферич. анализатором обладал высоким разрешением, что позволило выделить ранее не наблюденный уровень $A^2\Pi_u$ с энергией ионизации 17,045 *эв*. Его относит. интенсивность находится в хорошем согласии с расчетной. Всего промерено 7 электронных состояний O_2^+. В основном состоянии все колебательные уровни расщеплены на дублеты за счет спин-орбитального взаимодействия (23 *мэв*). В интервале энергий фотоэлектронов 25,5—28 *эв*, вызванных облучением линией He II 304 Å, наблюдено довольно интенсивное непрерывное поглощение, природу которого авторы не объясняют. Библ. 24.

Ю. Н. Живлюк

(Н)

112

O_2^+

1970

82167d Photoelectron spectrum of molecular oxygen. Edqvist, O.; Lindholm, Einar; Selin, L. E.; Asbrink, L. (Phys. Dep., Roy. Inst. Technol., Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 1970, 1(1), 25–30 (Eng). The photoelectron spectrum of mol. O has been studied in the 12–28-eV range with the 584- and 304-Å He lines, and the O_2^+ states have been measured accurately. Due to the high resoln. of the app. it has been possible to observe the $A^2\Pi_u$ state which has been considered as absent in photoelectron spectroscopy work. Its ionization energy is 17.045 eV. The present result is compared with spectroscopic observations of the 2nd neg. band system $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$. The relative intensity of the $A^2\Pi_u$ state is in good agreement with a recent calcn. by Dixon and Hull. RCBBL

М. и.

J

007071.

спектр

C. A. 1970 73 16

O_2^+

XI-695

1970

фотоэл. спектр

9 Д337. Фотоэлектронные спектры O_2, N_2 и CO. Edqvist O., Lindholm E., Selin L. E., Asbrink L. The photoelectron spectra of O_2, N_2 and CO. «Phys. Letters», 1970, A 31, № 6, 292—293 (англ.)

В фотоэлектронном спектре кислорода наблюдено состояние $A^2\Pi_u$ с энергией ионизации 17,045 *эв*. Его интенсивность составляет 1/6 от интенсивности соседнего состояния $a^4\Pi_u$. Установлено, что у иона азота в фотоэлектронном спектре отсутствует состояние $C^2\Sigma_u^+$. То же наблюдается и для соответствующего состояния CO^+. Обсуждаются правила, регулирующие появление различных уровней в фотоэлектронном спектре. Библ. 18.

А. Яковлева

+2

Д. 1970. 9Д

O_2^+

У

фотоэл. спектр

XI-695 1970

138016c Photoelectron spectra of oxygen, nitrogen, and carbon monoxide. Edqvist, O.; Lindholm, Einar; Selin, L. E.; Asbrink, L. (Phys. Dep., Roy. Inst. Technol., Stockholm, Swed.). *Phys. Lett. A* 1970, 31(6), 292–3 (Eng). The $A^2\Pi_u$ state of O_2^+ has been observed in the photoelectron spectrum of O_2. Its ionization energy is 17.045 eV. The intensity is only 1/6 of the intensity of the a $^4\Pi_u$ state. The $C\ ^2\Sigma_u^+$ state of N_2^+ does not appear in the photoelectron spectrum of N_2 as is also the case with the corresponding state of CO^+. The rules for the appearance of ionic states in photoelectron spectroscopy are discussed. RCTT

C.A. 1970. 72. 26

+2

X

1970

расчет м.п. (C_2, N_2, N_2^+, O_2,
II 13 14 O_2^+, CO, CO^+, NO, NO^+)

Jain D.C., XI 1063

Int. J. Quant. Chem., 1970, 4, N6, 579-586 (англ.)

A study of some potential energy functions for diatomic molecules.

РЖХим, 1971, 11566

(P) 10

15 стр

Oz.[1] | Ландшафт а. стр. 1970

Згр. Ів. 1970.

и. п. | 1, 1, 05

Осн. карт.
у Гуртка

март 1970 р.

O_2^+

возбужд.;
ионизация

Cade P. E., et al. 1971

J. Chem. Phys., 54 (8), 3517.

(см. O_2) III

O_2^+

спектр

7 Д336. Возбуждение состояния $A^2\Pi_u$ O_2^+ при фотоионизации. Carlson R. W., Judge D. L. Photoionization excitation of the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 4, 1832—1833 (англ.)

Экспериментально подтверждено образование состояния $A^2\Pi_u$ молекулярного иона O_2^+ при фотоионизации. Для возбуждения первой отрицат. системы O_2^+ (переход $A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$) использовался источник вакуумного УФ-излучения с монохроматором.; в спектре излучения в области 3200—6000 Å отождествлены канты полос системы $A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$. Выделение линий OIII λ= =702,332, 702,822, 702,899 и 703,850 Å в ионизирующем излучении позволило исключить из рассмотрения образование O_2^+ в состоянии $A^2\Pi_u$ путем ассоциативной ионизации и каскадного заселения с верхних уровней. Для излучения в области 500—700 Å сечение фотоионизации кислорода в состояние $A^2\Pi_u$ составляет $4 \cdot 10^{-19}$ *см*^{2}. Библ. 12.

В. Александров

09.1971.7Д

O_2^+

1971

14 Б975. **Фотоионизационное возбуждение состояния $A^2\Pi_u$ иона O_2^+.** Carlson R. W., Judge D. L. Photoionization excitation of the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 4, 1832—1833 (англ.)

В спектре флуоресценции O_2 при давл. 0,05 *мм* под действием света λ 703 А обнаружена 2-я отриц. система полос O_2, связанная с электронным переходом $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$ иона O_2^+. Возможность образования состояния $A^2\Pi_u$ путем каскадных переходов или преиони-

спектр

X·1971·14

зации исключена. Сделан вывод, что $O_2^+ A^2\Pi_u$ (I) образуется в процессе прямой фотоионизации, сечение к-рого при λ 500—700 A по оценке составляет $4 \cdot 10^{-19}$ *см*^{2}. Из данных фотоэлектронной спектроскопии известно, что сумма сечений возбуждения $O_2^+ a^4\Pi_u$ (II) и $A^2\Pi_u$ составляет $\sim 6 \cdot 10^{-18}$ *см*^{2}. Малая величина сечения образования I по сравнению с II не позволяет обнаружить в фотоэлектронном спектре O_2 соотв. пик, к-рый к тому же перекрывается с пиком II. В. Е. Скурат

O_2^+

(XI-806)

1971

50117z Photoionization excitation of the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+. Carlson, R. W.; Judge, D. L. (Dep. Phys., Univ. South. California, Los Angeles, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(4), 1832–3 (Eng). The high-resoln. (20 Å) fluorescence spectrum produced by extreme-uv excitation (703 Å) of O_2 confirms that the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+ is formed through the photoionization process. The obsd. fluorescence spectrum (3000–6000 Å) is assigned to the 2nd neg. system of O_2^+, $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$. Bandhead wavelengths are shown. The cross section for production of the $O_2^+(A^2\pi_u)$ state by 500–700-Å radiation was $\sim 4 \times 10^{-19}$ cm^2 which is small compared to the sum of the cross sections for excitation of the $a^4\Pi_u$ and $A^2\Pi_u$ states, $\sim 6 \times 10^{-18}$ cm^2.

(M.N.)

C.A. 1973, 78 · N8

O_2^+ Freund R. 1971

механизм образ. ридберов. сных состояний

J. Chem. Phys., 1971, 54, № 7, 3125.

(см O_2) III

O_2^+ Haeusel R. 1971

Chem. Phys. Lett. 1971,

спектр 9, N6, 548-550

(См. O_2) III

O_2^+ XI-2645 1971

1 Д350. **Фотоэлектронные спектры высокого разрешения нестабильных частиц: $O_2(^1\Delta_g)$ и ненаблюдаемые ранее состояния O_2^+.** Jonathan Neville, Morris Alan, Ross Kevin J., Smith David. High resolution vacuum ultraviolet photoelectron spectra of transient species: $O_2(^1\Delta_g)$ and previously unobserved states of O_2^+. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 11, 4954—4955 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры метастабильного кислорода $O_2(^1\Delta_g)$, получаемого в безэлектродном разряде. Наряду с известными полосами в спектре обнаружены две полосы, соответствующие переходам на ненаблюдавшиеся ранее состояния O_2^+, отвечающие адиабатич. потенциалам ионизации 18,81 и 17,45 *эв*. Эти состояния, лежащие на 7,72 и 6,35 *эв*, выше основного состояния $X^2\Pi_g$, идентифицированы, соответственно, как $^2\Phi_u$ и $^2\Delta_g$. Библ. 6. И. Дворников

У

ЖФ, 1972, 12Д

Дублет содержит интерес, предположительно $^2\Phi_u \sim 6{,}35$ $^2\Delta_g = 7{,}72$ Л.Б.

O_2^+

1971

(27535p) High resolution vacuum ultraviolet photoelectron spectra of transient species: $O_2(^1\Delta_g)$ and previously unobserved states of O_2^+. Jonathan, Neville; Morris, Alan; Ross, Kevin J.; Smith, David John (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton/Hants, Engl.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(11), 4954–5 (Eng). The photoelectron spectrum of $O_2(^1\Delta_g)$ shows 2 bands hitherto unreported. They are tentatively assigned to the $^2\Delta_g$ and $^2\Phi_u$ states of O_2^+; their energy levels are, resp., 7.72 and ~6.35 eV above the $X^2\pi_g$ level of O_2^+. The ionization was effected by He I 584-Å (21.21 eV) radiation. The $O_2(^1\Delta_g)$ was produced from pure O_2 by an electrodeless discharge.

M.n.

C.A. 1971. 75. 4.

Jonathan N., Morris A., Ross K. J., Smith D.

Typebur J. Chem. Phys., 1971, 54, 4954.

74

O_2^+, M. N.

O_2^+

XI - 1529

1971

расчет состояний

11 Д122. Теоретический расчет состояний O_2^+, которые могут быть обнаружены в фотоэлектронном спектре $O_2(^1\Delta_g)$. Raftery J., Richards W. G. A theoretical calculation of the states of O_2^+ accessible in the photoelectron spectrum of $O_2(^1\Delta_g)$. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1971, 6, № 3—4, 269—277 (англ.)

Методом Хартри—Фока для незаполненных оболочек в приближении Несбета (см. РЖФиз, 1956, № 3, 6530) исследовано электронное строение иона O_2^+, наблюдаемого в фотоэлектронном спектре метастабильного

Б. 1971. 11 Д

$O_2(^1\Delta_g)$. Для различных состояний приведены потенц. кривые, энергетич. характеристики, потенциалы ионизации, равновесные межъядерные расстояния, колебательные частоты. Получены согласующиеся с опытом данные для известных состояний $^2\Pi_g$, $^4\Pi_u$, $^2\Pi_u$ и $^4\Sigma_g^-$ и предсказано существование пока не наблюдавшихся возбужденных состояний иона $^2\Phi_u$, $^2\Delta_g$ и, возможно, второго $^2\Pi_u$-состояния и оценены относит. интенсивности для $^2\Phi_u$- и $^2\Pi_u$-состояний.

В. Л. Лебедев

O_2^+

(XI-2875) 1971

11 Б95. Колебательное и вращательное возбуждение при ионизации Пеннинга атомами $He(2^3S_1)$. Примеры невертикальных процессов. Richardson W. C., Setser D. W., Albritton D. L., Schmeltekopf A. L. Vibrational and rotational excitation in $He(2^3S_1)$ penning ionization: examples of nonvertical processes. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 12, № 2, 349—351 (англ.)

спектр

В проточных системах исследованы распределения по колебательным и вращательным состояниям двухатомных ионов O_2^+, HBr^+ и HCl^+, полученных при ионизации Пеннинга соотв-щих нейтр. молекул метастабильными атомами $He(2^3S_1)$. Получены спектры полос O_2^+ ($A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$), HCl^+ ($A^2\Sigma^+$—$X^2\Pi_i$) и HBr^+ ($A^2\Sigma^+$—$X^2\Pi_i$). Сравнение заселенностей колебательных уровней возбужденных состояний, полученных при ионизации

X

X·1972·11

Пеннинга и фотоионизации молекул, демонстрирует существенное различие в зависимостях заселенностей от колебательного числа v. Поскольку фотоионизация является вертикальным процессом, это различие указывает на невертикальность процесса ионизации Пеннинга. Сравниваются спектры системы полос O_2^+ ($A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$), возбужденных ионизирующими столкновениями с энергией 5 кэв (вертикальный процесс) и полученных при ионизации Пеннинга. Отмечается сильное вращательное возбуждение O_2^+ ($A^2\Pi_u$) в случае ионизации Пеннинга.

А. Резников

, O_2, O_3, O_2^+, O_2^- (спектры) XI 2778 1971

Weisbeck R., Völkner A.,

Z. angew. Phys., 1971, 32, N4, 258–
–265 (нем.)

Das Emissionsspektrum der stillen elektrischen Entladung in Sauerstoff von Normaldruck.

Bic Хим, 1972, 9Б161 10 10

O_2^+

XI-2736 1972

(7)

св. мех. расчет

39401a Localized and delocalized 1s hole states of the O_2^+ molecular ion. Bagus, Paul S.; Schaefer, Henry F., III (IBM Res. Lab., San Jose, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(1), 224–6 (Eng). The hole states of O_2^+, obtained by ionization of the O mol., were examd. theoretically in 3 approxns.: (*1*) The frozen orbital approxn., which consists of single configuration calcns. in terms of the Hartree-Fock orbitals for the neutral O_2 mol.; (*2*) direct hole-state calcns. in which *g* or *u* inversion symmetry is imposed on each MO; (*3*) direct hole-state calcns. without the restriction in (2). For the $1s^4\Sigma^-$ hole state the 3 approxns. yield the following ionization potentials: (*1*) 563.5; (*2*) 554.4; (*3*) 542.0 eV. The exptl. ionization potential is 543.1 eV, and it is concluded that the hole state is localized on 1 of the 2 O atoms.

C.A. 1972. 76:8

O_2^+

XI-2736

1972

9 Б13. Локализованные и делокализованные вакантные 1s-состояния в молекулярном ионе O_2^+. Bagus Paul S., Schaefer Henry F., III. Localized and delocalized 1s hole states of the O_2^+ molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 1, 224—226 (англ.)

Рассчитан потенциал ионизации 1s-электрона иона O_2^+ в состоянии $^4\Sigma^-$ в рамках трех приближений: по теореме Купманса (563,5 эв), как разность полных энергий конечного и начального состояния (554,4 эв), причем 1s-вакансия предполагается делокализованной, а также как разность полных энергий конечного и на-

РЖХ 1972, №9

чального состояния (542,0 эв), однако в последнем случае вакансия предполагается локализованной на одном из атомов кислорода. Расчет проводился методом МО ССП с очень большим набором функций слейтеровского типа. Сравнение расчетных и эксперим. (543,1 эв) значений потенциала ионизации 1*s*-электрона, показывает, что вакансия локализована на одном из атомов кислорода. Анализ заселенностей валентных орбит показывает, что молек. ион O_2^+ с вакансией на *K*-уровне близок к иону FO^+.

В. И. Нефедов

O_2^+

1972

(структ)

5 Д109. Локализованные и делокализованные состояния 1s-вакансий в молекулярном ионе O_2^+. Bagus Paul S., Schaefer Henry F., III. Localized and delocalized 1s hole states of the O_2^+ molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 1, 224—226 (англ.)

Произведен расчет электронной структуры ионизованной молекулы O_2. Использовались три приближения: 1) приближение замороженных МО, полученных из расчета нейтральной молекулы O_2; 2) прямой расчет иона O_2^+ с наложением условия, согласно которому МО должны быть четными или нечетными относительно операции инверсии, что заранее предполагает делокализованные состояния вакансий; 3) Расчет без указанного ограничения. Сравнение расчетного и эксперим. значений потенциала ионизации 1s-электронов убедительно показывает, что реализуется случай 3, то-есть что вакансия локализована на одном из атомов кислорода (центр *A*). При этом наблюдается перераспределение электронной плотности валентных электронов, особенно заметное в случае π-орбиталей. Так, заселенности МО, происходящих от МО $1\pi_u$ и $1\pi_g$ O_2, равны соответственно: на центре *A* 3,44 и 0,26, на центре *B* 0,56 и 1,74.

В. И. Барановский

(XI-2736)

ф. 1972

5Д

O_2^+ Bhale G.L. 1972

(м.н.)

J. Mol. Spectr., 1972, 43, 171-172

Spin-Orbit Coupling Constants in the $A^2\Pi_u$ State of O_2^+

Система $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$

$A = -4{,}0$ $Y = -3{,}80$ (а не $+8{,}2$ $Y = 7{,}80$ по Шеденсу).

Сопоставление

1-7 и 0-8 полосы $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$. дисперсия 0,65 Å/мм
3ий порядок 1200 кл/мм.

$A_0' = -3,5 \pm 0,1$

$A_1' = -3,1 \pm 0,1$

$A_7'' = 195,4 \pm 0,1$

$A_8'' = 194,4 \pm 0,1$.

O_2^+ Оттиск 3924 1972

6 Б129. **Постоянная спин-орбитального взаимодействия состояния $A^2\Pi_u$ иона O_2^+.** Bhale G. L. Spin-orbit coupling constant in the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 1, 171—172 (англ.)

Детально исследована вращательная структура полос 1—7 и 0—8 2-й отриц. системы O_2^+. Из первых линий сателлитных ветвей, из отношения интенсивностей сателлитных и главных ветвей, а также из величины Λ-удвоения в полосах изотопного иона $O^{16}O^{18+}$ сделан вывод, что верхнее состояние является обращенным. Получены значения (в см$^{-1}$): $A_0' = -3{,}5 \pm 0{,}1$; $A_1' = -3{,}1 \pm 0{,}1$; $A_7'' = 195{,}4 \pm 0{,}1$. Д. И. Катаев

М.Н.

XI-3140

Х. 1973. №6

оттиск 3024 1972

O_2^+

2 Д353. Константа спин-орбитальной связи состояния $A^2\Pi_u$ O_2^+. Bhale G. L. Spin-orbit coupling constant in the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 43, № 1, 171—172 (англ.)

Константа спин-орбитального взаимодействия A для дублетного состояния обычно находится подстановкой эксперим. величин вращательных термов в ур-ние Хилла и Ван-Флека, которому соответствует два значения константы. Выбор правильного значения может быть сделан по идентификации первых вращательных линий различных ветвей или из сравнения интенсивностей линий основных полос и полос сателлитов. Оба метода были использованы для определения константы A состояния $A^2\Pi_u$ по полосам 1—7 и 0—8 второй отрицат. системы O_2^+ (переход $A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$). Из детального анализа вращательной структуры полос следует значение $A = -4$ см$^{-1}$, а не $+8{,}2$, как полагалось ранее. Библ. 5.

В. Александров

Ф-ф-73-2

XI-3440

O_2^+ Оптика 3024 1972

(М.Н)

67963z Spin-orbit coupling constant in the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+. Bhale, G. L. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Trombay, India). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 43(1), 171–2 (Eng). The 1–7 and 0–8 bands of the O_2^+ 2nd neg. system were photographed at 0.65 Å/mm in the 3rd order with a 1200 lines/mm grating spectrograph. Consideration of the identification of the 1st lines in various branches and a comparison of the intensities of rotational lines in the main and satellite branches in the case of $A^2\Pi_u$–$X_2\Pi_g$ (2nd neg.) bands of O_2^+ shows that the spin-orbit coupling const. A in the initial $A^2\Pi$ state is -4.0 (corresponding to $Y = -3.80$) and not 8.2 (corresponding to $Y = 7.80$) as was assumed by D. S. Stevens (1931). This means that the $A^2\Pi_u$ state of O_2^+ is an inverted $^2\Pi$ contrary to what has been assumed so far.

William Braker

Ф48-1Х

C.A. 1972. 77. 10

O_2^+ 1972

Čársky P., Zahradník R. A.

Эл. стр. „Theor. chim acta", 1972, 26, N2, 171-8.

(см BH_2, III)

O_2^+ 1972

Danby C.J.,
Bland H.D.

J. Mass. Spectrom and Ion Phys., 1972, 8, № 2, 153

Спектроскопия фотоэлектронов фотоионизации совместей. II. Конструкция и характеристики экспериментального оборудования

РЖХ, 1972, № 7Д265 Сл. на об.

Изучена диссоциация молек. ионов кислорода. Доказана предиссоциация состояния $B^2\Sigma_g^-$ O_2^+ по схеме $O_2^+(B^2\Sigma_g^-) \rightarrow O^+(^4S) + O(^3P)$.

O_2^+ Hinkley R.K.; et al. 1972

„Mol. Phys.",

расчет. 1972, 24, N 5, 1095-102.

„Конкур. спин-орбит. взаимод.

(см. ВеН; III)

O_2^+

1972

4 Б130. Эффективные сечения и функции возбуждения полос первой отрицательной системы O_2^+ и некоторых мультиплетов OI и OII. Коппе В. Т., Коваль А. Г., Данилевский Н. П., Попова Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1972, 33, № 3, 596—598

(σ)

Измерены эффективные сечения возбуждения (σ) четырех групп полос первой отрицат. системы иона O_2^+ (переход $b\,^4\Sigma_g^- — a\,^4\Pi_u$), мультиплета OI (5300A) и пяти мультиплетов OII (4650, 4591, 4415, 4185, 4072A). Энергию электронов варьировали в пределах 60—2000 эв. Значения σ для O_2^+ согласуются с лит. данными, вид функции возбуждения соответствует разрешенному оптич. переходу. Для OI и OII $\sigma \sim 10^{-21}$ см^2, вид функции возбуждения соответствует запрещенному оптич. переходу.

Д. И. Катаев

Х. 1973. № 4.

O_2; O_2^-; O_2^+; O_2^{2+} (спектр. данные) 1972

Обзор

К1 3241

Кочурепие Р. Н.

J. Phys. Chem. Ref. Data, 1972, 1, N2, 423-534 (англ.)

Spectrum of molecular oxygen.

10 8 Ф

(см. оригинал) CA, 1972, 77, N20, 132544e

O_2^+

1972

м. н.

Отчет по научно-исслед. работе ГПИ СССР, 1973 г.

Спектроскопия исслед. и электронно-лучевых свойств веществ.

HBr, BiF, BeF, IO, P_2, O_2^+ (I, Ei) 1972

9 13 11 15

Rai S.B., Sharma V.N., Rai D.K.

IX 393

Can. J. Phys., 1972, 50, N5, 428-430

(англ.)

On the validity of Fietz potential functions for diatomic molecules.

12

ВиеПиз, 1972, 9D153 10

7

O_2^+ Sandaram, Swaminatha 1972

„Spectrosc. Mol."
1972, 21 (245), 49-51.

„Limiting rotational states...

(cus. CN; III)

O_2^+

1972

170751c Electronic spectra. Rotational line strength. The O_2^+ $b^4\Sigma_g^-$-$a^4\pi_u$ band system. Zare, Richard N. (Dep. Chem., Columbia Univ., New York, N.Y.). *Mol. Spectrosc.: Mod. Res.* 1972, 207–21 (Eng). Edited by Rao, K. Narahari. Academic: New York, N.Y. The rotational line strengths deduced from the relative plate blackenings reported by others are compared with those calcd. numerically from the Hill-Van Vleck treatment for the $O_2^+(a^4\Sigma_g^-$-$b^4\pi_u)$ 1st neg. band system. A computer program takes into account the spin-orbit, the spin-spin, and the spin-rotation interactions, and the centrifugal distortion; only the spin-orbit interaction exerts significant influence on the magnitude of the rotational line strengths. Rotational line strength sums show good agreement between theory and expt. Edgar S. Peck

$b^4\Sigma$-$a^3\Pi$

C.A. 1972, 77, N26.

O_2^+ (XI-3504) 1973

12 Д500. Вращательный анализ $A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$ второй отрицательной системы полос O_2^+. Albritton D. L., Harrop W. J., Schmeltekopf A. L., Zare R. N. Rotational analysis of the $A^2\Pi_u$—$X^2\Pi_g$ second negative band system of O_2^+. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 1, 89—102 (англ.)

М.п.

Выполнен анализ существующих спектроскопич. данных для второй отрицат. системы O_2^+. Нелинейной подгонкой по методу наименьших квадратов, использующему численно диагонализированные гамильтонианы,

*25-14743

Ф. 1973 N 12

впервые определены полные совокупности молекулярных констант состояний $A^2\Pi_u$ и $X^2\Pi_g$. Кроме величин $\nu_0(v', v'')$, B_v и D_v определены константы спин-орбитального взаимодействия A_v. Для состояния $X^2\Pi_g$, которое близко к случаю Гунда (a), имеет место хорошее совпадение между найденными значениями $A_{v''}$ и предсказанными теорией. Значения $A_{v'}$, полученные для состояния $A^2\Pi_u$, которое близко к случаю Гунда (b), отличаются от теоретических как по величине, так и по зависимости от номера колебательного уровня. Состояние $A^2\Pi_u$ является обращенным для колебательных уровней $v' \leqslant 5$ и регулярным для уровней $v=6$—8. Определены коэф. разложения Дэнхема Υ_{i0} и Υ_{il} для верхнего и нижнего состояний и константа λ — удвоения состояния $X^2\Pi_g$. Библ. 19.

И. Дворников

O_2^+ (XI-3504) 1973

24 Б86. **Анализ вращательной структуры второй отрицательной системы полос перехода $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ иона O_2^+.** Albritton D. L., Harrop W. J., Schmeltekopf A. L., Zare R. N. Rotational analysis of the $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ second negative band system of O_2^+. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, № 1, 89—102 (англ.)

Из лит. данных по вращательной структуре 11 полос 2-й отриц. системы электронного перехода $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ иона O_2^+ нелинейным МНК с использованием полного электронно-колебательно-вращательного гамильтониана впервые вычислены значения всех спектроскопич. постоянных Y_{lj} и молек. параметров (B_v, D_v, ...) для состояний A и X иона O_2^+. Полученные значения по-

л.п.

Ж 25-1973

Ж. 1973 N 24

стоянной спин-орбитального взаимодействия A_v'' для основного состояния $X^2\Pi_g$, принадлежащего к случаю «a» по Гунду, согласуются с значениями, вычисленными неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО. Для возбужденного состояния $A^2\Pi_u$ (ближе к случаю «b» Гунда) эксперим. значения A_v' сильно отличаются от теоретических. Показано, что постоянная Λ-удвоения статистически значима только для состояния X, а постоянные спин-вращательного взаимодействия статистически неопределимы для обеих состояний. М. Р. Алиев

O_2^+

$A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$

1973

153381k Rotational analysis of the $A^2\Pi_u$-$X^2\Pi_g$ second negative band system of molecular oxygen(1+) ion. Albritton, D. L.; Harrop, W. J.; Schmeltekopf, A. L.; Zare, R. N. (Aeron. Lab., Natl. Oceanic Atmos. Adm., Boulder, Colo). *J. Mol. Spectrosc.* 1973, 46(1), 89–102 (Eng). Existing high-resoln. data for the O_2^+ $A^2\Pi_u$–$X^2\Pi_g$ 2nd neg. band system were analyzed by using a nonlinear least-squares fit that employs numerically diagonalized Hamiltonians. Values for the full set of mol. consts. of the $A^2\Pi_u$ and $X^2\Pi_g$ states were obtained for the 1st time. In addn. to values for $\nu_0(v', v'')$, B_v, and D_v, the values for the spin-orbit coupling consts. A_v were detd. for both states. For the $X^2\Pi_g$ state, which is near Hund's case (*a*), the agreement between these A_v'' values and those predicted by theory is good. However, for the $A^2\Pi_u$ state, which is much nearer to Hund's case (*b*), these A_v' values and theory disagree both in magnitude and in variation with vibrational level. The $A^2\Pi_u$ state is an inverted state for vibrational levels $v' \leq 5$ and is a regular state for levels $v' = 6$–8 (the upper limit of present high-resoln. data). Λ-doubling parameters were detd. for the $X^2\Pi_g$ state, the only state where Λ-doubling is statistically significant. Spin-rotation interaction is not statistically significant for either state. Dunham Y_{i0} and Y_{i1} expansion coeffs. were detd. for each state. Theor. D_v values are used to improve the B_v values in the redn. of the data.

C.A. 1973. 78. N24

$A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ 1-3-04

O_2^+

1973

илм. фотоизв. возб. сост.

Clerc M.
Nucl Sci.Abstr.
1973,27(2), 2385.

(см. N2; III)

O_2^+

1973

8 Б97. Усреднение по времени и разложение первой полосы фотоэлектронного спектра O_2 на отдельные компоненты. Dromey R. G., Morrison J. D., Peel J. B. Time-averaged and deconvoluted photoelectron spectrum of the first band of O_2. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 23, № 1, 30—33 (англ.)

Изучена 1-я полоса фотоэлектронного спектра O_2 на фотоэлектронном спектрометре с цилиндрич. электростатич. анализатором, связанном с ЭВМ, позволяющей производить усредненную по времени съемку спектра. Спектр снимался в течение двух часов. Каждая из трех полос, отвечающих различным колебательным состояниям 1-й электронной полосы O_2, была разложена на отдельные компоненты спин-орбитального расщепления. Для определения функции аппаратурного искажения использована линия $Xe^2P_{3/2}$. Полученная величина спин-орбитального расщепления для основного состояния O_2^+ (25 мэв) хорошо согласуется с данными молек. спектроскопии.

В. И. Нефедов

М. Н.

Х. 1974 N 8

(41) O_2 (спектр)

O_2^+

1973

129412w Translational energy spectrum of molecular oxygen(−) ions formed by 4 keV molecular oxygen(+) ions impacting on argon. Fehsenfeld, F. C.; Appell, J.; Fournier, P.; Durup, J. (Lab. Collisions Ioniques, Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *J. Phys. B* **1973**, 6(9), L268–71 (Eng). The translational energy spectrum of O_2^- arising from single and double collision double charge transfer between 4 keV O_2^+ ions and Ar atoms was recorded. The incident O_2^+ ions are either in the ground $\tilde{X}^2\Pi_g$ state or in the metastable $\tilde{a}^4\Pi_u$ state. The single-collision double charge transfer is obsd. only from metastable O_2^+ ions, ground state O_2^+ leading to autodetaching levels of O_2^-. This result gives evidence on the validity of Franck-Condon principle for mol. transitions occurring in double charge transfer processes.

CA1973 79; 22

(+1) O_2^-

O_2^+

1973

1Д337. Автоионизация и фотоэлектронные спектры кислорода. Kinsinger James A., Taylor James W. Autoionization and the photoelectron spectra of oxygen. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1973, 11, № 5, 461—474 (англ.)

По фотоэлектронным спектрам в области 800—850 Å исследована ридбергова серия кислорода, сходящаяся к состоянию $a^4\Pi_u O_2^+$. Полученные данные сопоставлены с результатами теоретич. работы Смита (см. РЖФиз, 1971, 4Д323). Показано, что в условиях автоионизации приближение Смита дает удовлетворительное совпадение рассчитанных и измеренных интенсивностей максимумов фотоэлектронного спектра. Сопоставление экспериментальных и теоретически рассчитанных спектров показало, что принятую ранее нумерацию колебательных уровней автоионизованного ридбергова состояния следует уменьшить на 1. Библ. 35. И. Дворников

фотоэл. спектры

Ф. 1974 № 1

O_2^+ V.T. Koppe et. al. I973

Opt. and Spectros. 33, 326 (I973)

Effective cross section and and excitation functions of the bands of the first negative system of O_2^+

O_2^+ 1973

Richardson W.C., Setser D.W. 1973

"J. Chem. Phys.", 1973, 58, № 5, 1809-1825.

(см. N_2^+, III)

смешанные полосы

40219.7557 TE, Ph, Ch	O_2^+ We ; WeXe 40892 τc	1973 1798

Tanako Ken-ichiro, Tanaka Ikuzo.
Photoelectron spectra from some autoionizing states of O_2 near the ionization threshold. "J. Chem. Phys.", 1973, 59, N9, 5042-5049

(англ.) 0047 ВИНИТИ

030 032 040

ВИНИТИ

40508.6004
TE,Ch

O_2^+ 40892 02

1974
2112

Ajello J.M., Huntress W.T., Lane A.L., LeBreton P.R., Williamson A.D.
Formation of HO_2^+ by reaction of metastable O_2^+ ions with H_2.
"J.Chem.Phys.",1974, 60, N4, 1211-1213
(англ.)

0106 ...

086 .087 — 09408 — ВИНИТИ

41203.8761
Ch,TC

40892 02

O_2^+

1974

* 4-7392

Ajello Joseph M., Pang Kevin D., Monahan Kevin M.
Formation of O_3^+ by the reaction of metastable O_2^+ ions with O_2.

"J.Chem.Phys.", 1974, 61, N 8, 3152-3154

(англ.)

0,247 пик

226 231

ВИНИТИ

O_2^+

1974.

Блинкова В. Г.,

м. п.
потенц.
кривые

Изв. высш. учебн. завед.
Физика,
1974, № 11, 43-47

(см. № 2; III)

Расчет м.и., полосы. прим
(N_2, N_2^+, CO, CO^+, O_2, O_2^+)

XI 4503

11,13,14 б.

Блинкова В.Б.

Изв. высш. учеб. заведений. Физика, 1944,
№ 11, 43-47.

Сравнительное изучение колебательных
спектров трехатомных молекулярных по-
лосы двухатомных молекул.

(Рис. Хим., 1945, 9654. 10

10

40708.7315
Ph,Ch,TC,MGU

O_2^+

42529

OL

1974
2183

Carbonneau R., Marmet P.

Electroionization spectrum of O_2.

"Phys.Rev.A:Gen.Phys.", 1974, 9, N 5, 1898-1901 (англ.)

(см. O_2; III)

113 123

ВИНИТИ

O_2^+

Harris H.H,
Crowley M.G. et. al.
„Chem Phys Lett" 1974, 29,
N4, 540-546 (англ)

1974

Эл. сост.

(см O_2; III)

Ж. 1975. N11

*Ч-7958 1974

O_2^+

O_2

Ei; Te

11 Б129. Фотоэлектронная спектроскопия промежуточных соединений в вакуумном ультрафиолете. Часть II. Использование фазочувствительного детектирования для наблюдения электронных состояний O_2^+. Jonathan Neville, Morris A., Okuda M., Ross K. J., Smith D. J. Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 2. The use of phase-sensitive detection for investigating the electronic states of O_2^+. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1974, Part 2, 70, № 11, 1810—1817 (англ.)

Исследованы He-I-фотоэлектронные спектры кислорода в состояниях $^3\Sigma_g^-$ и $^1\Delta_g$. Описана и обсуждена техника фазочувствительного детектирования, усиливающе-

XI-4374

(+1) ☒

х. 1975. N 11

го относительную интенсивность сигналов от промежут. соединений, находящихся в газоразрядной смеси. На основании расчетов молекулы O_2 с открытой оболочкой ограниченным методом ССП в приближении ЧПДП с учетом конфигурац. взаимодействия два доп. новые состояния O_2^+, наблюдающиеся в спектре $O_2(^1\Delta_g)$ по сравнению со спектром $O_2(^3\Sigma_g^-)$, идентифицированы как $^2\Delta_g$ и $^2\Phi_u$. Энергии состояний $^2\Phi_u$ и $^2\Delta_g$ превышают энергию ионного состояния $X^2\Pi_g$ на 6,59 и 7,72 эв соотв. Описана процедура, позволившая определять длины связей этих двух состояний и состояния $^2\Sigma_g^-$ при помощи сравнения наблюдаемых и рассчитанных по Франку-Кондону интенсивностей полос. Эти длины связей составляют 1,40; 1,33 и 1,30 А для состояний $^2\Phi_u$, $^2\Delta_g$, $^2\Sigma_g^-$ соответственно. Спектр, возбужденный излучением He-II, обнаруживает еще одно состояние O_2^+, к-рое предположительно идентифицировано как $^2\Delta_u$. Сообщ. I см. Faraday Disc. Chem. Soc., 1972, 54, 48. Резюме

O_2^+ *Ч-7958 1974

5 Д509. Фотоэлектронная спектроскопия промежуточных соединений при возбуждении в вакуумной УФ-области. Ч. 2. Использование фазового детектирования для исследования электронных состояний O_2^+. Jonathan Neville, Morris A., Okuda M., Ross K. J., Smith D. J. Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 2. The use of phase-sensitive detection for investigating the electronic states of O_2^+. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1974, Part 2, 70, № 11, 1810—1817 (англ.)

Получены фотоэлектронные спектры $O_2(^3\Sigma_g^-)$ и $O_2(^1\Delta_g)$ при возбуждении излучением HeI. Подробно

фото-эл. спектры (E_i)

Ф. 1975. N5

(+1) O_2 (E_i)

1374

XI-

рассмотрен метод фазового детектора, используемого для усиления относит. сигналов промежуточных продуктов микроволнового модулированного разряда в кислороде. Найдены два новых состояния O_2^+, присутствующие в спектре $O_2(^1\Delta_g)$. На основании расчетов методом ЧПДП ССП с учетом конфигурац. взаимодействия найденные состояния идентифицированы как $^2\Delta_g$ и $^2\Phi_u$. Определены энергии этих состояний и длины связей, полученные сравнением наблюдаемых интенсивностей полос с результатами франк-кондоновских расчетов. Интерпретированы также состояния O_2^+, полученные при возбуждении излучением HeII, а также методом ЭСХА. Библ. 22. Т. Н. Т.

O_2^+

He II

(M.n.)

#4-7958 1974

131732f Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. 2. Phase-sensitive detection for investigating the electronic states of dioxygen(1+). Jonathan, Neville; Morris, A.; Okuda, M.; Ross, K. J.; Smith, D. J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1974, 70(11), 1810-17 (Eng). The 2 new states of O_2^+ present in the $O_2(^1\Delta_g)$ vacuum-He I photoelectron spectrum which were absent in the $O_2(^3\Sigma_g^-)$ spectrum, both spectra being obtained by a phase-sensitive detection technique, were assigned to $^2\Delta_g$ and $^2\Phi_u$ with the aid of open shell INDO-SCF calcns. The energies and bond lengths of the 2 states were calcd., the latter by comparison of obsd. band intensities with those detd. by Franck-Condon calcn. The bond length of $^2\Sigma_g^-$ also detd. The new state obsd. in the He II spectrum was tentatively assigned to $^2\Delta_u$ and higher states of O_2^+ which were detected in ESCA studies were also assigned.

H-4374

(+1) ☒

C.A. 1975. 82. N20

O_2^+ XI-5286 * 8305-4, 1974

103552d Dissociative ionization in oxygen. Locht, R.; Schopman, J. (Dep. Chim. Gen., Chim. Phys. Sart Tilman, Liege, Belg.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1974, 15(4), 361–78 (Eng). Dissociative ionization in O_2 was examd. by means of a retarding potential lens combined with a quadrupole mass spectrometer. This particular arrangement made possible detailed anal. of the O^+ ions kinetic energy distribution and the measurement of threshold energies of O^+ ions with known kinetic energy. These two types of information bring new exptl. evidence, besides direct dissociative ionization of O_2, for predissocn. of the $B^2\Sigma_g^-$ state, the $^2\Pi_u$ state and the $c^4\Sigma_u^-$ state of O_2^+. A new predissocn. of the $O_2^+(^2\Delta_g)$ state was found. At low ion-energy the predissocn. of the $^2\Phi_u$ state or an autoionizing predissocn. is obsd.

предиссоц.

(см. также O_2, III)

C.A. 1975, 82 N 16

O_2^+

1974

1 Д187. Применение нового потенциала для вычисления интенсивности полос двухатомных молекул. Mirajkar S. M. Application of a new potential to the calculation of band intensities of diatomic molecules. «Indian J. Phys.», 1974, 48, № 12, 1057—1063 (англ.)

Исследовано общее решение радиального ур-ния Шрёдингера для двухатомной молекулы с потенц. ф-цией вида

$$U = -D_e - \frac{A}{r} - \frac{Ar_e}{r^2} + \frac{3A}{\alpha r_e^2} \exp\left[-\alpha (r - r_e)\right].$$

Выполнено численное интегрирование ур-ния Шрёдингера для состояний $A^2\Pi_u$ и $X^2\Pi_g$ иона O_2^+ и вычислены интегралы перекрывания колебательных волн. ф-ций для 144 переходов с v', $v'' \leqslant 11$ системы полос $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ O_2^+. Для переходов с v', $v'' \leqslant 6$ полученные значения интегралов перекрывания удовлетворительно описывают эксперим. данные.

М. Р. Алиев

уравн. Шредингер

(+1) 2х ат. молекул.

X

Ф 1976 N 1

O_2^+ (I) XT 4223 1974

Samson J. A. R.,
Petrovsky V. E.,

Phys. Rev. A: Gen. Phys., 1974, 9, N6,
2449-2452 (англ.)

Continuum ionization transition probabilities of atomic oxygen.

Pre Pus, 1974, 11D289 | 10 (P.)

O_2^+

XI-4305 1974

97479w Observation of predissociations in the oxygen molecular ion by low-energy electron impact. Schopman, J.; Locht, R. (Dep. Chim. Gen. Chim. Phys., Inst. Chim., Liege, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 26(4), 596–600 (Eng). The kinetic energy distribution of the 0.0–1.3 eV O^+ ions formed by dissociative ionization of O_2 was carefully examd. In the peak at 600 meV, fine structure was obsd. and was interpreted by predissocn. The high-energy side of the peak was ascribed to the predissocn. of the $^2\Delta_g$, $B\ ^2\Sigma_g^-$ and the $C\ ^4\Sigma_u^-$ states of O_2^+. The low-energy side of the peak was presumably due to the predissocn. of the $b\ ^4\Sigma_g^-$ state or the $^2\Phi_u$ state of O_2^+ or to autoionizing predissocn.

(Ab)

C.A. 1974. 81. N16

O_2^+ XI-4305 1974

11 Д260. **Наблюдение предиссоциационных состояний молекулярного иона кислорода, полученного при электронном ударе низкой энергии.** Schopman J., Locht R. The observation of predissociations in the oxygen molecular ion by low-energy electron impact. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 26, № 4, 596—600 (англ.)

С помощью квадрупольного масс-спектрометра с источником ионов типа Нира и системой тормозящих потенциалов изучено распределение по кинетич. энергии (КЭ) в диапазоне КЭ 0—1,3 эв осколочных ионов O^+, полученных при облучении электронами O_2 с энергией ~25 эв. Обнаружена тонкая структура пика при КЭ ~600 мэв, которая, по-видимому, связана с предиссоциацией состояний иона $O_2^+ {}^2\Delta_g$, $B^2\Sigma_g^-$, $C^4\Sigma^-$ (край пика, соответствующий бо́льшим энергиям) и $b^4\Sigma_g^-$ или ${}^2\Phi_u$ или предиссоциации с автоионизацией (край, соответствующий низким энергиям). В. Ю. О.

Масс спектрат.

Ф. 1375 N 1

(+1) м.с

41126.7920 TC	96201 02 O_2^+	1974 * 4-7351

Stockdale J.A.D., Delseanu Liliana.

Vibrational structure in kinetic energy spectra of O^+ ions from electron impact dissociative ionization of O_2: predissociation of the $B\ ^2\Sigma_g^-$ state of O_2^+.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 4, 588-589 (англ.)

0243 пик

226 226 - 235

ВИНИТИ

40906.1879 TC, Ch	O_2^+ 40892	1974 Ч-6067

West W.P., Cook T.B., Dunning F.B., Rundel R.D., Stebbings R.F. Chemiionization of O_2 molecules by helium metastable atoms.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 12, 5126-5127 (англ.)

152 156

ВИНИТИ

Pacum u.n. (CH, NH^+, OH, FH^+, CF, 11975
NO, O_2^+, BeH, BH^+, BeF, BO, CN, CO^+,
N_2^+, C_2, BH, NH, OH^+, C_2) IX-5750

Abegg P.W,
Mol. Phys, 1975, 30, N2, 579-596 (ang).

Ab initio calculation of spin-orbit coupling constants for gaussian basis and gaussian-type wave function.

PhXum, 1976, 3542 40 20

51003.7583
Ch,Ph,TC,MGU

40892
$O_2^+ (X^2\Pi_g)(\vartheta_i)$

1975
3358

Ajello Joseph M. A photoionization study of the formation of CO_2^+ by reaction of excited O_2^+ ions with CO. "J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 5, 1863-1867 (англ.)

0458 лиг

445 446

ВИНИТИ

$^{16}O\,^{18}O^+$ 1975

Bernstein R.B. et al.

Comments At. Mol. Phys.,

(μ) 1975, 5(1), 27-31.

(cm MD^+) III

O_2^+

1975

Блинкова В. Г. и др.

расчет колебат энергий

Томск 1975, 13 с, библиогр 6 назв. (Рукопись деп. в ВИНИТИ 2 июня 1975г, N 1560-75 деп)

(см N 2; III)

N_2, N_2^+, O_2, O_2^+, CO, CO_2^+ 1975

(кв. мех. расчет). XI-4759

Блинкова В.Г., Попова Т.Н.

Изв. высш. учебн. заведений.

Сер. Физика, 1975, 18 (7), 158.

Расчеты колебательных энергий 2х ат. молекул.

С.А. 1975. 83 № 22. 183715t 10

Ф 10

50703.7561 Ch,Ph,MGU,TC	41125 O_2^+ XT-442B?	1975 4123

Čársky P., Kuhn J., Zahradnik R. Semiempirical all-valence-electron MO calculations on the electronic spectra of linear radicals with degenerate ground states. "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 55, N 1-3, 120-130 (англ.) (см. CH, III)

377 378 0393 0401 пик ВИНИТИ

50721.4242
TC, Ch, Ph, MGU

O_2^+ (29864 D_0, r_e, ω_e)

1975
ХУ-9476

Dyke J.M., Golob L., Jonathan Neville, Morris A. Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 5. The $S_2(^3\Sigma^-_g)$ molecule. "J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1975, 71, N 5, Part 2, 1026-1036

0413 ПИМ
(англ.)

U 4005 ВИНИТИ

379 382

50627.2437
Ch, Ph, TC, MGU

O_2^+ 40892 фотоионизация кривые

1975
ХУ-9248

Dehmer P.M., Chupka W.A.
High resolution study of photoionization processes in O_2. "J. Chem. Phys.", 1975, 62, N 11, 4525-4534

0396 пик (англ.)

370 374

ВИНИТИ

CO, N_2, NO, C_2, CO^+, N_2^+, O_2^+ 1975
NO^+, O_2 (потенц. кривые). XI-4513

Finlan J., Simons G.,

J. Mol. Spectrosc., 1975, 57 (1),
1-13

11, 13, 14

Capabilities and limitations of an analytic potential expansion for diatomic molecules.

C.A. 1975, 83 n 10. 85246w

10

51128.3416
Ch,Ph,TC

O_2^+ 41125 (потенц. кривая)

1975
3570

Finlan J.Michael, Simons Gary. Capabilities and limitations of an analytic potential expansion for diatomic molecules.

[redacted] "J.Mol. Spectrosc.",1975,57,N 1,1-13 (англ.) (кн. CO; III)

0547-ин

480 481 509 ВИНИТИ

O_2^+

$(\mathcal{E}_i)$

ХЗ-8999 1975

19 Б154. Колебательная структура в фотоэлектронном спектре $O_2^{+2}\Sigma_g^-(\sigma_g 2s)$. Gardner J. L., Samson James A. R. Vibrational structure in the photoelectron spectrum of $O_2^{+2}\Sigma_g^-(\sigma_g 2s)$. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 315—316 (англ.)

С использованием аппаратуры, аналогичной описанной ранее авторами (J. Electron. Spectr., 1973, 2, 259), но с увеличенной разрешающей способностью, исследована колебательная структура фотоэлектронного спектра молекулы кислорода выше ее энергии ионизации. Обнаружены два уровня, разделенные энергией 0,071 эв, к-рые отнесены к конечному состоянию $O_2^{+2}\Sigma_g(\sigma_g 2s)$.

А. Зембеков

XI-4392

x 1975 N 19

O_2^+

XI-8999

1975

фотоэл.

18593u Vibrational structure in the photoelectron spectrum of molecular oxygen(+)$^2\Sigma_g^-$(σ_g2s). Gardner, J. L.; Samson, James A. R. (Behlen Lab. Phys., Univ. Nebraska, Lincoln, Nebr.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 32(2), 315-16 (Eng). Discrete vibrational structure was obsd. in the photoelectron spectrum of O at an ionization potential of 40.33 eV. Two levels, attributed to the $O_2^{(+)}{}^2\Sigma_g^-$ (σ_g2s) final state, were detected with a vibrational spacing of 0.071 eV.

XI-4392

C.A. 1975. 83 N2

O_2^+

Ки-8999 1975

10 Д402. Колебательная структура в фотоэлектронном спектре $O_2^+ {}^2\Sigma_g^-(\sigma_g 2s)$. Gardner J. L., Samson James A. R. Vibrational structure in the photoelectron spectrum of $O_2^+ {}^2\Sigma_g^-(\sigma_g 2s)$. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 32, № 2, 315—316 (англ.)

В He(I) (304 Å) фотоэлектронном спектре молекулярного кислорода в области низких значений энергии электронов обнаружена дискретная структура. Два максимума, соответствующие потенциалам ионизации 40,33 и 40,40 эв, приписаны колебательным уровням состояния $O_2^+ {}^2\Sigma_g^-(\sigma_g 2s)$. И. Дворников

фотоэл. спектр
I: колеб. уровни

XI-4392

Ф. 1976 № 10

*45-9230 1975

O_2^+

(Фо)

Ф. 1975 N10

10 Д401. Фотоионная и фотоэлектронная спектроскопия кислорода. Gardner J. L., Samson James A. R. Photoion and photoelectron spectroscopy of oxygen. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 11, 4460—4463 (англ.)

Измерены распределения энергии фотоионов и фотоэлектронов, образующихся при облучении молекулярного кислорода излучением в области до 304 Å, выделяемым монохроматором из свечения разряда в гелии и неоне. Приведены подробные описания спектров, полученных при разрешении 150 мэв для ионов и 45 мэв для электронов. В результате сопоставления и анализа фотоэлектронных и фотоионных спектров получены уточненные значения энергии диссоциации для состояний $^2\Pi_u$, $c^4\Sigma_u^-$, и $^4\Sigma_g^-$ молекулярного иона кислорода. Рассмотрены возможные варианты интерпретации структуры спектров в области более высоких энергий.

В. А.

41-4576

O_2^+

O_2

фотоэл. спектроск.

*Ч-9230 1975

19 Б151. Фотоионная и фотоэлектронная спектроскопия кислорода. Gardner J. L., Samson James A. R. Photoion and photoelectron spectroscopy of oxygen. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 11, 4460—4463 (англ.)

Измерено распределение кинетич. энергии фотоионов и фотоэлектронов O_2 при ионизации монохроматич. УФ-излучением с переменной λ вплоть до 304А. Путем сопоставления энергий и интенсивностей в ионных и электронных спектрах при каждой длине установлено, что уровни $^2\pi_u$ (III), $c^4\Sigma_u^-$ и $^4\Sigma_g(\sigma_g 2s)$ соответствуют пределам диссоциации иона O_2^+. Дана интерпретация всех остальных пиков фотоионного спектра. Резюме

№ 4576

(+1)

ж 1975 N 19

O_2^+ 1975

Lindinger W., et al

nagbuzen. J. Chem. Phys.,

nonb. 1975, N9, 62, 3517-3522.

(см H_3^+; III)

51203.8834
Ch,Ph,TC,Gph,
MGU

40892
O_2^+ (попер. сечен.)
иониз.

1975
3486

Märk T.D.

Cross section for single and double ionization of N_2 and O_2 molecules by electron impact from threshold up to 170 ev.
"J.Chem.Phys.",1975,63,N 9,3731-3736
(англ.) (Сеч. N_2^+, III)
0500 пик

480 486

ВИНИТИ

O_2^+

4 - 10025

1975

XI - 5291

[illegible]19w Application of a new potential to the calculation [illegible]and intensities of diatomic molecules. Mirajkar, S. M. [illegible] (Coll., Satara, India). *Indian J. Phys.* 1975, 48(12), [illegible]3 (Eng). The potential function suggested by Mirajkar [illegible] and the overlap integral method of Wu (1952) were used [illegible] the intensities of the 2nd neg. bands of O_2^+. The result [illegible] these calcns. are compared with exptl. ones and possible [illegible]s for the discrepancies between the 2 are discussed.

E. O. Forster

[illegible] Densities and molar volumes of molten tetra-n-al-

поменуз. р-ция

C.A. 1975. 82. N26

O_2^+ +15-9269 1975

22 Б126. **Вращательный анализ эмиссионной системы Хопфилда O_2^+.** Ogawa H. S., Ogawa M. Rotational analysis of the Hopfield emission system of O_2^{+1}. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 56—65 (англ.)

Выполнен вращательный анализ системы Хопфилда в спектре излучения радикала O_2^+ в области длин волн от 1900 до 2400 А для полос 0—0, 0—1, 0—2, 0—3, 0—4, 0—5 и 0—6. В спектре наблюдали спиновое расщепление вращательных линий. Определены вращательные постоянные для верхнего состояния $c^4\Sigma_u^-$: $B_0=1{,}5615$ см$^{-1}$, $D_0=6{,}7\cdot10^{-6}$ см$^{-1}$ и для нижнего состояния $b^4\Sigma_g^-$ с $v=0$, 1, 2, 3, 4, 5, 6. Измерены положения голов полос. Определены молек. постоянные для состояния $b^4\Sigma_g^-$: $B_e=1{,}2875\pm0{,}0005$ см$^{-1}$, $\alpha_e=0{,}0225\pm0{,}0005$ см$^{-1}$, $\omega_e=1197{,}8$ см$^{-1}$, $\omega_e\chi_e=17{,}3$ см$^{-1}$. Для разности между расщеплением верхнего и нижнего состояния, связанным со спин-спиновым взаимодействием, получено значение 0,87 см$^{-1}$. Полученные результаты хорошо согласуются с лит. данными. С. Н. Мурзин

(ū, n)

XI-4494

Х. 1975 № 22

O_2^+

#4 -9269 1975

(m, n)

177614x Rotational analysis of the Hopfield emission system of molecular oxygen(+) ion. Ogawa, H. S.; Ogawa, M. (Dep. Phys., Univ. California, Los Angeles, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 55(1-3), 56-65 (Eng). The spectrum of the Hopfield emission bands of O_2^+, $c^4\Sigma_u^- - b^4\Sigma_g^-$ was reinvestigated with improved resolution. Spin splitting of the rotational lines was obsd. for the 1st time, and the difference between the upper- and lower-state splittings due to spin-spin interaction was $3\epsilon' - 3\epsilon'' = 0.87$ cm^{-1}. A rotational anal. was made for 7 bands, 4 of which (0-0, 0-1, 0-2, and 0-3) are new. The rotational consts. for the upper state $c^4\Sigma_u^-$ are $B_0 = 1.5615$ cm^{-1} and $D_0 = 6.7 \times 10^{-6}$ cm^{-1}. For the lower state $b^4\Sigma_g^-$, the rotational consts. B_v and D_v are obtained for $v = 0$-6 and the vibrational consts. are $\omega_e = 1197.8$ cm^{-1} and $\omega_e x_e = 17.3$ cm^{-1}.

Om XI-4494

C.A. 1975. 82. N26

O_2^+

Ks-9202 1975

XI-4403

18216y Variation of the spin-orbit coupling in molecular oxygen(+) ion. Raftery, J.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *J. Chem. Phys.* 1975, 62(8), 3184-7 (Eng). Anal. of the $A\ ^2\Pi_u$–$X\ ^2\Pi_g$ band system of O_2^+ shows that the spin-orbit coupling consts. for both states vary markedly with vibrational quantum no.; in addn., the sign of that for certain levels of the $A\ ^2\Pi_u$ state is uncertain. This is adequately explained for the $X\ ^2\Pi_g$ state on the basis of a variation of the electronic expectation value of the spin-orbit coupling with internuclear distance, the major variation coming not from the variation of the contributions of the 4 configurations in the wavefunction, but from variation with internuclear distance of the form of the $1\pi_g$ orbital. For the $A\ ^2\Pi_u$ state, it was not possible to obtain quant. agreement, since the coupling const. in this case is a small no., the difference between 2 large quantities. However, it seems clear that in this case the variation was mainly due to variation in the contributions of the various configurations.

(M, n)

C.A. 1975. 83 N2

O_2^+

потенц. кривые

м.п.

х 1975 № 19

1975

19 Б29. О вариации спин-орбитального взаимодействия в O_2^+. Raftery J., Richards W. G. On the variation of the spin-orbit coupling in O_2^+. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 8, 3184—3187 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые и константы спин-орбитального взаимодействия состояний $X^2\Pi_g$ и $A^4\Pi_u$ иона O_2^+. Использован ограниченный метод ССП с базисом слейтеровских функций (11 σ- и 6 π-функций на каждом ядре). Найдено, что константа спин-орбитального взаимодействия A_v в состоянии $X^2\Pi_g$ уменьшается с увеличением колебат. квантового числа v и очень чувствительна к изменению $1\pi_g$-орбитали при вариации межъядерного расстояния. Для A_v состояния $A^4\Pi_u$ наблюдается та же зависимость от v, а изменение ее при вариации межъядерного расстояния зависит, в основном, от характера вкладов в волновую функцию различных вырожденных по энергии конфигураций. Рассчитанные значения констант спин-орбитального взаимодействия количественно согласуются с эксперим. значениями, за исключением случая $A^2\Pi_u$. А. Дементьев

9202

4403

O_2^+

Х4-9202

1975

10 Д162. К изменению спин-орбитальной связи в O_2^+. Raftery J., Richards W. G. On the variation of the spin-orbit coupling in O_2^+. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 8, 3184—3187 (англ.)

С целью выяснения зависимости константы спин-орбитальной связи A_v от колебательного квантового числа v в мол. O_2^+ рассчитаны величины A_v для трех электронных состояний: $X^2\Pi_g$, $a^4\Pi_u$ и $A^2\Pi_u$. Расчеты проводились неэмпирическим ССП МО ЛКАО методом в базисе 22σ- и 12π-ф-ций с оптимизацией базисных экспонент. Во всех трех состояниях учитывалось наложение четырех конфигураций. В случае первых двух состояний получено хорошее согласие (в пределах 10%) с эксперим. значениями A_v для всех колебательных чисел, и зависимость A_v от v объясняется здесь изменением вида $1\pi_g$-орбитали с изменением межатомного расстояния. Для $A^2\Pi_u$-состояния эксперим. данные неоднозначны. Результаты расчетов имеют в этом случае более низкую точность, т. к. являются малыми разностями двух больших чисел. Сравнение эксперим. данных с расчетными позволяет сделать вывод, что за зависимость A_v от v в последнем случае ответственно в основном изме-

Min.

Ф. 1975 N 10

XI-4403

нение вкладов различных конфигураций в данное состояние с изменением v. Подчеркивается необходимость более точного расчета константы спин-орбитальной связи для $A^2\Pi_u$-состояния.

Е. П. Смирнов

XI-4504 1975

O_2, O_2^+ (спект., мол. пост.)

Ogawa M., Yamawaki K.R., Hashizume A., Tanaka Y.

J. Mol. Spectrosc., 1975, 55, N1-3, 425-429

10

есть ф-к

60413.8554
Ch,Ph,TC,MGU

O_2^+ 35247 (и.п) ж

1975
9-12605

Ogawa Masaru. Rotational analysis of the absorption spectrum of heavy [redacted] oxygen ($^{18}O_2$) in the region 1200-1285 Å. "Can.J.Phys.",1975,53,N 24,2703-2711 (англ.,рез.франц.)

0599 [redacted]

569 572

ВИНИТИ

O_2^+

Оттиск А-2948 1975

Радциг А.А.

(см. п; Do J, см. пос)

В сб. „Химия пищевых" 1975, вып 2, 3-61, М, Агропромиздат.

(см № 2, III)

O_2

(Y)

*Ку-11186 1975

84: 37132e Ionization potential of molecular oxygen. Samson, James A. R.; Gardner, J. L. (Behlen Lab. Phys., Univ. Nebraska, Lincoln, Nebr.). *Can. J. Phys.* 1975, 53(19), 1948–52 (Eng). The ionization potential of O_2 was measured by the technique of high resoln. photoelectron spectroscopy taking into account the influence of rotational structure on the shape of the vibrational bands. A value of 12.071 ± 0.001 eV (1027.1 ± 0.1 Å) was found for the ionization potential. This value leads to a dissocn. energy of $D_0(O_2^+ \; X^2\Pi_g) = 6.661 \pm 0.001$ eV. A lowering of the ionization potential caused by a branch head when $\Delta N = -2$ gave an appearance potential for ionization of 12.068 ± 0.001 eV (1027.4 ± 0.1 Å).

С.А. 1976. 84. N 6

1971. O_2^+

IX – 5452

Sannigrahi A.B., Mohammad S.N.,
Indian J. Pure and Appl. Phys., 1975, 13,
N 12, 811-815 (англ.)

[illegible] of extended Hückel
[illegible] the first-row
[illegible] diatomics.

РЖФ, 1977, 3Д110

10 (p)

O_2^+ 1975

Tal V.

гом. молекул „Mol. Phys" 1975, 30, N2, 621-27 (англ)

(см He_2; III)

отмечен 3402 1975

O_2^+

VO

тонкая структ

(2 Д132.) Тонкая структура $^4\Pi$-состояний двухатомных молекул. Veseth L. Fine structure of $^4\Pi$ states in diatomic molecules. «Phys. scr.», 1975, 12, № 3, 125—128 (англ.)

Тонкая структура $^4\Pi$-состояния двухатомной молекулы определена путем численной диагонализации матрицы возмущения 4-го порядка. Соседние электронные состояния учтены во 2-м порядке теории возмущений с помощью преобразования Ван-Флека. Центробежное искажение также учтено в матричных элементах. Результаты расчетов применены для получения термов $a^4\Pi_u$-состояния O_2^+ и $B^4\Pi$-состояния VO. Некоторое расхождение рассчитанных величин с экспериментальными для VO объясняется тем, что во 2-м порядке теории возмущений не учтены близлежащие колебательные уровни состояния $^4\Sigma$. И. В. Лебедь

Ф 1976 N2 (+) м.с (+1) ☒

O_2^+ отнесен 3402 1975

VO

3 Б45. **Тонкая структура состояний $^4\Pi$ двухатомных молекул.** Veseth L. Fine structure of $^4\Pi$ states in diatomic molecules. «Phys. scr.», 1975, 12, № 3, 125—128 (англ.).

Проведено уточнение и пересмотр теории тонкой структуры состояний $^4\Pi$ двухатомных молекул. Основное внимание уделено построению ур-ний, удобных для численного решения. Предложенный подход основан на численной диагонализации матрицы возмущений для четырех $^4\Pi$ подуровней. При этом описании в общем случае используется только квантовое число Ω и оно может быть применено как к чистым случаям Гунда (*a*), (*b*), (*c*), (*e*), так и к промежут. случаям. Для расчета структуры состояний $^4\Pi$ используется также базис, характерный для случая Гунда (*a*), что позволяет существенно уменьшить число используемых параметров. Взаимодействие состояния $^4\Pi$ с другими элек-

тонкая структ.

X 1976 N3 (+1) ☒

тронными состояниями учтено в рамках теории преобразований Ван—Флека с точностью до второго порядка. Развитая модель применена к расчету $a^4\Pi_u$ состояния O_2^+. Получено отличное согласие теор. значений с эксперим. для четырех нижних колебательных уровней и для значений J вплоть до $\simeq 40$. Обнаружено, что матричные элементы оператора спин-спинового взаимодействия, отвечающие изменениям квантовых чисел $\Delta\Lambda = -\Delta\Sigma = \pm 2$ вносят существенный вклад в величину Λ-удвоения. Проведен также теор. расчет $B^4\Pi$-состояния молекулы VO. При этом учтены все параметры для случая Гунда (c), а взаимодействие с состояниями $^4\Sigma$ и $^2\Sigma$ учтено с точностью до второго и третьего порядков, соотв. Для $^4\Pi_{1/2}$ подуровня обнаружено систем. различие между эксперим. и теор. значениями. Предположено, что это расхождение может быть объяснено взаимодействием с возбужденным колебательным уровнем состояния $X^4\Sigma^-$. Б. И. Жилинский

O_2^+ Omnieu 3402 1975

VO

теорет. результ. тонкая структ.

84: 9100z **Fine structure of $^4\pi$ states in diatomic molecules.** Veseth, L. (Inst. Phys., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Phys. Scr.* 1975, 12(3), 125-8 (Eng). The fine structure theory of $^4\pi$ states in diat. mols. is reconsidered from the point of view of exact numerical diagonalization of the 4-by-4 perturbation matrix. The interaction with other electronic states is accounted for through a 2nd order Van Vleck transformation. Centrifugal distortion corrections are also added to the matrix elements, and a new spin-spin matrix element of the type $\Delta\Lambda = -\Delta\Sigma = \pm 2$ is in particular found to contribute to the Λ-doubling. The theoretical results are applied to the $a^4\Pi_u$ state in O_2^+ and the $B^4\Pi$ state in VO.

C.A. 1976 84 N2

O_2^+

1976

Arce F., et al.

An. quim. Real. soc. esp. fis. y quim., 1976, 72, N6, 505-8.

(расчет см. ист.)

(см. Li_2, III)