

1971

NO

1971

8 Д365. ИК- и видимый спектр испускания молекулы NO. Полосы $^2\Delta-^2\Pi$ переходов $3d-3p$ и $4d-3p$ между ридберговыми комплексами. Ackerman F. Infrared and visible emission spectrum of the NO molecule. The $^2\Delta-^2\Pi$ bands of the $3d-3p$ and $4d-3p$ transitions between Rydberg complexes. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 1, 76—89 (англ.)

Исследованы эмиссионные полосы $^2\Delta-^2\Pi$ переходов $3d-3p$ и $4d-3p$ между ридберговыми комплексами в

Е,
М, К.

XIV
750
BPP



ф. 1971, 2А

молекуле NO. Спектры возбуждались разрядом в потоке смеси Ag+NO и фотографировались с дисперсией 0,25 Å/мм. Выполнен вращательный анализ двух взаимосвязанных полос $B'^2\Delta - C^2\Pi (7,0) \rightarrow N^2\Delta - C^2\Pi (0,0)$ и $N^2\Delta - C^2\Pi (0,0) \rightarrow B'^2\Delta - C^2\Pi (7,0)$ в области 6620—6520 Å (переход $N^2\Delta(4d\delta) - C^2\Pi(3\rho\pi)$) и двух полос $B'^2\Delta - C^2\Pi (4,1) \rightarrow F^2\Delta - C^2\Pi (1,1)$ и $F^2\Delta - C^2\Pi (1,1) - B'^2\Delta - C^2\Pi (4,1)$ в области 10 150—10 500 Å (переход $F^2\Delta(3d\delta) - C^2\Pi(3\rho\pi)$). Верхние уровни в этих переходах представляют собой смешанные состояния, переходящие с увеличением вращения из ридберговских состояний в валентные и наоборот. Нижние уровни состояния $C^3\Pi$ также смешаны с уровнями валентного состояния $B^2\Pi$. Приведены результаты анализа вращательной структуры. Библиография. 13.

И. Дворников

NO

1971

14 Б118. Эмиссионный спектр молекулы NO в инфракрасной и видимой областях. Полосы ${}^2\Delta-{}^2\Pi$ переходов $3d-3p$ и $4d-3p$ между ридберговскими комплексами. Ackermann F. Infrared and visible emission spectrum of the NO molecule. The ${}^2\Delta-{}^2\Pi$ bands of the $3d-3p$ and $4d-3p$ transitions between Rydberg complexes. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 1, 76—89 (англ.)

Исследован видимый эмиссионный спектр молекулы NO в разряде. В области 6620—6520 Å проанализирована вращательная структура ряда колебательных полос системы ридбергового электронного перехода $N^2\Delta-C^2\Pi$. Выполнен также анализ лит. данных для системы полос

M. N.

X. 1971. 14

(III)
B97-750-XIII

$F^2\Delta - C^2\Pi$ вблизи 10340 Å. Обнаружены Λ -удвоение и спиновое удвоение линий в системе $N-C$ и ряд локальных аномалий в положении и интенсивности линий в системах $N-C$ и $F-C$. Показано, что ридберговый характер уровней N и $F^2\Delta$ зависит от вращательного состояния и уменьшается с ростом квантового числа N . Определены значения колебательно-вращательных постоянных уровней C , N и FNO .

М. Р. Алиев

NO

1971

(81304e) Infrared and visible emission spectrum of the nitric oxide molecule. ${}^2\Delta-{}^2\Pi$ Bands of the 3d-3p and 4d-3p transitions between Rydberg complexes. Ackermann, Fritz (Inst. Phys., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Can. J. Phys.* 1971, 49(1), 76-89 (Eng). The 2 mutually related bands $B'^2\Delta-C^2\Pi$ (7,0) $\rightarrow N^2\Delta-C^2\Pi$ (0,0) and $N^2\Delta-C^2\Pi$ (0,0) $\rightarrow B'^2\Delta-C^2\Pi$ (7,0) are obsd. with high resolu. between 6620 and 6520 Å in the emission spectrum of the NO mol. They are the ${}^2\Delta-{}^2\Pi$ part of the 4d-3p transitions between the 2 Rydberg states $N^2\Delta(4d\delta)$ and $C^2\Pi(3p\pi)$ of the mol. A rotational anal. is carried out for both bands, and the very close similarity of the structure of these bands with the structure of the corresponding ${}^2\Delta-{}^2\Pi$ bands of the 3d-3p transitions, obsd.

M. n.

BP-750-XIN

C.A. 1971. 74. 16

in the ir, is demonstrated. The 2 upper levels in these $nd-3p$ transitions represent examples of mixed states showing complete changeover with increasing rotation from the Rydberg type with no spin-orbit coupling to an inverted valence type and vice versa. The behavior of the doublet splitting is studied with regard to this changeover. The lower levels of the Rydberg state $C^2\Pi$ also are mixts. with levels of a valence state. The mixing with $B^2\Pi$ ($v = 7$) is comparatively small in the $C^2\Pi$ ($v = 0$) level, but it strongly affects the energy levels with the lowest J values. The beginning of one of the 2 bands obsd. in the visible, therefore, forms the (7,7) band of the system $B'^2\Delta-B^2\Pi$. Consts. of the states involved are detd. RCCN

1971

5 Д317. Фотоэлектронная спектроскопия автоионизационных состояний двухатомных молекул. Bahr J. L., Blake A. J., Carver J. H., Gardner J. L., Kumar Vijay. Autoionization in diatomic molecules studied by photoelectron spectroscopy. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1971, 11, № 12, 1839—1852 (англ.)

Получены фотоэлектронные спектры для четко выраженных резонансов, обусловленных автоионизационными состояниями ~~NO~~ ($\lambda=941,6; 897,3; 832,5; 825; 810,6; 783,6$ и $771,3$ Å); ~~N₂~~ ($\lambda=775,7; 771,6; 765,2; 761,2; 754,3$ и $744,5$ Å) и ~~CO~~ ($\lambda=838,5; 827,8; 807,1$ и $796,8$ Å). В отличие от нерезонансного случая при резонансном возбуждении наблюдается колебательная структура, включающая переходы на более высокие колебательные уровни в соответствии с принципом Франка—Кондона. Анализ колебательной структуры спектров позволяет вычислить равновесные меядерные расстояния для возбужденных электронных состояний, ответственных за автоионизационные резонансы. Библ. 19. В. Александров

Ф. 1972. 52.

+2



NO

XIII - 1945

1971

135286s Vibronic interaction matrix for the states $B^2\Pi + C^2\Pi$ of nitric oxide. Bartholdi, E.; Leoni, M.; Dressler, K. (Lab. Phys. Chem., Eidg. Tech. Hochsch., Zurich, Switz.). *Z. Angew. Math. Phys.* 1971, 22(4), 797-9 (Eng). Diagonal matrix elements and Rydberg-Klein-Rees potentials of the B and C states were obtained from previously detd. unperturbed terms and rotational consts. (B_v). Results up to B_{21} and C_3 were improved by decreasing B_v above the level B_{12} and increasing B_v above C_3 , until the variation of the vibrational overlap integral $S_{10}^{B,C}$ with isotopic mass agreed with the exptl. dependence of the interaction energy $H_{10}^{B,C}$.
W. J. R. Tyerman

noieny.

кпубве

B u C

coctos.

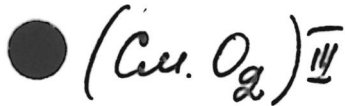
C.A. 1971. 45.22

NO

Berkowitz J., et al. 1971

de

J. Chem. Phys., 1971,
55, ~6, 2433.



J (N_2 , O_2 , CO , NO , C_2H_4 - paper) 1971

Betts T., McKoy V., " 13 14
XI 863

J. Chem. Phys., 1971, 54, 11, 113-123 (avv.)

Rydberg states of diatomic and
polyatomic molecules using model
potentials.

Proc Roy, 1971, 62 143

10

70 n.

1971

NO

cell. uor 05.

Boyd R. Y.
Whitehead L.A.

J. Chem. Soc.,

y

1944, A, ~ 22, 3579

(Cell. BM) III

Сравнение орбит Меркурия и Венеры
по методу Лавуазье (3 V)

Система координат.

М-но	Орбит.	I	II	III	IV	Эксцент.
NO	κ	12.34	10.23	12.23	10.11	9.80 κ
	~	15.60	13.54	16.09	14.04	15.65
	κ	15.99	13.88	16.14	14.03	16.52
	~	23.94	23.11	25.37	24.76	18.26
	~	38.49	38.31	33.46	34.97	

NO

1971

16 B1086. Новые наблюдения хемилюминесценции β -полосы окиси азота. Campbell I. M., Neal S. B., Golde M. F., Thrush B. A. New observations on nitric oxide β band chemiluminescence. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 8, № 6, 612—614 (англ.)

К струе азота, прошедшего область СВЧ-разряда, добавляли NO. При реакции получившихся при титровании $(N + NO = N_2 + O)$ атомов O с N возникала хемилюминесценция, отвечающая переходу $B^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$ (β -полоса), интенсивность которой I подчиняется закону: $[N][O][M]/I = A + B[N] + C[O]$. A/B и A/C линейно растут с ростом давления. $C > 0$ для $v' = 0$, $C < 0$ для $v' = 1$ и $C \approx 0$ для $v' = 3$. Результаты объяснены процессами, происходящими при столкновениях атомов O и N с $NO(a^4\Pi)$ и с

спектр
вчз-,
а⁴П,
вч7

X. 1971. 16

$\text{NO}(b^4\Sigma^-)$ — предшественниками состояния $B^2\Pi$. Последние либо дезактивируются, либо реагируют химически при встрече с O , N и O_2 , обладающими неспаренными электронами и облегчающими поэтому запрещенные по спину переходы и р-ции. Поведение уровня $v'=1$ можно объяснить, если O в 150 раз эффективнее, чем N_2 , индуцируют переход $b^4\Sigma^- \rightarrow B^2\Pi v'=1$, в то время как атомы N в два раза менее эффективны, чем O , но не индуцируют переход, а реагируют, приводя к N_2 и O . Этот переход индуцируется и молекулой O_2 (эффективность в 2—3 раза больше, чем у N_2); но, кроме того, O_2 тушит состояние $B^2\Pi$. Аналогичного заселения уровня $v'=0$ не происходит, потому что он лежит ниже уровня $b^4\Sigma^-$. Скорости всех упомянутых процессов слабо зависят от температуры.

Р. Васильев

O₂, NO(A) " 13 XI 2677 1971

Chantry P.J.,
J. Chem. Phys., 1971, 55, N6, 2746-59
(atmos.).

Doppler broadening in beam
experiments.

2

10



CA, 1971, 75, N18, 113064r

NO, N_2 , O_2

13

XIII 1979

1971

Collin Y.E., Delwiche J., Natalis P.,
Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.
1971, 7, N1, 19-26 (ann.)

Energy levels of NO^+ ion by He and
Ar resonance lines photoelectron
spectrometry. Y. Fujisawa &
P. H. Kuo, 1972, 65/30 Waib  (P)

NO

XII-2031-BP

1971

NO⁺

3 Г80. О фотоэлектронном спектре NO. Edg-
vits O., Asbrink L., Lindholm E. On the pho-
toelectron spectrum of NO. «Z. Naturforsch.», 1971, 26a,
№ 9, 1407—1410 (англ.)

спектр
м.п.

Зарегистрированы фотоэлектронные спектры NO при
длинах волн возбуждающего света $\lambda 584 \text{ \AA}$ (разрешение
10 мэв, что позволяет наблюдать спин-орбитальное взаи-
модействие) и $\lambda 304 \text{ \AA}$ (разрешение 25 мэв) и определе-
ны положения полос с точностью ± 3 мэв с помощью
калибровок по Ar. Найдено, что спектр применявшегося
источника света (резонансной He-лампы), кроме глав-
ных линий, содержит также линию $\lambda 320, 399 \text{ \AA}$, которая
вызывает появление «духов» при 18,7; 20,4 и 23,8 эв.
Поэтому пик 20,4 эв, приписанный ранее (РЖФиз, 1971,
5 Д236) новому состоянию $c^3\Pi \text{ NO}^+$, на самом деле

ф. 1972. 317

+1



соответствует состоянию $A^1\P NO^+$, наблюдаемому для $\lambda 320 \text{ \AA}$. При $\lambda 304 \text{ \AA}$ в области 20—26 эв наблюдались 2 отдельные полосы: при 23,6 эв полоса, приписанная состоянию $B^1\Sigma^+ NO^+$, что доказано анализом полностью разрешенной колебательной структуры, интенсивности и сравнением со спектрами изоэлектронных молекул CO и N_2 (для всех 3 частиц колебательная энергия очень мала, $\sim 700 \text{ см}^{-1}$); вторая полоса при 21,7 эв с нерегулярной структурой разложена на 2 составляющих — одиночный интенсивный пик при 21,72 эв состояния $c^3\P$ и системы полос из 5—6 пиков с колебательной энергией $\sim 50 \text{ мэв}$ состояния $B^1\P$. При $\lambda 584 \text{ \AA}$ в спектрах обнаружены полосы состояний $X^1\Sigma^+$, $a^3\Sigma^+$, $b^3\P$, $\omega^3\Delta$, $b'^3\Sigma^-$, $A'^1\Sigma^-$, $A^1\P W^1\Delta$ и определены параметры колебательной структуры. Для всех полос, кроме $b^3\P$ и $X^1\Sigma^+$, обнаружено спин-орбитальное расщепление ~ 12 —16 мэв.

В. Е. Скурат

NO +
NO

подробно
список

XIII - 2031 - B7/941

(8697x) Photoelectron spectrum of nitric oxide. Edqvist, O.; Asbrink, L.; Lindholm, E. (Dep. Phys., Inst. Technol., Stockholm, Swed.). *Z. Naturforsch. A* 1971, 26(9), 1407-10 (Eng). The photoelectron spectra of NO were measured using the 584 Å and 304 Å He lines at high resolution, and the energies of the bands were detd. by calibration against Ar. A weak He I line was found to cause the small peak at 20.4 eV which had been assigned earlier as the $c^3\Pi$ state. The $c^3\Pi$ and $B^1\Pi$ states had nearly the same energy, 21.7 eV. The vibrational structure of the $B^1\Sigma^+$ state at 22.5 eV was resolved.

C.A. 1971. 70. 2

NO

1) 16 Б126. Наблюдение β - и γ -полос окиси азота во время импульсного фотолиза нитрозилхлорида. Engleman R., Jr, Rouse P. E. The β and γ bands on nitric oxide observed during the flash photolysis of nitrosyl chloride. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 2, 240—251 (англ.)

УФ-спектр поглощения β - и γ -последовательностей полос NO сфотографирован с высоким разрешением при импульсном фотолизе ClNO в атмосфере Ar. Проведены измерения и отнесения для 11 полос β -системы и 17 полос γ -системы NO, к-рые наблюдались в спектральной области 2700—3100 Å. Определены молек. константы для $v''=0, 1, \dots, 16$ основного состояния $X^2\Pi$ и для $v'=0, 1, \dots, 5$ обоих возбужденных состояний $A^2\Sigma$ и $B^2\Pi$.

О. Г. Гадкуша

М. Н.

X. 1971. 16

1971

987-486
1971-III-68



NO

BP-XIII-1766

1971

U.N. (58983s) β and ω Bands of nitric oxide observed during the flash photolysis of nitrosyl chloride. Engleman, Rolf, Jr.; Rouse, P. E. (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 37(2), 240-51 (Eng). The uv β - and γ -band systems of NO were photographed at high resolu. following the flash photolysis of NOCl in excess Ar. Between 2700 and 3100 Å, 17 bands of the NO γ system and 11 bands of the NO β system were found and analyzed. Mol. consts. were derived for $v'' = 0, 1, \dots, 16$ of the $X^2\Pi$ ground state, and $v' = 0, 1, \dots, 5$ for both the $A^2\Sigma$ and $B^2\Pi$ excited states. RCKP

+1

C.A. 1971. 74. 12



NO

ВФ-ХIII-466

1971

Дубоз. β и γ -полосы окиси азота, наблюдаемые при импульсном фотолизе хлористого нитрозила. Engleman R., Jr, Rouse P. E. The β and γ bands on nitric oxide observed during the flash photolysis of nitrosyl chloride. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 2, 240—251 (англ.)

С высоким разрешением изучены ультрафиолетовые β - и γ -системы полос NO при импульсном фотолизе хлористого нитрозила с избытком аргона. В области 2700—3100 Å найдено и проанализировано 17 полос γ -системы NO и 11 полос β -системы. Получены молекулярные константы для $v''=0, i \dots i6$ $X^2\Pi$ основного состояния и $v'=0, i \dots 5$ для $A^2\Sigma$ и $B^2\Pi$ возбужденных состояний.

Резюме

ш.н.

41

Ф. 1971-97



NO

Fast, Hans.

+ 1971

(Vi)

From Diss. Abstr. Intⁿ B.
1971, 32 (6), 3568.

Rotation electronic spectrum

● (cc. $C_2D_2H_2$; III)

NO

1971

—119284e Line parameters of nitrous oxide near 4.5 nm determined from absorption spectra obtained with a Fabry-Perot interferometer. Ford, Dale L. (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). 1971, 206 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 72-4486. From *Diss. Abstr. Int. B* 1972, 32(7), 4137.

C. A. 1972. 76. 20

NO

спектр

6 Б159. Константа скорости для инфракрасного излучения при переходе $C^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma + NO$. Groth W., Kley D., Schurath U. Rate constant for the infrared emission of the $NO(C^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+)$ transition. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.», 1971, 11, № 10, 1475—1480 (англ.)

Исследованы УФ- и ИК-спектры излучения молекул NO, образованных при р-ции атомов O с атомами N. Атомы O получали из молекул O_2 в безэлектродном разряде, а атомы N получались из молекул N_2 в импульсном разряде с частотой 40 гц и мощностью 10 квт. В области 1900—3400 Å УФ-спектра обнаружены δ -; γ - и ϵ -системы полос электронных переходов $C^2\Pi \rightarrow X^2\Pi$, $A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ и $D^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$ соотв, с $v' = 0$. В ИК-спектре вблизи 1 мкм найдена полоса электронного перехода $C^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$. Показано, что молекулы NO в состоянии $C^2\Pi$ образуются в результате обратной преддиссоциации, а при достаточно низких давлениях радиац. переходы $C^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$ преобладают над всеми остальными процессами. Из интенсивности δ - и γ -систем полос вычислена сила осциллятора для перехода $C \rightarrow A$: $f = 0,61$.

РЖХ, 1972, № 6

(+1) f.m



NO V. Hasson, R.W. Nicholls + 1971

J. Phys. B.: Atom. Molec. Phys. 1971

4, N 12, 1769

Absolute spectral absorption measurements
of NO- β ($B^2\Pi - X^2\Pi$): сечение поглощения.

Получены сечения поглощения
 $f_{(0.0)}^{abs} = 2.46 \times 10^{-8}$
 $f_{(4.0)}^{abs} = 1.16 \times 10^{-5}$

NO.

1944

Jaegle A.
Duquet A.

J. chim. phys. et phys.

chim. biol. 1944, 68, 117-8

1154-1158.

O_2
(Ces. H_2) III

NO

XIII-1987

1981

8 Б30. Исследование окислов азота методом ППДП/2. Kelkar V. K., Bhalha K. C., Khubchandani P. G. A CNDO/2 study of nitrogen oxides. «J. Mol. Struct.», 1971, 9, № 4, 383—391 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП в валентном приближении ППДП/2 рассчитаны молекулы NO , NO_2 , N_2O , N_2O_2 , N_2O_4 и N_2O_5 . Приведены использованные параметры, межатомные расстояния взяты из опыта, валентные углы варьировались. Для N_2O более стабильной оказалась структура NNO , а не NON ; оптим. валентный угол 180° . Для N_2O_2 цис-структура ONNO найдена более стабильной, чем транс на 5,2 ккал/моль; структуры типа ONON отвергаются. В цис-форме угол ONN равен 90° . В NO_2 найден валентный угол 132° . Для N_2O_4 найдено, что основное состояние должно быть плоским и диамагнитным. Расчеты проводились также для не-

рассе-
ном.
стр; N_2O

X. 1972.8

+5



плоских форм с разными углами поворота одной группы NO_2 относительно другой, причем получен барьер вращения 1,38 ккал/моль. Для N_2O_5 с такой же геометрией группы NO_2 , как в NO_2 и N_2O_4 найден угол NON 148° . Для всех молекул приведены энергии и состав высшей заполненной и низшей свободной МО, полные электронные плотности у всех атомов, для NO и NO_2 — спиновые плотности. Вычислены также дипольные моменты молекул — соотв. 0,20, 0,73, 1,40, 0,32, 0 и 1,10 D. Расчеты во всех случаях правильно предсказывают геометрич. строение, но величины дипольных моментов и барьера вращения в N_2O_4 отличаются от опытных. Последнее относится и к вычисленной длине связи N—N в N_2O_4 . На основании удовлетворительных результатов для валентных углов авторы считают, что метод ППДП/2 пригоден для расчетов систем такого типа. Во всяком случае, полученные результаты для N_2O_4 более удовлетворительны, чем при рассмотрении только π -электронов.

М. Дяткина

NO

1971.

4 Д133. Итерации естественных орбиталей для основного состояния окиси азота. Kouba Joseph E., Ohn Yngve. Natural orbital iterations for the ground state of nitric oxide. «Int. J. Quant. Chem.», 1971, 5, № 5, 539—548 (англ.; рез. франц., нем.)

Предложена итерационная процедура для естественных орбиталей (ЕО) при расчетах в рамках метода ограниченного конфигурационного взаимодействия. Методика применена к расчету полной энергии E , дипольного момента, спиновых плотностей на каждом ядре и приближенных естественных спин-орбиталей для основного $X^2\Pi$ -состояния молекулы NO при эксперим. значении равновесного межъядерного расстояния. Использован базис слэтеровских орбиталей: по 9 орбиталей N и O в двухэкспоненц. представлении Клемента, исключая $1s$ -орбитали, для которых использовалось одноэкспоненц. представление. Конечная волн. ф-ция содержит 269 конфигураций и приводит к $E = -129,259943$ хартри. Дипольный момент равен 0,12094 ед. Дебая. Проанализирована сходимость configuraц. разложений при рассмотрении E и других величин.

А. Медвинский

ф. 1972. 4Д

NO

1971

11 Д228. Аномалия интенсивности в фотоэлектронном спектре молекулы NO. Lefebvre-Brion H. Intensity anomaly in the photoelectron spectrum of NO. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 9, № 5, 463—464 (англ.)

ФЭ-спектр

Дается объяснение причин возникновения аномальных пиков интенсивности в фотоэлектронном спектре молекулы NO. Показано, что возникновение их может быть объяснено смешиванием дважды возбужденных конфигураций симметрии $B^1\Pi$.

Ф. 1971. 112

NO

1971

21 Б113. Аномальные интенсивности в фотоэлектронном спектре NO. Lefebvre-Brion H. Intensity anomaly in the photoelectron spectrum of NO. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 9, № 5, 463—464 (англ.)

спектр

Рассчитаны относит. интенсивности максимумов ФЭ-спектра NO для состояний $^3\Pi$ и $^1\Pi$ с учетом взаимодействия конфигураций. Учет взаимодействия конфигураций приводит к заметному перераспределению интенсивностей в спектре. На основе расчета дана новая интерпретация ФЭ-спектра NO полученного в работе РЖХим, 1971, 8Б88: максимум при 21,7 эв отнесен к состоянию $S^3\Pi$, а к состоянию $V^1\Pi$ отнесен максимум с энергией $\sim 23,3$ эв.

В. И. Нефедов

X. 1971. 21

NO

Locht R.
at el

+1349

Int. J. Mass Spectrom.

Gen Phys. 1971, 7(2), 121-44

C.A. 1972. 76. 2

cu O, III

1971

NO

C₂

CO

105713g Calculation of Franck-Condon factors. I. Case of the positive parameter, ΔS . Makshantsev, B. I.; Perstnev, I. P. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1971, 31(6), 881-4 (Russ). Simple anal. expressions for Franck-Condon factors $F(0,v)$ ($F(v,0)$) of the Morse oscillator for pos. ΔS parameter were derived. Values of $F(0,v)$ at $v = 0, 1$, and 2 were calcd. for NO, C₂, and CO mols. and they almost coincided with those obtained by a computer.

J. Havel

opacis

S.K.

C.A.

1972. Feb. 18

No

1971

Malisek, Vladimer.
"Acta Univ. Palacki. Olomus.

Fac. Regum Natur."

1971, N33, 309-23.

(cur. HF; III)

NO

1971

кавед.
физике

114742* Vibrational relaxation of excited electronic states.
NO $A^2\Sigma^+$. Melton, L. A.; Klemperer, William (Dep. Chem.,
Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1971,
55(3), 1468-9 (Eng). The examn. of the collisions of $^{14}\text{NO } A^2\Sigma^+$ ($v' = 0, v' = 1$) with $^{15}\text{NO } X^2\Pi$ ($v'' = 0$) indicated that the
excitation into $^{14}\text{NO } A^2\Sigma^+$ ($v' = 1$) yields fluorescence from $^{15}\text{NO } A^2\Sigma^+$ ($v' = 1$ and $v' = 0$) and that excitation into $^{14}\text{NO } A^2\Sigma^+$ ($v' = 0$) yields fluorescence from $^{15}\text{NO } A^2\Sigma^+$ ($v' = 0$). The cross
sections for these exothermic processes are given. The anom-
alously efficient vibrational relaxation obsd. in NO $A^2\Sigma^+$ is a fast
electronic energy exchange; this mechanism is governed by di-
pole-dipole interaction.

C.A. 1971. 45. 18

NO

1971

24 Б141. Колебательная релаксация возбужденных электронных состояний: $\text{NO}(A^2\Sigma^+)$. Melton L. A., Klemperer William. Vibrational relaxation of excited electronic states: $\text{NO } A^2\Sigma^+$. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 3, 1468—1469 (англ.)

Флуорес.

Исследована флуоресценция (Ф) NO при возбуждении в состояние $A^2\Sigma^+$ различными атомными линиями. В частности, изучена Ф ^{15}NO в случаях, когда возбуждается лишь ^{14}NO . Показано, что аномально быстрая колебательная релаксация NO в состоянии $A^2\Sigma^+$ это видимый результат передачи электронного возбуждения между молекулами, находящимися в различных колебательных состояниях. Сечения для этих процессов составляют 1,4—20 Å².

Д. И. Катаев

X. 1971.24

1971

NO

(6 Б25.) Расчет интегральных интенсивностей полос молекулы NO. Michels H. H. Calculation of the integrated band intensities of NO. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1971, 11, № 11, 1735—1739 (англ.)

инт.
полос

Методом МО ССП с учетом конфигурац. взаимодействия вычислен дипольный момент $\mu(R)$ молекулы NO в основном электронном состоянии $^2\Pi$ для значений межъядерных расстояний R от 1,25 Å до ∞ . Из полученной функции $\mu(R)$ и из факторов Франка—Кондона, вычисленных с использованием потенциала Ридберга—Клейна—Риса, рассчитаны интегральные интенсивности α_{0-n} полос колебательных переходов 0—1, 0—2 и 0—3: $\alpha_{0-1} = 134 \pm 2$, $\alpha_{0-2} = 2,0-0,6$, $\alpha_{0-3} = 0,08-0,04$ см⁻²·атм⁻¹. Полученные значения α_{0-1} и α_{0-2} согласуются с их эксперим. значениями.

М. Р. Алиев

РЖХ, 1972, № 6

NO

unmeas.

no doc

C. A. 1972. 46.2

1971

(8461r) Calculation of the integrated band intensities of nitric oxide. Michels, H. H. (United Aircr. Res. Lab., East Hartford, Conn.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1971, 11(11), 1735-9 (Eng). The integrated intensities for the 5.3- μ fundamental vibration-rotation band and for the 1st and 2nd overtone bands of NO were calcd. within a quantum-mech. framework. The dipole moment of NO was detd. over a wide range of internuclear sepns. as an expectation value calcd. with an accurate configuration-interaction electronic wavefunction and, in part, from exptl. data. The value for the 5.3- μ fundamental band is $134 \pm 2 \text{ cm}^{-2} \text{ atm}^{-1}$ at std. temp. and pressure.

NO

XIII - 1943

1971

м.п.

5 Б172. Спектр поглощения молекулы NO. X. 3d Ридберговский комплекс, его колебательная структура, спин-орбитальное взаимодействие и взаимодействия с неридберговскими состояниями. Miescher E. Absorption spectrum of the NO molecule. X. The 3d Rydberg complex, its vibrational structure, spin-orbit coupling, and interactions with non-Rydberg states. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 18, 2350—2365 (англ.; рез. франц.)

Изучены колебательные уровни ридберговских состояний (комплекс) 3d σ , π молекулы NO. Эти уровни приводят к появлению полос поглощения 3d—X в обла-

X. 1972. 5

сти вакуумного ультрафиолета, большинство к-рых перекрывается другими полосами, а также ридберг-ридберговских полос испускания в видимой ($3d-3s$) и в ИК-области ($3d-3p$). Все эти виды спектров получены методом фотографич. регистрации для изотопич. разновидностей $N^{14}O^{16}$ (I), $N^{15}O^{16}$ (II) и $N^{14}O^{18}$ (III). Обнаружено взаимодействие с неридберговскими уровнями и преддиссоциации. Проведен детальный анализ с учетом спин-орбитальных эффектов для пересечения вращательных уровней $3d\sigma, \pi$ ($V=1$) и $B^2\Pi$ ($V=23$). Определены недиагональные матричные элементы и вычислены вращательные и колебательные постоянные $3d$ и $4d$ ридберговских комплексов I—III. За необычную структуру полос в значит. степени ответственен

матричный элемент $\eta = \langle \Sigma | B l^+ | \pi \rangle$, к-рый не зависит от колебательного квантового числа v . (Сообщ. IX см. РЖХим, 1970, 9Б137).

Резюме

NO

1353209 Absorption spectrum of the nitrogen monoxide molecule. X. The 3d Ryberg complex, its vibrational structure, spin-orbit coupling, and interactions with non-Rydberg

1971

states. Miescher, E. (Inst. Phys., Univ. Basel, Basel, Switz.). *Can. J. Phys.* 1971, 49(18), 2350-65 (Eng). The vibrational levels of the $3d\sigma, \pi$ Rydberg complexes of the NO mol. were studied. They gave rise to absorption bands $3d-X$ in the vacuum uv, most of which are severely overlapped by other bands, and, in addn., to Rydberg-Rydberg emission bands in the visible ($3d-3s$) and in the ir ($3d-3p$). Both types of spectra were photographed at high resolu. Interactions with non-Rydberg levels and predissocns. were obsd. A detailed anal. including spin-orbit effects, is given of the crossing between the $3d\sigma, \pi(v=1)$ and $B^2\Pi(v=23)$ rotational levels. Off-diagonal matrix elements were detd. and precise vibrational and rotational const. were calcd. Largely responsible for the unusual structure of the bands is the matrix element $\eta = \langle \Sigma | B | \Pi \rangle$ which was independent of v .

1971
1353209
+
1353209

M.N

C.A. 1971.

45 22

NO

XIII-1943

1971

спектр
поглощ.
и.п.

2 Д450. Спектр поглощения NO. X. Колебательная структура ридберговского комплекса $3d$, спин-орбитальная связь и взаимодействие с неридберговскими состояниями. Miescher E. Absorption spectrum of the NO molecule. X. The $3d$ Rydberg complex, its vibrational structure, spin-orbit coupling, and interactions with non-Rydberg states. «Can. J. Phys.», 1971, 49, № 18, 2350—2365 (англ.; рез. франц.)

Изучены колебательные уровни ридберговских комплексов $3d\sigma, \pi$, ответственных за полосы поглощения

Ф. 1972. 2Д

$3d-X$ в вакуумной УФ-области и за ридберговские полосы излучения в видимой ($3d-3s$) и ближней ИК-области ($3d-3p$). Спектры поглощения были сфотографированы с высоким разрешением для трех изотопов: $^{14}N^{16}O$, $^{15}N^{16}O$ и $^{14}N^{18}O$. Исследовано взаимодействие комплексов с неридберговскими состояниями и предиссоциация. Произведен детальный анализ вращательной структуры для пересечений уровней $3d\sigma, \pi$ ($v=1$) и $B^2\Pi$ ($v=23$), включающий спин-орбитальные эффекты. Определены недиагональные матричные элементы и рассчитаны точные значения колебательных и вращательных констант. Матричный элемент $\eta = \langle \Sigma | Bl^* | \Pi \rangle$, определяющий необычную структуру полос, оказался не зависящим от v . Библ. 17. В. Александров

1971

E. Miescher

NO
cncuff
1.

Can. J. Phys. 49, 118, 2350

Absorption Spectrum of the
NO molecule. X. The 3d Ryd-
berg complex, its vibrational
structure spin-orbit coupling,
and Σ interaction with
non-Rydberg states.

The vibrational levels of the $3d\delta, \pi$ Rydberg complexes of the NO molecule are studied. They give rise to absorption bands $3d-\chi$ in the vacuum u.v. most of which are severely overlapped by other bands, and, in addition, to Rydberg-Rydberg emission bands in the visible ($3d-3s$) and in the infrared ($3d-3p$). Both type of spectra have been photographed at high resolution, the absorption spectra for three different isotopes.

Interaction with non-Rydberg levels and predissociation are observed. A detailed analysis including spin-orbit effects, is given of the crossing between the

$3d\bar{5}\pi (v=1)$ and $B^2\Pi (v=2)$ rotational levels.
 Off-diagonal matrix elements are determined and precise vibrational and rotational constants are calculated for different isotopic molecules:

For $^{14}\text{N}^{16}\text{O} (2\Pi^-)$: $B_e = 2,014 \text{ cm}^{-1}$ $D_e = 0,02 \text{ cm}^{-1}$

$$w_e' = 2372,4 \text{ cm}^{-1} \quad w_x' x_e' = 16,28 \text{ cm}^{-1}$$

$$T_e = 65060,2 \text{ cm}^{-1}$$

$$\eta = 1,92 \text{ cm}^{-1}$$

$$A = 0,96 \text{ cm}^{-1}$$

$$\xi = 0,92 \text{ cm}^{-1}$$



Largely responsible for the unusual structure of the bands is the matrix element $\gamma = \langle \Sigma / B l^+ / \Pi \rangle$ (describing e-un-coupling), which is shown to be independent of v .

NO

7451

10 Б150. Исследование γ , ϵ и δ -флуоресценции окиси азота; поляризация линий и применение расчета интенсивностей для калибровки спектрометра. Poland H. M., Broida H. P. Fluorescence of the γ , ϵ and δ systems of nitric oxide; polarization and use of calculated intensities for spectrometer calibration. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1971, 11, № 12, 1863—1876 (англ.)

Исследована флуоресценция окиси азота в области 2000—3000 Å. Молекулы NO возбуждались в $A^2\Sigma^+$ -электронное состояние с помощью кадмиевой разрядной трубки ($\lambda=2144$ Å) или ксеноновой лампы (эквивалентная т-ра серого тела 4500 K). В спектре γ -системы полос флуоресценции наблюдается восемь разрешенных линий P , Q , R -ветвей для колебательного перехода (1,5), поляризация к-рых изменяется от отрицат. значений ($-0,12$) для $^3R_{21}$ -линии до положительных ($+0,2$) для (Q_2+R_{21}) -линии и не зависит от давления в диапазоне 10^{-3} — 10^{-2} мм. Благодаря малому спиновому расщеплению в $A^2\Sigma^+$ -состоянии в спектре излучения наблюдается

ЛЯТ
МО С
ОГ

РЖХ, 1972, а 10

восемь линий из двенадцати. Измерены и табулированы
 относит. интенсивности для всех вибрационных переходов
 $(1,0) \rightarrow (1,12)$ при возбуждении $\lambda = 2144 \text{ \AA}$. Прове-
 ден анализ ошибок, вносящих вклад в измерение
 интенсивностей линий. С помощью сопоставления
 эксперим. интенсивностей для каждой v' -системы полос
 с теор. значениями франк-кондоновских факторов $q_{v',v''}$
 (и величиной $q_{v',v''} v_{v',v''}^3$) проведена корректировка
 инструментальной характеристик. кривой спектрометра
 в коротковолновой области (2000—2500 $\text{\AA}$). На основе
 полученных данных исправлены интенсивности для шести
 полос v -системы и четырех полос δ -системы флуорес-
 ценции молекулы NO. Показано также, что удовлетво-
 рительное совпадение эксперим. и теор. результатов
 достигается при расчете франк-кондоновских факторов
 с учетом одной потенциальной кривой двухспиновой
 системы в состоянии $^2\Pi$. С учетом теор. значений
 величины $q_{v',v''} v_{v',v''}^3$ для прогрессии $v' = 3$ исправлена
 аппаратная функция спектрометра, что позволило
 в два-три раза улучшить согласие теор. и эксперим.
 данных для систем полос с $v' = 0, 1, 2$. Вычисленные для
 NO значения $q_{v',v''} v_{v',v''}^3$ (максим. ошибка $\sim 28\%$) можно
 применять для калибровки спектрометра в диапазоне
 длин волн 2000—2500 $\text{\AA}$.

В. Соколов

NO

5699d Fluorescence of the γ , ϵ , and δ systems of nitric oxide. Polarization and use of calculated intensities for spectrometer calibration. Poland, H. M.; Broida, H. P. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, Colo.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1971, 11(12), 1863-76 (Eng). Fluorescence of the γ system of NO was obtained by excitation from both the 2144-Å line of ionized Cd and a continuum source. Individual rotational lines of the 2144-Å excited fluorescence spectrum were partially polarized and had polarizations of differing sign. Measured relative vibrational band intensities from line and continuum excitation were compared to calcd. Franck-Condon factors. Those Franck-Condon factors based on a single potential for the 2 spin states of the $X^2\Pi$ state agreed better with measured values than those based on sep. potentials for the 2 spin states. Calcd. intensities of the $v' = 3$ progression were used to calibrate the instrument response in the wavelength region of 2000-2500 Å and were checked with measured intensities of the $v' = 0, 1$ and 2 progressions. Fluorescence of the ϵ and δ bands obtained with continuum lamp excitation also were compared to calcd. intensities.

1971

Frank-Condon
1. K.

C.F. 1972. 76. 8

NO

1971

спектр
флуоресценции
при возб.
линией Zn

~~27863u~~ Fluorescence of nitric oxide excited by the 2139-Å zinc resonance line. Poland, H. M.; Broida, Herbert P. (Joint Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, Colo.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(10), 4515-7 (Eng). The K' 19, 23, and 29 rotational levels of the $v = 1$ level of the $A^2\Sigma^+$ state of NO were populated (relative population 1:4:5) by excitation with the Zn resonance line at 2138.56 Å. The fluorescence spectrum of the 1,5 band of the NO γ system, excited by Zn in NO at 0.04 torr, is given.

C. A. 1971. 45.4.

NO

1974

спектр
флуорес-
ценции

) 11 Д848. Флуоресценция окиси азота, возбуждаемая резонансной линией цинка 2139 Å. Poland H. M., Bro-ida H. P. Fluorescence of nitric oxide excited by the 2139-Å zinc resonance line. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 10, 4515—4517 (англ.)

Исследован спектр флуоресценции паров NO при возбуждении резонансной линией цинка 2139 Å. Возбужде-

Л. 1974. 11Д

ние соответствует абсорбционным переходам в полосе 0,1 γ -системы ($A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$) молекулы NO, а флуоресценция — излучательным переходам с вращательных уровней $K=19,23$ и 29. Предложенная идентификация заселяемых уровней подтверждается результатами измерений для других полос γ -системы и согласуется с силами осцилляторов линий, которые могут быть предсказаны для других ветвей.

В. П. К.

NO

1971

21 Б115. Флуоресценция окиси азота, возбуждаемая резонансной линией цинка 2139 А. Poland H. M., Broida H. P. Fluorescence of nitric oxide excited by the 2139-Å zinc resonance line. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 10, 4515—4517 (англ.)

спектр

Флуоресценция (Ф) NO возбуждалась резонансной линией цинка 2138,56 А, перекрывающейся с областью 1—О полосы. Системы $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ NO. Возбуждение резонансной линией цинка приводит к достаточной заселенности вращательных уровней $K'=23$ и 29. Источником возбуждающего света служила кварцевая лампа, содержащая несколько мг Zn и Ag при давл. 5 мм. Свечение NO регистрировалось при т-ре несколько выше комнатной.

М. Б. Элиашберг

X. 1971.21

NO

56297 High-resolution Raman spectroscopy of gases with laser excitation. Rich, Nathan H.; Welsh, H. L. (Dep. Phys.,

Univ. Toronto, Toronto, Ont.). *J. Opt. Soc. Amer.* 1971, 61(7), 977-8 (Eng). A multiple-reflection Raman cell was adapted for use of laser excitation by using a mirror system to multiply pass the exciting laser beams lengthwise through the cell and, at the same time, to bring a large amt. of scattered light into the cone of observation of the spectrometer. The adapted cell and Ar⁺ laser excitation were used to obtain the electronic Raman spectrum of NO centered at a Raman shift of $\sim 120 \text{ cm}^{-1}$. Strong lines in the spectrum correspond to pure-rotational transitions originating in the 2 levels of the $^2\Pi$ ground state; weaker lines are part of the electronic transition.

1971

U. N.

8/11/78
XIII - 1111

(+1) II, edy.

C. H. 1971. 45.8



NO,

NO-

1971

(1 Д361.) Колебательное возбуждение и смешанные состояния NO. Spence D., Schulz G. J. Vibrational excitation and compound states in NO. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 6, 1968—1976 (англ.)

и. н.

В опытах с электронным пучком исследована зависимость сечения упругого столкновения для NO от энергии электронов. В области 0—2 эв обнаружены максимумы, отстоящие друг от друга на 0,17 эв и обусловленные образованием квазимолекулы NO- с различным

конечу
кривая

9, 1972, 12

колебательным возбуждением. Ширина максимумов мо-
нотонно увеличивается от 0,02 до 0,1 эв с возрастани-
ем ν' от 1 до 6, что свидетельствует об уменьшении
времени жизни верхних возбужденных состояний. Сече-
ние колебательного возбуждения NO также обнаружи-
вает структуру, соответствующую образованию молеку-
лярного иона NO^- , причем $\nu=4$ NO совпадает с
 $\nu'=6$ NO^- . Определены абс. величины сечений и коле-
бательные константы NO^- . Построена потенц. кривая
состояния ${}^3\Sigma^-$ NO^- . Библ. 30. В. Александров

NO

1971

22 Б92. Колебательное возбуждение и составные состояния NO. Spence D., Schulz G. J. Vibrational excitation and compound states in NO. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 6, 1968—1976 (англ.)

осн. сост.;

колебай.
возбужд.

В области энергии 0—2 эв измерено сечение упругого рассеяния электронов на молекулах NO. Обнаруженная резонансная структура сечения интерпретирована как следствие образования составной системы NO-. По-видимому, электрон захватывается молекулой NO без возбуждения последней, и метастабильные квазистационарные состояния с ширинами 0,02—0,10 эв и энергетич.



X. 1971. 22



интервалами 0,16 эв образу. тся в результате стабилизации электрона за потенциальным центробежным барьером. Распад иона NO^- приводит, в основном, к возбуждению низших колебательных состояний NO , поскольку скорость выхода электрона быстро возрастает при увеличении его энергии. На основании полученных эксперим. данных построен терм $X^3\Sigma^-$ основного состояния иона NO^- . Равновесное расстояние и энергия диссоциации равны 1,286 А и 41 550 см⁻¹. Отмечается, что шестой колебательный уровень NO^- находится в резонансе с четвертым колебательным уровнем N_2 .

Е. Дашевская

+ 1941

NO

NO₂

N₂O₄

(и.к. чекмп

мб. и нсч.)

8563a Infrared absorption spectra of nitric oxide and nitrogen dioxide at liquid nitrogen temperature. Yagodovskaya, T. V.; Nekrasov, L. I. (Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1971, 45(9), 2329-31 (Russ). The ir spectra of NO, NO₂, and N₂O₄ were measured at -190 and -40°, and compared with the ir spectra of liq. O₃ and peroxy radical condensate. The N oxides cannot complicate the absorption spectra of the condensate as has been presumed. V. Bekarek

(+2) ☒

C. A. 1942. 46.2