

1976

70211.7244
Ch, Ph, TC

H_2

40892

1976

* 3-16665

Anderson James B.

Quantum chemistry by random walk.

H_2^+ , H_2 , D_3h , $1A'$, 1 , H_2 , $3\Sigma_u^+$, H_4 , $1\Sigma^+$,
Be $1S$.

"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 10, 4121-4127

(см. H; III)

(англ.)

761 770

8 0 3

0811

ПЕК

ВИНИТИ

61216.1869

TC, MGU, Ch, Ph

Ma

96201
(постоян Вердер)

1976

4804

Aoyama T., Yamakawa H., Inamoto N.,
Ichikawa H. Non-empirical calculations on
magneto optical rotation: the Verder cons-
tants of hydrogen and acetylene.

"Chem. Phys. Lett.", 1976, 43, N 2, 287-
290 (англ.)

0768 лмк

735 736

760

ВИНИТИ

H₂

1976

86:146251c Quantum defect theory of excited $1\Sigma_u^+$ levels of molecular hydrogen. Atabek, O.; Jungen, C. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *Electron Photon Interact. At., [Int. Symp.]* 1974 (Pub. 1976), 613-20 (Eng). Edited by Kleinpopp, Hans; McDowell, M. R. C. Plenum: New York, N. Y. - Vibration electron coupling in

nb. acc
prer

Rydberg states of H₂ is treated by quantum defect methods. One single quantum-defect function, $\mu_{ps}(R)$, of simple algebraic form is used to fit the recently obsd. spectrum of $J = 0$ $np\sigma$ $1\Sigma_u^+$ levels, extending from $n = 4$ up to the H₂⁺ ($v = 1$) ionization threshold. The calcs. reproduce with high accuracy all the strong perturbations taking place between Rydberg series of different vibrational quantum number, $0 \leq v \leq 5$. The resulting function μ is directly related to the Born-Oppenheimer potential energy curve of the electronic states involved. The results are discussed with reference to the processes of vibrational preionization and vibrational predissociation.

C.A. 1977, 86 N20

1976

H₂

5 Д137. Теория квантового дефекта для возбужденных уровней $^1\Sigma_u^+$ молекулы H₂. Atabek O., Jungen C. Quantum defect theory of excited $^1\Sigma_u^+$ levels of H₂. «Electron and Photon Interact. Atoms. Int. Symp., Univ. Stirling, 1974». New York—London, 1976, 613—620 (англ.)

расчет
эл.-колеб.
взаимод.

Теория квантового дефекта использована для расчета электронно-колебательного взаимодействия в ридберговских состояниях симметрии $^1\Sigma_u^+$ молекулы водорода. Для уровней $n\sigma$ (n больше 4) ф-ция квантового дефекта $\mu_{\sigma}(R)$ аппроксимировалась эмпирич. ф-лой с четырьмя параметрами, которые определялись из эксперим. уровней, отвечающих вращательному квантовому числу $J=0$. Колебательно-вращательные ф-ции иона H₂⁺ были взяты из неэмпирич. расчетов Колоса и Вольневича. Расчеты хорошо воспроизводят наблюдаемые экспериментально сильные возмущения между ридберговскими сериями с различными колебательными квантовыми числами ($0 \leq v \leq 5$). С точки зрения полученных результатов обсуждены также процессы колебательной пред-ионизации и преддиссоциации.

А. Дементьев

Ф. 1948, 115

H₂
HD
D₂

поглощения
и диссоциации

(+2)



ф. 1976. № 2

8 Д 249. Силы осцилляторов (при 10—70 эв) для поглощения, ионизации и диссоциации H₂, HD и D₂, полученные методом электрон-ионных совпадений. Backx C., Wight G. R., Vander Wiel M. J. Oscillator strengths (10—70 eV) for absorption, ionization and dissociation in H₂, HD and D₂, obtained by an electron-ion coincidence method. «J. Phys. B: Atom and Mol. Phys.», 1976, 9, № 2, 315—331 (англ.)

Методом задержанных электрон-ионных совпадений путем определения энергии рассеянных вперед в угле 0—2·10⁻² рад электронов измерены оптич. силы осцилляторов для процессов поглощения, ионизации и диссоциации H₂, HD и D₂ при столкновениях с электронами с начальной энергией 8 кэв. Диапазон измеренных потерь энергии электронов 0—70 эв, кинетич. энергии ионов — до 20 эв. Результаты, полученные для поглощения, согласуются с фотоионизационными данными, сопоставление данных по поглощению и ионизации указывает на существование области (до ~1 эв над потенциалом ионизации), где происходит образование нейтральных частиц. Выявлена роль колебательных и электронных переходов в указанных процессах. Обсуждается образование автоионизационных ридберговских состояний, сходящихся к 2рσ_u и 2рπ_u состояниями H₂⁺. В. Ю. О.

1976

45-12597

H₂

1976

11 Б174. Возбуждение уровня $3p^3\Pi_u$ молекулы H₂ электронным ударом: влияние давления. Bafta-
yan P., Nedelec O. Excitation of the $3p^3\Pi_u$ level of
H₂ by electron impact; pressure effects. «J. Quant.
Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1976, 16, № 2, 207—
211 (англ.)

Эмисс.
спектр
мол-лы

Исследован эмиссионный спектр молекулы водорода, возбужденный электронами с энергией вплоть до $E = 100$ эв в ячейках типа триода и пентода. По интенсивности линий переходов из состояния $3p^3\Pi_u$ (по отношению к интенсивности линий бальмеровской серии атома H с известным сечением возбуждения) измерено

поперечное сечение возбуждения состояния $^3\Pi_u$: макс. сечение $3,30 \cdot 10^{-18}$ см² получено при $E = 22,5$ эв. Исследована зависимость интенсивности излучения от давления и показано, что синглет-триплетный перенос энергии, являющийся важным механизмом заселения триплетных состояний H₂ в смеси с гелием, не дает существенного вклада в заселенность уровня $^3\Pi_u$ H₂.

М. Р. Алиев

к 1976
N 11

60503.8489

Ph, TC

35247

H₂

1976

X4-12771

Birnbaum George, Cohen E. Richard,
Theory of line shape in pressure-induced
absorption. "Can. J. Phys.", 1976, 54, N 5,
593-602 (англ., рез. франц.)

0612 1111

581 582 6 0 4

ВИНИТИ

1976

H₂

6 Б48. Расчеты открытых оболочек методом МЧПДП/3 (по неограниченной хартри-фоковской схеме). Геометрия и электронное строение радикалов. Bischof P. Unrestricted open-shell calculations by MINDO/3. Geometries and electronic structure of radicals. «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, № 22, 6844—6849 (англ.)

На основе неограниченной хартри-фоковской (НХФ) схемы методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении МЧПДП/3 рассчитаны геометрич. параметры, потенциалы ионизации, сродство к атому водорода и теплоты образования серии (47 представителей) свободных радикалов. Для некоторых из этих радикалов (в основном, углеводородных) вычислены также константы изотропного сверхтонкого взаимодействия (ИСТВ) с протонами. Спиновые заселенности АО определялись как до, так и после аннигиляции примесной квартетной компоненты в НХФ волновой ф-ции. Хотя в обоих случаях

геометр,
у; АН⁺
АН_f.

Х. 1977 № 6

(41) АН_f (H₂)

коэф. корреляции между теоретически найденными и эксперим. константами ИСТВ приблизительно равен 0,95, однако для спиновых заселенностей, полученных при использовании процедуры аннигиляции, полуэмпирич. параметр K_H , характеризующий наклон корреляц. прямой, гораздо ближе к значению $K_H = 508$ э. для свободного атома водорода. Подчеркнуто, что выполненный расчет предсказывает слегка пирамидальную структуру для метильного радикала и что НХФ схеме МЧПДП/3 свойственно завышать теплоты образования свободных радикалов в среднем на 10 ккал/моль.

Н. Д. Чувылкин

*4 - 11529

1976

6 Д126. Эффективное уравнение Шрёдингера для электронно-колебательно-вращательных энергий H_2 и D_2 . Bishop David M., Shih Shing-kuo. An effective Schrödinger equation for the rovibronic energies of H_2 and D_2 . «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 1, 162—169 (англ.)

Для описания колебательно-вращательных уровней основного электронного состояния молекул H_2 и D_2 предложено эффективное уравнение Шрёдингера, получающееся при подстановке в адиабатич. уравнение для движения ядер поправок теории возмущений, выведенных Ван-Флеком. Учитываются также релятив. поправки. Расчеты проведены с использованием точных адиабатических потенц. кривых. Вычислены неадиабатич. поправки к адиабатич. уровням с $v=0 \div 20$ и $J=0 \div 4$. Среднеквадратичные отклонения теоретич. значений поправок от их значений, полученных из эксперимента меньше, чем эксперим. погрешности. Делается вывод о преимуществе предложенного уравнения перед существовавшими ранее методами. Библ. 29.

Е. П. Смирнов

(71)



ф 1976 № 6

расчет
колеб. вращ.
уровней

H_2
 D_2
составлен
1974 г.

H_2

Ks-11529

1976

 D_2

84:65191q An effective Schroedinger equation for the rovibronic energies of molecular hydrogen and molecular deuterium. Bishop, David M.; Shih, Shing-Kuo (Dep. Chem., Univ. Ottawa, Ottawa, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(1), 162-9 (Eng). A new effective Schroedinger equation for the calcn. of the rovibronic energies of H_2 and D_2 is proposed. The equation takes into account nonadiabatic effects and it is used to calc. the nonadiabatic corrections to the adiabatic vibronic energies. The root-mean-square deviation of the corrections from the exptl. derived ones is less than the accuracy of the exptl. vibronic energies and smaller than the deviation of the corrections calcd. by alternative methods.

M.N.
Kb; seen
packet

(+1) ☒

C.A. 1976. 84 N 10

H₂

D₂

*4-11529

1976

13 Б19. Эффективное уравнение Шредингера для электронно-колебательно-вращательного движения молекул H₂ и D₂. Bishop David M., Shih Shing-kuo. An effective Schrödinger equation for the rovibronic energies of H₂ and D₂. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 1, 162—169 (англ.)

С учетом неадиабатич. и релятивистских поправок получено эффективное радиальное уравнение Шредингера для двухатомной молекулы, в которой потенциальная энергия заменена эффективной потенциальной функцией вида $U(R) + \alpha(R)[U(R) - E(v, 0)]$, зависящей от колебательного состояния. Выполнен численный расчет энергии колебательно-вращательных уровней с $v \leq 20$ и $J \leq 4$ молекул H₂ и D₂. Расхождение между вычисленными и измеренными значениями энергии не превышает 0,1 см⁻¹. Для энергии диссоциации H₂ и D₂ получены значения 36117,51 и 36748,16 см⁻¹, согласующиеся с результатами Колоса—Вольниевича (расхождение < 0,04 см⁻¹). Отмечено, что неадиабатич. поправка к энергии мало чувствительна к значению J. М. Р. Алиев

(ϕ_0)

(+1) ∇

X1976N13

1977

H₂

D₂

7 Б44. Исправление ошибки к статье авторов «Эффективное уравнение Шредингера для электронно-колебательно-вращательных энергий H₂ и D₂». Bishop David M. Shih Shing-Kuo. An effective Schrödinger equation for the rovibronic energies of H₂ and D₂. [«J. Chem. Phys.», 1976, 64, 162]. Erratum. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 9, 4313 (англ.)

исправка

№ 7, 1978

H₂

ЖИЛ. 13620

расчет
электр.
плотности

X1976 N21

21 Б23. Колебательные поправки к плотностям зарядов и импульсов в H₂. Braun-Keller Elaine, 1976

Epstein Irving R. Vibrational corrections to the charge and momentum densities of H₂. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 40, № 2, 215—219 (англ.)

В приближении Борна — Оппенгеймера проведен расчет распределения электронной плотности в координатном и импульсном пространствах для молекулы H₂. В кач-ве электронной волновой функции использована функция Ванга (симметризованное произведение слетеровских функций, центрированных на ядрах) с тремя различными типами зависимости экспоненциального множителя от межъядерного расстояния. Расчет плотностей проведен для трех нижних колебательных состояний в рамках модели гармонич. осциллятора и потенциала Морзе. Показано, что поправки, обусловленные колебаниями, для зарядового распределения значительно больше, чем для распределения импульсов. Однако распределение импульсов оказывается существенно зависящим от выбора модели для колебательно-го движения. Отмечено, что использование более точной электронной волновой функции не может изменить полученных качественных результатов. Б. И. Жилинский

70202.1845

TC, CB, Ph

H_2 (ур-мил
чиредингера)
96201

1976
#9-16655

Colbourn E. A. The use of the electron
reduced mass in the electronic Schrödinger
equation for H_2 .

"Chem. Phys. Lett.", 1976, 44, N 2, 374-
378 (АНГЛ.)

0799 ЛМК

780 780

31

ВИНИТИ

60628.8822
Ch, Ph, TC

95200
 H_2 (крив. пог.
энергии)

1976
X4-13666

Companion A. L.

в кластерах. Li-H₂

Potential energy surfaces for the interaction of atomic and diatomic hydrogen with lithium metal clusters.

"Chem. Phys.", 1976, 14, N 1, 1-6 (англ.)

0651 5:12

621 622

6 4 3

ВИНИТИ

IX-5274

fact m.m. (H_2 , LiH , BeH^+ , BH , 1976
 Be_2 , CH_2 , H_2O , H_2CO , $HCCN$) ~~1976~~

Dykstra C. E., Schaefer H. F., III,

Neyer W.,

J. Chem. Phys, 1976, 65, 47, 2740-2750/air

A theory of self-consistent electron¹⁰
pairs. Computational methods and
preliminary appli○cations.

Ba Xue, 1974, 7513

10

(c7)

1976

60503.8485

35247

1976

Ch, Ph, TC, MGU

 H_2 (м.н.)

X 8-12773

Dabrowski I., Herzberg G. The absorption and emission spectra of HD in the vacuum ultraviolet. "Can. J. Phys.", 1976, 54, N 5, 525-567 (англ., рез. франц.)

0612 пм

581 582

6.04

ВИНИТИ

61203. 8726
Ch, Ph, TC, MGU

гетеронуклеар, 1976
H₂ (саксиф)

1976
*4-15600

Dehmer P. M., Chupka W. A.

Very high resolution study of photoabsorption, photoionization, and predissociation in H₂.

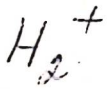
"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 6, 2243-2273
(англ.)

0757 нм

ВИНИТИ

714 724

1976



7 Д153. Анализ химической связи. I. Энергия связи в схеме МО ЛКАО с приближенной поправкой для левой и правой корреляций и ее физическая фрагментация. Driessler Frank, Kutzelnigg Werner. Analysis of the chemical bond. I. The binding energy of the MO—LCAO scheme with an approximate correction for leftright correlation, and its physical fragmentation. «Theor. chim. acta», 1976, 43, № 1, 1—27 (англ.)

Предложена схема анализа природы химич. связи в молекуле, основанная на выделении трех компонент в энергии связи: квазиклассический и интерференц. вклады, вклад промотирования. Используемый подход во многом сходен с подходом Руденберга. На примере систем H_2 и H_2^+ подробно исследована структура выражения энергии связи в рамках методов МО, валентных связей и конфигурац. взаимодействия. Предложено также новое приближение, названное приближением левой и правой корреляции, позволяющее получить правильный ход потенциальных кривых при больших межъядерных расстояниях. По аналогии с проведенным анализом структуры энергии связи в H_2 и H_2^+ выполнено исследование природы связи в ряде двухатомных и многоатомных молекул.

А. Дементьев

Анализ
хим. связи
энергии
связи
① H_2
② хим. связь
Ф. 1977. № 7

1976

 H_2

11 Б60. Замечания по поводу вычислений силовых постоянных с помощью энергетического метода. Duijneveldt-van de Rijdt J. G. C. M. van, Duijneveldt F. B. van. Comments of forceconstant calculations by the energy method. «J. Mol. Struct.», 1976, 35, № 2, 263—271 (англ.)

равнов.
расстояние
расчет
сил. пост.

Приведены в явном виде интерполяц. ф-лы Лагранжа 2- и 3-го порядков для расчета гармонич. силового поля и равновесной геометрии многоатомной молекулы в энергетич. методе, основанном на дифференцировании полинома, аппроксимирующего Пв потенциальной энергии. Даны ф-лы для оценки ошибок интерполяции. Обсуждены преимущества и недостатки формул 2- и 3-го порядков. Указан верхний предел величины интерполяц. шага, обуславливающей интерполяц. ошибку в диагональной силовой постоянной не выше 1%. Рассмотрен числовой пример: расчет силовой постоянной и равновесного расстояния для молекулы H_2 в основном состоянии.

Ю. Н. Панченко

8
④1 Емобу

X. 1977. № 11

H_2

8530p:

1976

85: 168925] Laser photodissociation of hydrogen molecule ions with fragment kinetic energy analysis. Durup, J. (Lab.

Collisions Ion., Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *Phys. Electron. At. Collisions, Invited Lect., Rev. Prog. Rep. Int. Conf., 9th 1975* (Pub. 1976), 609-23 (Engl). Edited by Risley, John S.; Geballe, Ronald. Univ. Wash. Press: Seattle, Wash. A review with 24 refs. on ion photodissociation spectroscopy of H_2^+ , HD^+ , and D_2^+ .

HD^+

D_a^+

gromogeecececece

(+2)

X



C. A. 1976. 85. N22

H₂

N₂

фотоэл.
спектры

(+1) X

ф 1976 N 9

9 Д277. УФ-фотоэлектронная спектроскопия нестабильных частиц. Ч. 6. Исследование колебательно возбужденных H₂ и N₂. Dyke John, Jonathan Neville, Morris Alan, Sears Trevor. Vacuum ultra-violet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 6. A study of vibrationally excited hydrogen and nitrogen. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 3, 597—603 (англ.)

Получены HeI фотоэлектронные спектры H₂ и N₂, подвергнутых микроволн. разряду. В обоих случаях наблюдались «горячие» полосы, обусловленные колебательно возбужденными молекулами H₂ и N₂. Анализ спектров показал, что заселение колебательных уровней H₂ и N₂ соответствует больцмановскому распределению с эффективной колебательной т-рой (3100 ± 400)° K и (5950 ± 550)° K, соответственно. Попытка обнаружения колебательно возбужденных молекул N₂, образующихся при реакции N(4S) + NO(x²Π) → N₂ + O(3P), оказалась только частично успешной. Обнаружены слабые «горячие» полосы, соответствующие образованию N₂(x¹Σ_g⁺) в колебательных состояниях с v''=1 и v''=2, вместо возможных по энергетике реакций состояний с v'' ≤ 12. Библ. 24. Ч. V см. РЖФиз, 1975, 11Д312.

1976

80821-57

H₂

1976

диссоц.
возбужд.

7 Д807. Диссоциативное возбуждение H₂: Форма спектральных линий и сечения возбуждения линий Бальмера при электронном ударе. Freund Robert S., Schiavone James A., Brader Donna F. Dissociative excitation of H₂: spectral line shapes and electron impact cross sections of the Balmer lines. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 3, 1122—1127 (англ.)

Обнаружено, что ширина линий серии Бальмера для атомов H, образующихся в результате диссоциативного возбуждения молекул H₂ электронным ударом, значительно превышает доплеровскую. Все линии серии имеют характерную форму: узкий центральный пик и широкие крылья. Указанная форма линий объяснена возбуждением двух различных групп диссоциирующих состояний: преддиссоциирующие или диссоциирующие непосредственно ридберговские состояния ответственны за центральные пики, тогда как дважды возбужденные состояния H₂ — за крылья бальмеровских линий. Структура, обнаруженная на кривых сечений возбуждения линий Бальмера, подтверждает предложенную интерпретацию. Библ. 49.

Р 1976 N 4

H₂

HF

LiH

BH

85: 83493s The calculation of nuclear spin coupling constants from LCAO-SCF-X_α wavefunctions. Fukui, Hiroyuki (Kitami Inst. Technol., Kitami, Japan). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(2), 844-6 (Eng). Nuclear spin coupling consts., as obsd. in the NMR spectra of fluids, were calcd. as an example of 2nd-order perturbation properties of mols. (i.e., the coupling involves the distortion of the electron distribution by a perturbing nuclear spin). The coupling consts. of H₂, HF, LiH, and BH were calcd. by a method similar to the discrete-variational X_α technique.

ночмолетт.

эг. паузенеллелл

(+3) 18



C.A. 1976 85. N 12

60521.1302

Ph, Ch, TC

40604

Vi
H₂ (Ei, Do, Travnet)

1976

Xz-13146

Gunnarsson O., Johansson P. The spin-density-functional formalism for quantum mechanical calculations: test on diatomic molecules with an efficient numerical method. "Int. J. Quantum Chem.", 1976, 10, N2, 307-323 (англ.; рез. франц., нем.)

8628 лнк

595 600

(суд. H₂ + III)

ВИНИТИ

H₂

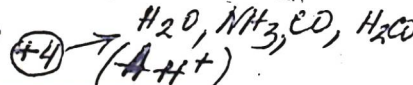
BX-216

1976

4 Д136. Самосогласованные молекулярные расчеты методом Хартри—Фока—Слэтера. Ч. IV. Об электронных плотностях, спектроскопических постоянных и сродстве к протону некоторых малых молекул. Heijser W., Kessel A. Th. van, Baerends E. J. Self-consistent molecular Hartree—Fock—Slater calculations. IV. On Electron densities, spectroscopic constants and proton affinities of some small molecules. «Chem. Phys.», 1976, 16, № 4, 371—379 (англ.)

(M.H., Do) Методом Хартри—Фока—Слэтера с использованием $\chi\alpha$ -приближения для обменного члена рассчитаны распределение электронной плотности, полные статистич. энергии, равновесные длины связей, колебательные и вращательные постоянные и энергии диссоциации молекул H₂, N₂, O₂, F₂, LiH, HF, LiF, CO, NO и CH₄, а также сродство к протону молекул воды, аммиака, CO и H₂CO. Полученные распределения электронной плотности согласуются с вычисленными эмпирич. методом

ф. 1977 N 4



ССП МО ЛКАО в двухэкспоненц. базисе. Показано, что влияние локального обмена мало по сравнению с влиянием длины базиса. Вычисленные значения спектральных характеристик и сродства к протону хорошо согласуются с эксперим. данными. Ч. III см. РЖФиз, 1975, 12Д104.
В. А. Корсунов

*4-15665

1976

В направлении...

5 Б202. Непрерывная активная спектроскопия комбинационного рассеяния высокого разрешения H_2 , D_2 и CH_4 . Henesian M. A., Kulevskii L., Вьет R. L., ~~Herbet~~ R. L. Cw high-resolution CAR spectroscopy of H_2 , D_2 , and CH_4 . «Opt. Commun», 1976, 18, № 2, 225—226 (англ.)

Создана установка для регистрации спектров высокого разрешения методом активной спектроскопии КР в непрерывном режиме. Осуществляли смещение излучения перестраиваемого лазера на красителе мощностью ~ 10 мвт и одномодового Ag^+ -лазера ($\lambda 4880$ или $5145A$) мощностью ~ 640 мвт. Исследована зависимость полуширины Q-ветвей линий Q (1) $4155, 21 \text{ см}^{-1}$ H_2 , Q (2) $2987,18 \text{ см}^{-1}$ D_2 и CH_4 от давл. (0,3—15 атм). С уменьшением давл. до ~ 2 атм наблюдалось уменьшение полуширины линий (ударной ширины), а при дальнейшем уменьшении давл. — рост полуширины и переход к доплеровскому контуру линии (диапазон изменения ширины линий 300—800 Мгц, разрешение на спектрах ~ 30 Мгц). Эффективность преобразования излучения в антистоксово КР достигает 1,36% для H_2 и 0,53% для D_2 и CH_4 . А. Бобров

H_2

D_2

CH_4

спектр
комб. рассеяния.

2. 1977
N 5

17

(+2)

Структура

60531.7518

25071

pg 76

Ch, TC

(H₂)

от у Зисс

Hobza P., Zahradník R. Estimates
of geometry of molecular complexes based
on analysis of intermolecular forces.
"Collect. Czech. Chem. Commun.", 1976,
41, N 4, 1111-1120 (англ.)

0626 лжж

612 612

618

ВИНИТИ

H₂

1976

12 Б21. Расчеты основного и первого возбужденного состояния $^1\Sigma_g^+$ молекулы водорода спроектированным методом Хартри — Фока. Howat G., Lunell S. Projected Hartree—Fock calculations on the ground and first excited $^1\Sigma_g^+$ states of the hydrogen molecule. «Quant. Sci. Meth. and Struct. Tribute Per—Olov Löwdin». New York—London, 1976, 491—498 (англ.).

кв. мех.
расчет

Рассмотрено применение спроектированного метода Хартри — Фока для расчета энергии молекулы водорода в двух низших состояниях симметрии $^1\Sigma_g^+$ (основном и первом возбужденном). Сопоставлены значения энергии, полученные в приближении «различные орбитали для разных спинов» и в приближении, используя

х. 1977. №12.

щем спин-орбитали общего вида (т. е. без связывания пространственной части только с α - или с β -функцией). Вычисления проведены с несколькими базисными наборами слейтеровских функций s - и p_{σ} -типа, описанными разными авторами. Показано, что переход к спин-орбиталям общего вида приводит к понижению энергии на величину порядка 0,001 ат. ед. независимо от используемого базисного набора. В случае первого возбужденного состояния метод правильно передает характерные особенности потенциальной кривой, а именно наличие двух минимумов. Отмечается, что для систем с большим числом электронов применение спроектированного метода Хартри — Фока сложнее, чем обычного метода конфигурац. взаимодействия.

А. В. Немухин

H₂

1976

6 Д145. Расчеты основного и первого возбужденного состояний $^1\Sigma_g^+$ молекулы водорода спроектированным методом Хартри — Фока. Howat G., Lunell S. Projected Hartree-Fock calculations on the ground and first excited $^1\Sigma_g^+$ states of the hydrogen molecule. «Quant. Sci. Meth. and Struct. Tribute Per-Olov Löwdin». New York — London, 1976, 491—498 (англ.)

Спроектированным методом Хартри — Фока проведен расчет двух низших состояний $^1\Sigma_g^+$ молекулы H₂. Пробные волн. ф-ции представляли собой проекции по спину и по симметрии одностермических ф-ций с орбиталей.

м.п; ϵ_i

ф. 1977 № 6

ми различных типов, в том числе с орбиталями общего вида $\psi(r) = \psi^+(r)\alpha + \psi^-(r)\beta$, где α и β — спинные ф-ции. Базисы включали различное число центрированных на ядрах s - и p -орбиталей слэтеровского типа. Метод позволил воспроизвести двойной минимум на потенц. кривой первого возбужденного состояния ${}^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 . Отмечено, что при переходе к системам с большим числом электронов в рамках предложенной схемы могут возникнуть затруднения в интерпретации результатов и в проведении расчетов по сравнению с обычной схемой метода конфигурац. взаимодействия.

Н. Ф. Степанов

70414.1817

Ph, Ch, TC

30063
Болотовский рукопис.,
H₂

1976

* 4-17994

Huggett J.P., Armour E.A.G.

The optimization of the nonlinear parameters in the transcorrelated method: the hydrogen molecule. "J. Phys. B: Atom and Mol. Phys.", 1976, 9., N 18, 3263-3273
(англ.)

0851 ммк

808 818

842

ВИНИТИ

H_2

1976

14 Б28. Одноцентровый расчет молекулы H_2 . Иванов Л. Н. «Оптика и спектроскопия», 1976, 40, № 3, 435—441

При расчете молекул по теории возмущений предложено в качестве возмущения рассматривать полное межэлектронное взаимодействие и несферич. часть электрон-ядерного взаимодействия. Это позволяет свести расчет энергии с точностью до третьего порядка к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений с известными граничными условиями при $r=0$. Рассчитана хартри-фоковская и часть корреляц. энергии первых четырех $^1\Sigma$ -состояний молекулы H_2 . При межъядерных расстояниях $R=1,2-2,8$ ат. ед. ошибка в определении хартри-фоковской энергии составила 0,0050—0,02%.

Резюме

Кв. мех.
расчет.

X/1976 N14

H_2

1976

7 Д108. Одноцентровый расчет молекулы H_2 . И в а -
н) о в Л. Н. «Оптика и спектроскопия», 1976, 40, № 3,
435—441

При расчете молекул по теории возмущений предлага-
ется в качестве возмущения рассматривать полное
межэлектронное взаимодействие и несферич. часть элект-
рон-ядерного взаимодействия. Это позволяет свести
расчет энергий с точностью до 3-го порядка к решению
системы обыкновенных диффер. ур-ний с известными
граничными условиями при $r=0$. Рассчитаны хартри-
фоксовская энергия и часть корреляционной энергии
первых четырех $^1\Sigma$ -состояний молекулы H_2 . При межъ-
ядерных расстояниях $R=1,2-2,8$ ат. ед. ошибка в опре-
делении хартри-фоксовской энергии составила 0,0050—
0,02%.

Автореферат

расчет
молекулы

Р 1976 № 4

1976

H₂

85: 10582k One-center calculation of a hydrogen molecule. Ivanov, L. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1976, 40(3), 435-41 (Russ). In calcn. of mol. by the perturbation theory, the total interelectron interaction and the nonspherical part of the

electron-nucleus interaction can be considered as a perturbation, allowing an accurate calcn. of energies up to the 3rd-order, by the soln. of a normal system of differential equations with known boundary conditions for $r = 0$. The Hartree-Fock and part of the correlation energy of the 1st four Σ -states of the H₂ mol. were calcd. For internuclear distances of $R = 1.2-2.8$ at. units, the error in the detn. of the Hartree-Fock energy was 0.005-0.02%.

A. Fuchs

Кб. рефер.
факт

C.H. 1976 85 N2

H₂

1976

12 И70. Колебательно-вращательные уровни энергии и термодинамические функции H₂⁺. Иорш В. С., Юнгман В. С. «Ж. физ. химии», 1976, 50, № 8, 1932—1935

С использованием квантовой механич. потенц. ф-ции основного электронного состояния H₂⁺ численным интегрированием ур-ния Шрёдингера рассчитаны все колебательно-вращательные уровни. На основе полученных данных методом непосредственного суммирования вычислена таблица термодинамич. ф-ций H₂⁺ (C_p[°], Ф_T[°], S_T[°] и H_T[°]—H₀[°]) в состоянии идеального газа в интервале 100—20 000° К.

Ф 1976 N 12

BX-49

1976

 H_2 C_2H_4 Li_2H_2 E_i , ч.п.

7 Д142. Анализ спектральной плотности ядерного спин-спинового взаимодействия. II. Изучение констант гомоядерных—взаимодействий методом Хартри—Фока в приближении ЛКАО. Jansen H. B., Lohman J. A. B., Pyykkö P. Spectral density analysis of nuclear spin-spin coupling. II. Hartree—Fock LCAO studies for homonuclear coupling constants. «Chem. Phys.», 1976, 12, № 3, 273—280 (англ.)

Предложен метод расчета константы спин-спинового взаимодействия одинаковых атомов, в котором обычное суммирование по дискретному спектру виртуальных орбиталей заменено на интегрирование по орбитальным экспонентам атомных ф-ций с введением весовой ф-ции, называемой ф-цией спектральной плотности. Т. обр.,

(+2)

X



90 1976 N7

ф-ция спектральной плотности характеризует вклад возбужденного состояния в разложение константы спин-спинового взаимодействия. Развита методика применения для расчета констант спин-спиновых взаимодействий в молекулах водорода, этилена и Li_2H_2 . В расчетах использованы базисы слэтеровских и гауссовых ф-ций. Полученные результаты указывают, что величина константы спин-спинового взаимодействия, рассчитанная с использованием ф-ции спектральной плотности, стабильна по отношению к базису и удовлетворительно согласуется с экспериментом. Ч. I см. РЖФиз, 1976, 3Д123.

А. Дементьев

H + H

ammuck 4260

1976

Janer R.K.

(кв.мех.
пары)

On the long-range
configuration interaction
between ionic and covalent
states.

J. Chem. Phys., 1976, 64 No 5, 1891-94.

H₂

*4-16642

1976

6 Д146. Неэмпирический расчет спин-вращательного взаимодействия в метастабильном $c^3\Pi_u(1s, 2p)$ -состоянии молекулярного водорода. Jette A. Norman. The ab initio calculation of the spin-rotational coupling in the metastable $c^3\Pi_u(1s, 2p)$ state of molecular hydrogen. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 10, 4325—4327 (англ.)

Проведен неэмпирич. расчет величины спин-вращательного взаимодействия (СВВ) в метастабильном $c^3\Pi_u(1s, 2p)$ -состоянии молекулы водорода с использованием оптимальной двухконфигурац. волн. ф-ции, являющейся комбинацией связывающей и разрыхляющей конфигураций. Приведены вклады в СВВ от каждой из конфигураций. Величина СВВ определяется в основном молекулярной орбиталью $1s\sigma_g$, что объясняет близость СВВ для всех $np^3\Pi_u$ ридберговских состояний H₂. Отмечено удовлетворительное согласие расчетов с эксперим. данными.

Г. М. Жидомиров

Min.

+ 1977 N 6

H₂

* 3 - 16642

1976

11 Б20. Неэмпирический расчет спин-вращательного взаимодействия молекулы водорода в метастабильном состоянии $c^3\Pi_u(1s, 2p)$. Jette A. Norman. The ab initio calculation of the spin-rotational coupling in the metastable $c^3\Pi_u(1s, 2p)$ state of molecular hydrogen. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 10, 4325—4327 (англ.)

Рассчитаны постоянные спин-вращательного взаимодействия молекулы водорода в метастабильном состоянии $c^3\Pi_u(1s, 2p)$. Использована двухконфигурац. молек. волновая функция, представляющая собой линейную комбинацию связывающей и антисвязывающей конфигураций. Рассчитанное значение постоянной S отличается от эксперим. величины на 7%, постоянной δ — на 16%. Частично погрешность вычисления объяснена тем, что оптимизация использованного базиса проведена для состояния $^1\Pi_u$. Основные вклады в величины постоянных спин-вращательного взаимодействия определяются связывающей конфигурацией. По этой причине значения постоянных близки для всего ряда ридберговских состояний $np^3\Pi_u$ молекулы водорода. А. В. Немухин

кв. мех.
расчет

X, 1977. N 11

H₂

Jungen Martin

1976

"Theor chim acta" 1976,
41, N 1, 51-58 (ausg)

Kinematik.

и номени.
Физика.

(см H₂⁺; III)

1976

ИТ-5104

H₂ (расчет и. н., пометы, кривые)

Kolos W,

J. Mol. Spectrosc, 1976, 62, N3, 429-441

ОТЧЕТ

10

H₂

оттисек 4805

1976

4 Д342. Сечения возбуждения излучения H₂(3p²Π_u—2s³Σ_g⁺) при электронном ударе H₂. Möhlmann G. R., De Heer F. J. Emission cross sections of the H₂(3p³Π_u→→2s³Σ_g⁺) transition for electron impact on H₂. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 43, № 2, 240—244 (англ.)

Сечения возбуждения излучения H₂(³p³Π_u, s'→2s³Σ_g⁺, v'' с v'=v''=0, 1, 2, 3) при электронном ударе молекул H₂ измерены в области энергий электронов от 0 до 100 эв. Определено полное сечение возбуждения состояния ³p³Π_u. Максим. значение полного сечения равно (4,2±±0,8)·10⁻¹⁸ см² при 15,6 эв, что хорошо согласуется с расчетным значением 4,1·10⁻¹⁸ см². Ф-ция возбуждения также хорошо согласуется с теоретической, однако существенно отличается от полученных экспериментально другими авторами. Обсуждены возможные причины различий.

сечение
возбуждения

Ф. 1976 № 4

H₂

1976

22 Б22. Расширенное приближение случайных фаз в применении к возбуждениям H₂. Kaldor Uzi. Augmented random phase approximation applied to H₂ excitations. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 11, 4812—4814 (англ.)

Предложенное ранее (J. Chem. Phys., 1975, 62, 1276) расширенное приближение случайных фаз использовано для вычисления вертикальных энергий возбуждения из основного состояния молекулы H₂ в низшие 16 состояний типов $1,3\Sigma_{g,u}^{+}$ и $1,3\Pi_{u,g}$ при межъядерном расстоянии 1,4 ат. ед. Результаты вычислений согласуются с данными, полученными на основе многочастичной тео-

(E_i)

X. 1976. № 22

рии возмущений в пределах 0,3 эв. Сделано заключение, что энергии возбуждения, рассчитанные в приближении случайных фаз, могут быть улучшены в рамках расширенного варианта за счет включения поправок, учитывающих частично-частичные и дырочно-дырочные взаимодействия. Указана ошибка в ф-лах исходной работы для диагональных вертексов.

А. В. Немухин

60920.9026

Ch, Ph, TC

96201

 H_2 (react. E)

1976

#8-14740

Kendrick John, Hillier Ian H.

A computational method of performing
MC SCF calculations using bonded func-
tions. "Chem. Phys. Lett.", 1976, 41,
N 2, 283-286 (англ.)

0704 ЯНН

675 677 6 96

ВИНИТИ

H₂

X1-5109

X4-15921

1976

7 Б20. Неэмпирические кривые потенциальной энергии и колебательные уровни для B'' , $\bar{B}$, и $B' {}^1\Sigma_u^+$ состояний молекулы водорода. Kolos W. Ab initio potential energy curves and vibrational levels for the B'' , $\bar{B}$, and $B' {}^1\Sigma_u^+$ states of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 62, № 3, 429—441 (англ.)

В приближении Борна — Оппенгеймера для молекулы водорода рассчитаны потенциальные кривые состояний B'' , $\bar{B}$ и B' симметрии ${}^1\Sigma_u^+$. Волновые функции построены как многочленные разложения в эллиптич. координатах, содержащие явно зависимость от межэлектронного расстояния. Проведена частичная оптимизация показателей экспонент и отбор наиболее существенных слагаемых в разложении в небольшом числе промежут. точек. Энергия состояния B' получена как второй корень векового уравнения симметрии ${}^1\Sigma_u^+$ в области межъядерных расстояний R от 1,2 до 20 ат. ед. Потенциальная кри-

M.N.

X.1977N7

вая имеет единственный минимум при $R=2,09$ ат. ед. глубиной $8945,44 \text{ см}^{-1}$. Третий корень векового ур-ния соответствует состоянию, к-рое при малых R представляет состояние B'' , имеющее минимум глубиной $17855,63 \text{ см}^{-1}$ ($R=2,025$), а при больших R переходит в состояние B , характеризующееся широким минимумом глубиной $10968,56 \text{ см}^{-1}$ ($R=11,25$). При больших R энергия $\bar{B}$ состояния совпадает с кулоновской энергией взаимодействия $H^+ + H^-$, что указывает на ионную природу этого состояния, однако его диссоционный предел соответствует нейтр. атомам $H (n=1) + H (n=3)$. С полученными потенциальными кривыми рассчитаны колебательные уровни энергии молекул H_2 , HD и D_2 . Показано, что в состоянии с двойным минимумом низшие колебательные уровни состояния B'' незначительно изменяются из-за присутствия второго минимума. Малые расхождения между рассчитанными и эксперим. значениями энергии объяснены неучтенными неадиабатич. эффектами.

А. В. Немухин

H₂

HD

D₂

М.И. До
/

Ф. 1977
N 4

5015-IX

4 Д122. Неэмпирические кривые потенциальной энергии и колебательные уровни состояний B'' , $\bar{B}$ и B' $^1\Sigma_u^+$ молекул водорода. Kolos W. Ab initio potential energy curves and vibrational levels for the B'' , $\bar{B}$, and B' $^1\Sigma_u^+$ states of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 62, № 3, 429—441 (англ.)

Для межъядерных расстояний $r \leq 20$ ат. ед. неэмпирич. путем в приближении Борна — Оппенгеймера и с использованием вариацион. метода вычислены потенц. кривые состояний B'' , $\bar{B}$ и B' , соответствующих симметрии $^1\Sigma_u^+$ молекул H₂, HD и D₂. Потенц. кривая состояния B' обычной формы, а состояния B'' и $\bar{B}$ соответствуют двум минимумам на одной потенц. кривой, причем $\bar{B}$ на асимптотике соответствует энергии ионной пары $H^+ + H^-$. Вычислены колебательные и вращательные постоянные указанных состояний, а также их энергии диссоциации. Так, для молекул H₂, HD и D₂ энергий диссоциации состояния B' равны соответственно 16758,6; 16903,8 и 17076,5 см⁻¹, а энергии колебательных квантов 2077,4; 1814 и 1495,5 см⁻¹. Для состояния B' эти энергии соответственно равны 7939,69; 8072,44; 8230,68 см⁻¹ и 1887,78; 1653,58; 1368,12 см⁻¹.

Г. Ф. Гордеев

1976

12691-52X

(2)

17

H₂

45-15921 XI-5104 1976

85: 151085n Ab initio potential energy curves and vibrational levels for the B'', B, and B' $^1\Sigma_u^+$ states of the hydrogen molecule. Kolos, W. (Max-Planck-Inst. Phys. Astrophys., Munich, Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976; 62(3), 429-41 (Eng). The 2nd and 3rd lowest eigenvalues of the Hamiltonian for the hydrogen mol., corresponding to the $^1\Sigma_u^+$ symmetry, were calcd. in the Born-Oppenheimer approxn. for $R \leq 20$ and 15 a.u., resp. The variational method with a highly flexible wavefunction was used. The 3rd eigenvalue was 2 minima representing, resp., the B'' and the B state, the latter predicted recently by I. Dabrowski and G. Herzberg (1976). The 2nd eigenvalue representing the B' state, in contrast to previous indications, has a single min. The vibrational equation with both potentials was solved for H₂, HD, and D₂. The small discrepancies between the computed and exptl. energies are mass dependent and are likely to be mainly due to the adiabatic effects not included in the present computation.

кб. мех.
факт

C.A. 1976. 85 N20

H₂

№ 13-13531

1976

20 Б38. Взаимодействие на больших расстояниях в молекуле H₂ в состояниях D и D' . Kolos W. Long-range interaction in the D and D' states of H₂. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 39, № 3, 416—417 (англ.)

Вариационным методом с использованием пробных волновых функций Колоса и Вольневича (J. Chem. Phys., 1965, 43, 2429), к-рые содержат от 75 до 80 членов, рассчитана энергия взаимодействия $E(R)$ между двумя атомами водорода в молекуле H₂, находящейся в состояниях D или $D'^1\Pi_u$, для больших межъядерных расстояний R ($12 \leq R \leq 25$ ат. ед.). Полученные данные сопоставлены с результатами расчета $E(R)$ рассматриваемых состояний методом теории возмущений Релея—Шредингера с мультипольным разложением гамильтониана взаимодействия. Сделан вывод, что метод теории возмущений даст правильные величины для $E(R)$ только при $R > 25$ ат. ед., т. е. в области, где взаимодействие атомов H практически отсутствует.

По резюме

X, 1976, № 20.

№ 13531

1976

H + H

10 Д70. Взаимодействия на больших расстояниях в состояниях D и D' H_2 . Kolos W. Long-range interaction in the D and D' states of H_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1976, 39, № 3, 416—417 (англ.)

Энергии взаимодействия двух атомов водорода ($H(n=1) + H(n=3)$) в состояниях D и D' $^1\Pi_u$ молекулы H_2 рассчитаны вариационным методом для межъядерных расстояний $R=12, 15, 20, 25$ ат. ед. Использовались очень гибкие трехэлектронные групповые функции. Вычисленные значения сопоставлены с результатами, полученными с помощью теории возмущения Рэлея—Шрёдингера в поляризованном приближении с использованием асимптотического мультипольного разложения гамильтониана взаимодействия. Показано, что теория возмущений дает надежные результаты лишь для $R > 25$ ат. ед., т. е. в области, где энергии взаимодействия пренебрежимо малы.

О. В. Сизова

взаимо-
действие

Ф. 1976 № 10

1976

H...H

He⁺...HHe...H⁺

6 Д60. Дальнодействующие силы в некоторых двухэлектронных системах. Kolos W. Long-range interaction in some two-electron systems. «Quant. Sci. Meth. and Struct. Tribute Per-Olov Löwdin». New York-London, 1976, 465—477 (англ.)

Дан обзор последних работ по исследованию взаимодействий в системах H...H (состояния $X^1\Sigma_g^+$, $B^1\Sigma_u^+$), He⁺...H (состояния $A, a^{1,3}\Sigma^+$) и He...H⁺. Подробно рассмотрено изменение корреляционной энергии (ΔE) атома He, взаимодействующего с протоном. Вклад ΔE в полную энергию взаимодействия (в процентах) практически постоянен по абс. величине при всех значениях межатомных расстояний, но при $R = 5$ ат. ед. ΔE меняет знак. Обсуждаются также некоторые неаднабатиц. эффекты в несимметричных молекулах (типа HD).

В. И. Барановский

(ΔE) взаимодейств

Ф. 1977 № 6

(+1)



3 Д160. Неэмпирический расчет кривых потенциальной энергии и колебательных уровней для состояний C и $D^1\Pi_u$ молекулы водорода. Kolos W., Rychlewski J. An initio potential energy curves and vibrational levels for the C and $D^1\Pi_u$ states of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 62, № 1, 109—121 (англ.)

Волновые ф-ции с оптимизированными экспонентами состояний C и $D^1\Pi_u$ молекул H_2 , HD и D_2 записаны в эллиптич. координатах и представлены в виде сумм 80 членов, содержащих первые и вторые степени расстояния R между ядрами. С этими ф-циями вычислены значения полной энергии, ее производной по R и энергий диссоциации D для 37 и 44 значений $R=1-12$ и $1-25$ ат. ед. Вычислены также энергии диссоциации D_0 и частоты начальных полос электронных переходов. С найденными потенц. ф-циями выполнены численные решения колебательных ур-ний и определены колебательные энергии и вращательные постоянные B_v при $v=0-18$. Все рассчитанные параметры всех трех молекул хорошо согласуются с эксперим. значениями, и полученные в приближении Борна—Оппенгеймера потенц. ф-ции следует считать наилучшими. Обсуждаются причины некоторых небольших расхождений. М. А. Ковнер

1976

48-15032

(+2)

X

H_2

HD

D_2

М.П. Д₀

ф. 1977
N 3

H₂

1976

6 Б126. Потенциальные кривые, рассчитанные «ab initio» и колебательные уровни для состояний C и D¹π_u молекулы водорода. Kołos W., Rychlewski J. Ab initio potential energy curves and vibrational levels for the C and D¹π_u states of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 62, № 1, 109—121 (англ.)

потенциальные
кривые

203051-52K

л. 1977 № 6

H₂

1976

расчет
колебат.
вращ.
уровней

12 Д146. Оценка эффективного неадиабатического межъядерного потенциала для молекулы водорода методом типа РКР. Kuriyan Mary, Pritchard Huw O. An R. K. R.-like estimate of the effective non-adiabatic internuclear potential for the hydrogen molecule. «Can. J. Chem.», 1976, 54, № 12, 1865—1869 (англ.; рез. франц.)

(см. на обороте)

ф 1976 N 12

Исходя из расчетной потенц. кривой и используя эксперим. данные по энергетич. уровням молекулы H_2 , авторы получили эффективный потенциал, позволяющий описать энергии колебательно-вращательных уровней этой молекулы с точностью $\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$. Погрешность приблизительно одинакова для всех вращательных квантовых чисел J ; для которых имеются эксперим. данные. Полученные результаты указывают на наличие неадиабатич. эффектов, обуславливающих некоторое расхождение между теорией и экспериментом.

В. И. Барановский

M₂

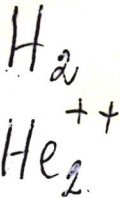
[0000 5053]

1976

Lai C. S., et al

[J]

Can. J. Phys. 55,
N 7-8. 609-14



[оммис 4566]

расчет
основного
состояния

(+1)

Л. 1977 №1



1 Б6. Сравнительное исследование нетрадиционных базисных $1s$ -функций для основного $^1\Sigma_g^+$ -состояния H_2 и He_2^{++} . Leclerc Jean - Glaude. Comparative study of unconventional $1s$ basis functions for the $^1\Sigma_g^+$ ground state of H_2 and He_2^{++} . «Int. J. Quantum Chem.», 1976, 10, № 3, 439—454 (англ.; рез. франц., нем.)

Проведено исследование относит. эффективности 15 одноэлектронных базисных функций $1s$ -типа для аппроксимации энергии E основного состояния $^1\Sigma_g^+$ молекул H_2 и He_2^{++} . Расчеты E выполнены методами ССП и конфигурац. взаимодействия. В кач-ве базисных орбиталей использованы орбитали слейтеровского и гауссова типа, эллипсоидальные и плавающие гауссовы орбитали, обобщенные функции Гиллемина — Зинера, эллиптич. орбитали и ряд др. функций. В нек-рых вариантах показатель степени n у радиальной или эллиптич. переменной ξ , умножаемой на экспоненциальную функцию, мог быть нецелым и варьировался. Все одно-двухэлектронные двухцентровые интегралы вычислены

19
x
6

использованием квадратурных ф-л Гаусса — Лежандра с масштабированием области интегрирования. Значения интегралов определены с точностью до 10^{-6} — 10^{-7} ад. ед. Сравнение результатов, полученных на разных базисах, показало, что наиболее эффективными по энергии являются орбитали с варьируемым показателем степени n и орбитали, допускающие факторизацию в эллиптич. координатах. Для ряда базисных функций проведено также сопоставление вычисл. равновесных межъядерных расстояний.

В. Хрустов

H_2

*4 - 16 528

1976

 He_2^{2+}

9 Б19. Гибридные 1s-орбитали слейтеровского — гауссова типа для $1\Sigma_g^+$ основного состояния H_2 и He_2^{2+} . Leclerc Jean-Claude. Hybrid Slater-Gaussian-type is orbitals for the Σ_g^+ ground state of H_2 and He_2^{2+} . «Int. J. Quantum. Chem.», 1976, 10, № 5, 781—789 (англ.; рез. франц., нем.)

Рассчитаны значения энергии основного состояния двухэлектронных систем H_2 и He_2^{2+} при равновесных межъядерных расстояниях с использованием волновых ф-ций, построенных из гибридных 1s-орбиталей, промежуточных между орбиталями слейтеровского и гауссова типа. Рассматривались след. общие выражения для орбиталей: $\chi_1 = r^n \exp[-\zeta(r-d)^m - \beta r]$ и $\chi_2 = \exp[-\alpha(x^2+y^2) - \gamma(z-d)^2 - \beta r]$, причем варьированию подвергались все параметры, включая и значения n и m . Наилучшие результаты, достигнутые с одноконфигурац. ф-циями в базисе орбиталей χ_1 , отличаются от предельных хартри-фоковских значений энергии на 0,000160 ат. ед. для H_2 и на 0,000382 для He_2^{2+} .

расчет
энергии
осн. сост.

(+1) X

Х. 1977
N 9

При этом оптим. значения параметров ф-ции χ_1 для H_2 составляют: $n = -0,180$, $\xi = 0,559$, $d = 0,0071$, $m = 0,993$, $\beta = 0,491$, а для He_2^{2+} — $n = 0,0283$, $\xi = 1,062$, $d = 0,0049$, $m = 0,995$, $\beta = 0,989$. Представлены также результаты расчетов методом конфигурац. взаимодействия (до четырех слагаемых). Подчеркнуто преимущество при нахождении энергии использования орбиталей данного типа по сравнению с др. гибридными орбиталями, содержащими такое же число варьируемых параметров.

А. В. Немухин

бар
клад
чает

1976

82591-5X

5 Д130. Гибридные $1s$ -орбитали слэтеровского и гауссового типов для расчета основного состояния Σ^1g^+ систем H_2 и He_2^{2+} . Leclerc Jean-Claude. Hybrid Slater — Gaussian-type orbitals for the $1\Sigma_g^+$ ground state of H_2 and He_2 . «Int. J. Quantum. Chem.», 1976, 10, № 5, 781—789 (англ.; рез. франц., нем.)

На примере расчета энергий основного электронного состояния систем H_2 и He_2^{2+} методом ограниченного конфигурац. взаимодействия исследованы различные типы $1s$ -ф-ций слэтеровского и гауссового типов. Наилучший по энергии результат получен при использовании в качестве базиса трехпараметрич. модифицированных ф-ций слэтеровского типа:

$r^n \exp(-sr^n)$, где n , s и n' — вариационные параметры. Энергии H_2 и He_2^{2+} , рассчитанные на базисе из двух ф-ций указанного типа, отличаются от предельных хартри-фоковских энергий соответственно на 0,00016 ат. ед. и 0,000382 ат. ед.

А. Дементьев

расчет
основн.
состояния

Ф. 1974 N5

(71)



1976

H_2
 He_2^{2+}

отлич 4576

расчет
молекулы

(+1)



K1976 N21

21 Б17. Изучение H_2 и He_2^{2+} в базисе трех- и четырехпараметрических функций типа 1s с нецелочисленным параметром n . Leclerc Jean—Claude. Study of H_2 and He_2^{2+} using three- and four-parameter non-integral- n 1s basis functions. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 4, 759—764 (англ.)

На примере расчетов молекулы H_2 и изоэлектронного ей иона He_2^{2+} рассмотрена пригодность базиса из функций типа: $\chi = (1 + pR\xi^n) \exp(-\alpha\xi + \beta\eta)R$, где p , n , α и β — параметры, R — межъядерное расстояние, ξ , η — эллиптич. координаты. Параметр n , в отличие от более ранних работ, может быть любым, не обязательно целым числом. В одноконфигурац. приближении с аппроксимацией МО одной четырехпараметрич. функцией χ получены полные энергии H_2 и He_2^{2+} , отличающиеся от точных хартри-фоковских значений на 0,00024 и 0,00055 ат. ед., соотв. При $1,3 \leq R \leq 3,0$ ат. ед. рассчитаны также потенциальные кривые Li_2^{4+} и Be_2^{6+} , имеющие отталкивательный характер. Основываясь на полученных результатах, авторы высказывают мнение, что введение нецелочисленных значений параметров в функциях χ позволяет сократить число функций без изменения точности расчета.

А. Дементьев

ХЗ-13542

1976

H₂
He⁺₂

11 Д111. Расчет основного состояния $^1\Sigma_g^+$ H₂ и He₂²⁺ с оптимизацией в рамках метода конфигурационного взаимодействия в приближении рациональной функции. Leclerc Jean-Claude. Rational function approximation of the configuration interaction optimized $^1\Sigma_g^+$ ground state of H₂ and He₂²⁺. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 4, 755—758 (англ.)

Для расчета $^1\Sigma_g^+$ основного состояния молекулы H₂ и иона He₂²⁺ в рамках метода конфигурационного взаимодействия использована четырехпараметрическая рациональная 1s-ф-ция вида $\chi = (\xi r^n + a)^{-1} \exp(-\xi r^n)$ с целыми и нецелыми n и n' . Взяты межъядерные расстояния $R=1,4$ ат. ед. (H₂) и $R=1,3$ ат. ед. (He₂²⁺). Результаты сопоставлены с расчетами, в которых применялась 1s СТО, 1s ГТО и 1s СТО с нецелым n . Найдено, что наиболее заметное понижение полной энергии достигается при использовании χ с нецелым n' .

О. В. Сизова

(1)

X

фрагмент
основн.
состояния
между
расстоян.

ф. 1976 №11

*4-13572

1976

H₂He²⁺₂расчет
основн.
состоян.

(+1)

1

X1976 N21

21 Б18. Приближение с помощью рациональной функции основных ($^1\Sigma_g^+$) состояний H₂ и He₂²⁺ в методе конфигурационного взаимодействия. Leclerc Jean — Claude. Rational function approximation of the configuration interaction optimized Σ_g^+ ground state of H₂ and He₂²⁺. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976. Part 2, 72, № 4, 755—758 (англ.)

При расчете основных состояний H₂ ($R=1,4$ ат. ед.) и He₂²⁺ ($R=1,3$ ат. ед.) в приближении конфигурац. взаимодействия использованы рациональные функции вида: $(\xi r^{n'} + a)^{-1} \exp(-\xi r^n)$, где ξ , a , n и n' — произвольные параметры, r — расстояние до ядра. Конкретно рассмотрены случаи одной, двух и трех конфигураций. Полученные значения полных энергий сопоставлены с энергиями, вычисл. в базисах из слейтеровских, гауссовых и четырехпараметрических (см. пред. реф.) функций. Показано, что оптимальные по энергии значения n' являются нецелыми.

А. Дементьев

H₂

D₂

1976

85:133503t The absorption cross sections of molecular hydrogen and molecular deuterium from 180 to 780 Å. Lee, L. C.; Carlson, R. W.; Judge, D. L. (Dep. Phys, Univ. South. California, Los Angeles, Calif.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1976, 16(10), 873-7 (Eng). The abs. photoabsorption cross sections of H₂ and D₂ were measured photoelec. in the wavelength region from 180 to 780 Å using synchrotron radiation. At photon wavelengths shorter than 650 Å, the absorption cross section was structureless and decreased monotonically with decreasing wavelength. In this spectral region, both gases have nearly equal absorption cross sections, varying only within the exptl. error. At photon wavelengths $>\lambda$, 650 Å, structure is evident in the cross section of both gases and presumably corresponds to the Rydberg States reported by various authors.

(6 nms.)

(+1) ☒

C.A. 1976 85 N 18

H_2

ЖЗ-16859

1976

6 Д147. Применение метода Уоллера — Хартри в расчетах КВ. Lim T. K., Chapuisat X. Application of the Waller-Hartree method to CI calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 44, № 3, 553—556 (англ.)

В современном варианте метода Уоллера — Хартри полная ф-ция конфигурац. взаимодействия (ПСКВ) записывается в виде линейной комбинации спроектированных по спину конфигураций (с учетом возможного наличия нескольких линейно независимых ф-ций, принадлежащих одному и тому же собств. значению S^2). Расчеты, проведенные для низших синглетного и триплетного ($S_z=0$) состояний молекулы H_2 , показали, что ф-ция ПСКВ приводит к более низким значениям полной энергии, чем ф-ция обычного метода КВ. Ф-ция, полученная методом КВ с последующим проектированием по спину, дает результаты, промежуточные между получаемыми в приближениях КВ и ПСКВ. О. С.

М.П.

ф. 1977 № 6

H₂

Оттиск 4855

1976

D₂

фотодис-
социация

⊕ ⊗

4 Д713. Серии Бальмера во флуоресценции фрагментов фотодиссоциации H₂ и D₂. Lee L. C., Judge D. L. Balmer-series fluorescence from photodissociation fragments of H₂ and D₂. «Phys. Rev. A: Gen Phys.», 1976, 14, № 3, 1094—1100 (англ.)

В области длин волн 686—723 Å исследованы процессы фотодиссоциации молекул H₂ и D₂ с образованием возбужденных атомов H и D. Измерены сечения диссоциативного возбуждения излучения в линиях серий Бальмера (3500—7000 Å), которые затем использованы для определения парциальных сечений фотодиссоциации молекул с образованием атомов в состояниях с $n \geq 3$. Зависимость парциальных сечений фотодиссоциации от избыточной кинетич. энергии осколков согласуется с ранее рассчитанной для $n=2$. На этом основании процесс фотодиссоциации приписан в основном прямому фотовозбуждению молекул из основного состояния в состояние диссоциационного кон

Ф. 1977 № 4

тинуума. О том же свидетельствует и тот факт, что измеренное отношение сечений для $n=4$ и 5 хорошо согласуется с расчетным значением отношения квадратов соответствующих моментов перехода. Однако, отношение сечений для $n=3$ и 4 расходится с полученным в тех же расчетах, что указывает на заметный вклад преддиссоциационного механизма образования атомов с $n=3$. Особая роль преддиссоциации в образовании атомов H с $n=3$ была предсказана теоретически.

Библ. 24. В. С. Иванов.

и это
обла.

1976

H₂

(M, n)

X 1976
N 13

13 Б70. Разложение собственных функций осциллятора Морзе по неортогональному базису функций смещенного гармонического осциллятора. Lesk Arthur M. Expansion of eigenfunctions of a Morse oscillator in a nonorthogonal basis of displaced harmonic oscillator functions. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 38, № 1, 113—116 (англ.)

Проведен расчет колебательных уровней энергии для осциллятора Морзе, соотв-щего основному электронному состоянию молекулы H₂. Расчет выполнен с помощью вариационного метода. В качестве базисов использовано 14, 20 и 30 функций гармонического осциллятора, каждая из которых центрирована на расстоянии Δ от точки минимума потенциала Морзе, причем для каждого из базисов Δ служило вариационным параметром. Введение Δ позволяет существенно улучшить результаты по сравнению с результатами расчета на несмещенном базисе. Еще лучшие результаты дает такое распределение базисных функций, при котором центры соотв-щих осцилляторов смещаются линейно с номером функции. Б. И. Жилинский

H₂

1976

7 Д111. Разложение собственных функций осциллятора Морзе по неортогональному набору смещенных полиномов Эрмита. Lesk Arthur M. Expansion of eigenfunctions of a Morse oscillator in a nonorthogonal basis of displaced harmonic oscillator functions. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 38, № 1, 113—116 (англ.)

Изучается возможность представления собств. ф-ций потенциала Морзе через полиномы Эрмита. Диагонализацией энергетич. матрицы рассчитаны энергии и ф-ции первых четырнадцати колебательных состояний молекулы H₂ с использованием 14-, 20- и 30-членного разложения по полиномам Эрмита. Рассмотрен случай, когда все базисные полиномы Эрмита центрированы в точке положения равновесия молекулы, а также когда эта точка смещена для всех полиномов на одну величину c и когда смещение центра для n -го полинома определяется ф-лой $a + bn$. Величины a , b , c определяются из условия минимизации среднего отклонения расчетных энергий от известных точных значений для рассматриваемых четырнадцати состояний. Во 2-м варианте получено заметное улучшение результатов по сравнению с 1-м вариантом для возбужденных состояний ($v > 5$), второй и третий варианты практически равноценны.

расчет
колебат.
состояний
молекулы

Ф1976 N7

Л. Н. Иванов

H₂

*4-17248

1976

Д464. Синглет-триплетные пересечения между нечетными состояниями H₂. Miller Terry A., Freund Robert S. Singlet-triplet anticrossings between ungerade states of H₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 2, 193—204 (англ.)

Наблюдались сигналы пересечения между состояниями $B'(3p)^1\Sigma_u^+$ и $f(4p)^3\Sigma_u^+H_2$, связанными излучательными переходами с основным состоянием. Получены невозмущенные значения расщепления между колебательно-вращательными состояниями $B'(3p)^1\Sigma_u^+$, $v=3$, $N=0 \leftrightarrow f(4p)^3\Sigma_u^+$, $v=0$, $N=0$ ортоводорода ($\nu_0=42767 \pm 12$ см⁻¹) и $B'(3p)^1\Sigma_u^+$, $v=3$, $N=1 \leftrightarrow f(4p)^3\Sigma_u^+$, $v=0$, $N=1$ параводорода ($\nu_0=4943 \pm 12$ см⁻¹). Определены разности g -факторов состояний и из ширины сигналов рассчитано радиационное время жизни синглетного состояния. Установлено, что отношение сил осцилляторов для запрещенного перехода из основного в триплетное состояние и перехода в синглетное состояние составляет 10^{-7} . Библ. 27.

Н. Я.

излучат.
переходы,
f_{min}

ф 1977 №3

H₂

#4-17248

1976

13 Б29. Синглет-триплетные антикроссинги между нечетными состояниями H₂. Miller Terry A., Freund Robert S. Singlet—triplet anticrossings between ungerade states of H₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 2, 193—204 (англ.)

Экспериментально изучены два синглет-триплетных антикроссинга между ортосостояниями $B'(3p)^1\Sigma_u^+$, $v=3$, $N=0$ и $f(4p)^3\Sigma_u^+$, $v=0$, $N=0$ и между парасостояниями $B'(3p)^1\Sigma_u^+$, $v=3$, $N=1$ и $f(4p)^3\Sigma_u^+$, $v=0$, $N=1$ молекулы H₂. Неравновесная заселенность синглетного и триплетного состояний получена в результате облучения электронами. Положение антикроссинга определено по резкому возрастанию интенсивности оптич. перехода при нек-ром значении приложенного магнитного поля, величина к-рого соответствует совпадению по энергии синглетного и одной из компонент триплетного уровня. По полученным эксперим. данным найдены величины синглет-триплетного расщепления в отсутствие поля, величина контактного взаимодействия Ферми в триплетном состоянии и различие в орбитальных g-факторах для двух исследуемых состояний. По значениям ширины линий оценено время жизни со-

Заклещ.
уровней

X. 1977. №13

стояния $B'^1\Sigma_u^+$. Найдено, что сила осциллятора для
запрещенного перехода из основного состояния в со-
стояние $f(4p)^3\Sigma_u^+$, по крайней мере на семь порядков
меньше, чем для разрешенных переходов.

Б. И. Жилинский



H₂

№ 5 - 11846

1976

14 Б32. Расчет свойств связанных состояний H₂ методом многочастичной функции Грина. Моссиа R., Resta R., Zandomenighi M. Bound state properties of H₂ by the many-body Green's function method. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 37, № 3, 556—560 (англ.)

Предложен метод решения уравнения Дайсона для одночастичной функции Грина, использующий приближенное выражение для функциональной производной полного оптич. потенциала по отношению к внешнему одноэлектронному возмущению. Приближенное уравнение Дайсона при этом решается итерационным образом в рамках приближения Хартри — Фока. Метод применен к расчету молекулы H₂ при использовании базиса из слейтеровских функций (по четыре на каждом атоме водорода и семь на середине связи H—H). Найдены 15 полюсов функции Грина, соответствующие дискретным уровням энергии H₂, а также первые 6 вертикальных энергий ионизации.

Б. И. Жилинский

Метод
Хартри —
Фока

X, 1976, 14

H_2

Кв. мех.
расчет
 E_i, J

Д109. Свойства связанных состояний H_2 , определенные методом многочастичной функции Грина. Moscia R., Resta R., Zandomenighi M. Bound state properties of H_2 by the many-body Green's function method. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 37, № 3, 556—560 (англ.)

Метод ф-ции Грина применен для расчета полной электронной энергии и вертикальных энергий ионизации ϵ_v молекулы H_2 . Для нахождения одночастичной ф-ции Грина использовано уравнение Дайсона с приближенным оптич. потенциалом, полученным на основе метода функциональной производной, в базисе из четырех АО слэтеровского типа на каждом атоме H и семи АО на середине линии связи. Первые значения ϵ_v хорошо согласуются с экспериментальными, в то время как для более высоких значений ϵ_v согласие неудовлетворительное, что, по мнению авторов, объясняется ограниченностью базиса.

А. Ф. Шестаков

1976

9181-5-5

Р 1976 № 4

61123, 2608
Ch, Ph, TC

№ 29620 (физ. хим.) 1976
Хв-мех. расчет 4787

Nilssen Edvin Wisløff. A simple
approach to the correlation problem in
atoms and molecules. "Chem. Phys. Lett."
1976, 42, N 3, 429-432 (англ.)

0758 нмк .

714 716 750

ВИНИТИ

H₂

1976

186: 8813p Generalized finite element method applied to bound state calculation. Nordholm, Sture; Bacskay, George (Dep. Theor. Chem., Univ. Sydney, Sydney, Aust.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 42(2), 253-8 (Eng). The finite-element method (Strang, G.; Fix, G., 1973) was generalized to obtain a new procedure for numerically solving the Schroedinger equation. Essentially, the Schroedinger-equation domain is broken up into smaller subdomains, the equation for each subdomain is solved sep., and finally the local eigenstates thus obtained are combined, via an overlap-coupling principle, into the overall solns. of the original Schroedinger equation. The bound-state energy levels for the 1-dimensional box, the harmonic oscillator, and the Morse potential of the H₂ mol. calcd. by using the method agree satisfactorily with the exact values.

no mercy.
p-448

C.H. 1977 86 N2

1976

H₂

Li₂

86: 22119y Ab initio investigations of the potential curves of the ground state of the hydrogen molecule and of several states of the lithium molecule. Olson, Mark L. (State Univ. New York, Binghamton, N. Y.). 1976. 1305 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 76-22,584. From *Diss. Abstr. Int. B* 1976, 37(4), 1706.

kb. mex
pacem.

(+1)



C.A. 1977 86 N4

H₂

B̄-106

1976

LiF

N₂

B₂

HF

BH, C₂

NH, F₂

85:168973y Nonempirical calculations of force constants of diatomic molecules by the Hartree-Fock-Roothaan method with a differentiated evaluation of integrals. Perevozchikov, V. I.; Grikov, L. A. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1976, 41(2), 332-4 (Russ). Force constants were calcld. for H₂, LiF, N₂, B₂, HF, BH, C₂, NH, and F₂ by the Hartree-Fock-Roothaan method with differential evaluation of integrals. The square variation of the Slater parameter as a function of the intrat. distance, in particular the 1 s shell, offers an effective and relatively simple method for increasing the accuracy of quantum calcns. of the force consts and is more complicated than the overlap configuration method.

(parameter curve)



C.A. 1976 85 N22

H_2

БХ-106

1976

1 Д155. Неэмпирические расчеты силовых постоянных двухатомных молекул методом Хартри—Фока—Рутана с дифференцированной оценкой интегралов. П е р е в о з ч и к о в В. И., Г р и б о в Л. А. «Оптика и спектроскопия», 1976, 41, № 2, 332—334

По методу МО ЛКАО ССП в двух вариантах вычислены силовые постоянные молекул H_2 , LiF , N_2 , B_2 , FH , BN , C_2 , NH и F_2 . В 1-м варианте все одноэлектронные интегралы и интегралы перекрывания вычислялись при аппроксимации радиальных частей слэтеровских ф-ций и кулоновских операторов суммой гауссовых экспонент. Во 2-м варианте большинство интегралов было вычислено точно. Для улучшения результатов слэтеровские параметры варьировались, в особенности для 1 s-оболочек тяжелых атомов. Силовые постоянные вычислены путем дифференцирования полиномов. Сравнение рассчитанных и эксперим. значений силовых постоянных позволяет заключить, что приближенные методы не уступают по точности неэмпирич. расчетам, причем хорошо оправдываются изменения слэтеровских параметров как ф-ций межатомных расстояний. М. А. Ковнер

сил. пост.



Р. 1977. № 1

60624.4342

40892

1976

Ph, TC, Ch, MGU

 H_2

(u. n)

43-13395

Peatman Wm. B.

 H_2 (2d. chem)

Threshold electron

photoionization study of H_2 : vibration-rotation states of H_2^+ ($X^2 \Sigma_g^+$)."J. Chem. Phys.", 1976, 64, N 10, 4093-4099
(англ.)(см H_2^+ ; III)

0643 пик

624 630 635

ВИНИТИ

H₂

1976

11 Д192. Вырожденные автоионизационные процессы при фотоионизации H₂. Peatman Wm. B. Degenerate autoionization processes in the photoionization of molecular hydrogen. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 11, 4368—4374 (англ.)

С помощью анализатора пороговых электронов изучались процессы автоионизации, которые приводят к образованию электронов с энергией в области 0—0,003 эВ (вырожденные автоионизационные процессы). Показано, что вырожденные автоионизационные процессы не являются необычными. Существует предпочтительность для таких процессов при равенстве вращательных чисел для молекулы и иона. Это оказывается справедливым и для прямой фотоионизации. Высказано предположение о большой распространенности вырожденных автоионизационных процессов для многоатомных молекул.

Г. К.

фотоио-
низация
автоио-
низация

Ф. 1976 N 11

H₂

оттиски 3794

1976

12 Б14. Оптимизация геометрии с использованием
малого сгруппированного гауссовского базиса. Por-
pinger Dieter. Geometry optimizations with a small
contracted Gaussian basis set. «Chem. Phys.», 1976, 12,
№ 1, 131—137 (англ.)

опти-
мизация
геометр.

Базис ОСТ-2ГФ использован для расчета равновесных
геометрий большого числа молекул, в том числе H₂,
NH₃, H₂O, C₂H₂, CH₄, C₂H₄, C₂H₆, HCN, CH₂O, H₂CN₂,
HNCO, ряда карбониевых ионов и радикалов рассмот-
ренных углеводородов, всего 27 молекул. Сравнение с
расчетами в базисе ОСТ-3ГФ и экспериментом указыва-
ет, что для расчета Пв потенциальной энергии больших
молекул использование базиса ОСТ-2ГФ м. б. эффек-
тивным.

По резюме

(+10)



X1976 N12

61115.351

TC, Ph, Ch

 H_2

63253

1976

Структур. химия

4743

Pople John A. Structural studies using molecular orbital theory. "Bull. Soc. chim. belg.", 1976, 85, № 6, 347-361 (англ.)

07.47. пик

708 713 739

ВИНИТИ

70120.8300
Ch, Ph, TC

ракет реактив

40604

1976

H₂ (до) * 4-16322

K p. N 70120.8799

Pople John A., Binkley J. Stephen,
Seeger Rolf.

Theoretical models incorporating electron
correlation.

"Int. J. Quantum Chem. Symp.", 1976, N 10,
1-19 (англ.)

0795 пик

750 760

ВИНИТИ

60514.7580

35223

1976

Ch, Ph, TC

 H_2

* 13-12855

Pritchard ¹⁴Haw O., Wolniewicz

Lutosław. A re-examination of the adiabatic correction term for the hydrogen molecule. "Can. J. Chem.", 1976, 54, N 4, 651-656 (англ., рез. франц.)

596 601 6 0 6 0614 ЛМК ВМНТИ

1976

H₂Kb, mex.
Racet

90: 110258f Theoretical study of the hydrogen molecule. Ab initio calculation. Quitian, N. (Dep. Quim., Univ. Nac. Colombia, Bogota, Colombia). *Rev. Colomb. Quim.* 1977, 7(1): 49-55 (Span). Pub. in *Rev. Colomb. Quim.*, 1976 6(1). A linear combination of GTO in the SCF-MO treatment was used to calc. orbital energies, total electronic energy, nuclear

repulsion energy, and Hartree-Fock energy of the H₂ mol. in its ground state. Each 1s AO was developed as a linear combination of 3 and of 4 Gaussian functions. Total energies are -1.09 and -1.10 at. units, resp. R. W. Gable

C.A. 1979, 90, N14

H₂

ДТТ, 4387

1976

21 Б79. Теоретический расчет скорости индуцированной столкновениями ~~преддиссоциации~~ Ritchie A. G., Child M. S. The theoretical calculation of collision-induced predissociation. «Mol. Phys.», 1976, 31, № 5, 1527—1535 (англ.)

преддиссоц.
при столкнов.

Рассчитана константа скорости и сечения столкновительной преддиссоциации H₂ в состоянии D¹Π_u в результате возмущения состоянием B¹Σ_u⁺ при сближении H₂ с He. Вероятность перехода рассчитывалась в первом порядке теории возмущений по взаимодействию H_{v3}, а в области ее неприменимости считалась равной единице. Матричный элемент от H_{v3} вычислялся в приближении Кондона с колебательными франк-кондоновскими факторами, выраженными через функцию Эйри. Электронная часть матричного элемента определялась неэмпирич. методом в базисе слейтеровских функций H₂ и He и представлялась в виде суперпозиции двух угловых членов. Траектория относ. движения партнеров считалась прямолинейной. Рассчитанные скорости предис-

X1976 N 4

социации для колебательных состояний с $5 \leq v \leq 10$ варьируют в интервале $3,6 - 10 \cdot 10^7 \text{ сек}^{-1}$ при давл. Не 1 мм и изменяются с v немонотонно, отражая осцилляц. зависимость колебательного франк-кондоновского фактора от v . Абс. величины скорости удовлетворительно согласуются с экспериментальным значением $3 \cdot 10^7 \text{ сек}^{-1}$. Отмечается, что с ростом скорости сечение предиссоциации падает, а ширина энергетич. максимума распределения атомов Н возрастает; при $T = 1000 \text{ м/сек}$ она равна 30 см^{-1} .

Е. Е. Н.

H₂

1976

13 Б32. Электронные энергии молекулы водорода в $D^1\Pi_u$ и $B^1\Sigma_u^+$ состояниях. Ritchie A. G. Electronic energies of the hydrogen molecule $D^1\Pi_u$ and $B^1\Sigma_u^+$ states. «Int. J. Quantum Chem.», 1976, 10, № 6, 1071—1073 (англ.; рез. франц., нем.)

М.П.

Для анализа столкновительной преддиссоциации рассчитаны значения энергии $D^1\Pi_u$ и $B^1\Sigma_u^+$ состояний молекулы водорода при межъядерном расстоянии 1,5307 ат. ед., соотв.-щем точке пересечения термов. Задача заключалась в том, чтобы получить надежные результаты с минимально допустимым базисом слейтеровских орбиталей. Для состояния $B^1\Sigma_u^+$ хартри-фоковское значение энергии в базисе только 1s- и 2s-орбиталей (оптимизированные величины показателей экспонент равны 1,30 и 0,617, соотв.) получено равным —0,69206 ат. ед. Добавление к базису функций 2p и 3p приводит к уменьшению энергии до —0,70361. Для $^1\Pi_u$ состояния базисный набор составлен из 1s, 2p_σ, 3p_σ, 2p_π, 3p_π, орбиталей (показатели экспонент равны 1,30 для 1s орбитали и 0,5 — для всех остальных). Значение энергии состояния $D^1\Pi_u$, полученное методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех возможных для данного базиса возбуждений, составляет —0,62115.

А. В. Немухин

Х. 1974 - №13

1976

H₂

7 Д154. Электронные энергии состояний $D'\Pi_u$ и $B''\Sigma_u^+$ молекулы водорода. Ritchie A. G. Electronic energies of the hydrogen molecule $D'\Pi_u$ and $B''\Sigma_u^+$ states. «Int. J. Quantum Chem.», 1976, 10, № 6, 1071—1073 (англ.; рез. франц., нем.)

расчет
электронн.
энергии

Выполнены расчеты электронной энергии молекулы водорода в состояниях $B''\Sigma_u^+$ (конфигурация $1\sigma_g 2\sigma_u$), $C'\Pi_u$ ($1\sigma_g 1\Pi_u$) и $D'\Pi_u$ ($1\sigma_g 2\Pi_u$) для $R=1,5307$ ат.ед. (межатомное расстояние, при котором ожидается пересечение потенциальных кривых состояний B и D). Расчеты производились с небольшими, но тщательно оптимизированными базисами; учитывалось также конфигурационное взаимодействие. Получены следующие значения энергии: B , ССП: $-0,70361$; C , КВ: $-0,68906$; D , КВ: $-0,62115$ (ат. ед.).

В. И. Барановский

ф. 1977 № 7.

H₂

1976

86: 78981r Electronic energies of the hydrogen molecule $D''\Pi_u$ and $B''\Sigma_u^+$ states. Ritchie, A. G. (Dep. Theor. Chem., Oxford, Engl.). *Int. J. Quantum Chem.* 1976, 10(6), 1071-3 (Eng). Calcs. of the electronic energies and wave functions for $H_2 D''\Pi_u$ and $B''\Sigma_u^+$ states were carried out at the estd. curve crossing distance of 1,5307 at. units. The results show good agreement with previous calcs.

M. N.

C. B. 1977. 86 n12

Обзор.

1976

H₂

(A.P.; Y)

11 Д200. Измерение потенциалов появления и ионизации. Rosenstock H. M. The measurement of ionization and appearance potentials. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1976, 20, № 2—3, 139—190 (англ.)

Обзор эксперим. работ по определению потенциалов ионизации, а также потенциалов появления и теплоты образования различных положит. ионов. Подробно описаны различные эксперим. методы: фотоионизация и метод электронного удара, получение необходимой информации из спектра электронов ионизации и т. д. Спец. внимание уделено обсуждению возможных ошибок и погрешностей различных методик. Рассмотрены различные физич. модели, интерпретирующие эксперим. данные. Приведены результаты для молекул H₂, N₂, O₂, CO, NO, F₂, HF и ClF.

Б. Ф. Гордиец

(+7)

Δ



Ф. 1976 N 11

H_2

C_2H_2

$(H_2CO)_2$

р-ции
диссоц.

(обзор)

1976

12 Б55. Исследование химических реакций (методом) МК ССП: натуральные реакционные орбитали и локализованные реакционные орбитали. Ruedenberg Klaus, Sundberg Kenneth R. MCSCF studies of chemical reactions: natural reaction orbitals and localized reaction orbitals. «Quant. Sci. Meth. and Struct. Tribute Per-Olov Löwdin». New York—London, 1976, 505—515 (англ.)

Статья обзорного характера. Сформированы основные особенности применения многоконфигурац. (МК) методов ССП к рассмотрению потенциальных поверхностей хим. р-ций. Обсуждены критерии выбора миним. набора конфигураций, необходимых для анализа данного типа р-ций. Для реализации подобных расчетов предложено два альтернативных подхода, первый — эквивалентный использованию канонич. МО в одноконфигурац. методах ССП МО ЛКАО — предложено называть методом нату-

X. 1977. №12

(42) ☒

ральных реакц. орбиталей. Вторым подход, результаты которого имеют большую хим. наглядность, получил название локализованных реакц. орбиталей. В качестве примеров рассмотрены р-ции диссоциации H_2 , C_2H_2 , $(H_2CO)_2$, а также взаимодействия H_2O и NH_3 . Библ. 12.

И. Абронин

H_2

H_2^+

1976

14 Б125. Спектры резонансной фотоионизации.
Schlag E. W. Photoionization resonance spectra.
(Abstr.). «Spectrosc. Excited State». New York — London,
1976, 395—398 (англ.)

Кратко описан метод обнаружения резонансных состояний в ионизац. континууме полнотомных молекул и принципиальная схема детектора фотоэлектронов. Возможности новой методики показаны на примере двуокиси азота, бензола, хлористого метила и водорода. Для первых трех удалось наблюдать чисто колебательную структуру молек. ионов вблизи порога. В случае H_2 наблюдались линии вращательной структуры первых семи колебательных состояний иона H_2^+ . В. М. Ковба

спектры
фотоио-
низации

Х, 1977. №14



H_2

1976

2 Б92. Спектроскопия низкоэнергетичных столкнове-
ний $H^+ + H_2$. Вращательное и колебательное возбужде-
ние H_2 . Schmidt H., Hermann V., Linder F.
Spectroscopy of low-energy $H^+ + H_2$ collisions: rotational
and vibrational excitation of H_2 . «Chem. Phys. Lett.»,
1976, 41, № 2, 365—369 (англ.)

вращат.
колебат.
возбужд.
при столкнов.

Методом скрещенных пучков исследовано рассеяние
иона H^+ молекулами H_2 при энергиях $E_{\text{лаб}} = 5-30$ эв
и углах $\theta_{\text{лаб}} = 5-40^\circ$. Измерены (с разрешением 0,05—
0,2 эв) распределения по энергиям ионов H^+ , рассеян-
ных на различных θ . Установлено, что при $E_{\text{лаб}} < 10$ эв
происходит чисто вращательное возбуждение H_2 с
 $\Delta J = 2-12$ (интенсивность пиков в энергетич. спектре
рассеянных H^+ , соотв-щих $\Delta J \neq 0$ составляет $\approx 1\%$ от

X 1977 N2



$H^+ + H_2$

интенсивности пика упругого рассеяния и растет с ростом ϑ). При $E_{\text{лаб}} > 10$ эв доминирующими являются колебательные возбуждения. Обнаружены переходы на уровни с $v=1-4$. Интенсивность пиков в энергетич. спектре, определяемая вероятностями этих переходов, сравнима с интенсивностью пика упругого рассеяния, падает с увеличением v и растет с ростом ϑ . Сопоставление полученных результатов с лит. данными для системы $\text{Li}^+ - \text{H}_2$ показывает сильное различие в зависимостях от $E_{\text{лаб}}$ вероятностей колебательных и вращательных возбуждений H_2 ионами H^+ и Li^+ .

Е. Николаев

71227.2575

Ch, Ph, TC

H_2 , HD , D_2
43929 (fin)
отмечен 5908

1976

Sinha B.K. Morse Franch-Condon
factors and R-centroids for some Lyman
bands of H_2 , HD and D_2 ? "Spectrosc.
Lett.", 1976, 9, N 12, 839 -848
(англ.)

0002 пак

839 848

1 0231

ВИНИТИ

H₂

* 14838

1976

HD

J 85: 114209k Note on absorptions due to molecular hydrogen, molecular hydrogen-d₁, and molecular deuterium in argon matrixes. Smith, George R.; Warren, Jonathan A.; Guillory, William A. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, Utah). *J. Chem. Phys.* 1976, 65(4), 1591-3 (Eng). Ar-matrix spectra of H₂, HD, and D₂ were recorded and showed the following main features: (1) for H₂ the zero-phonon Q branch was obsd. at an intensity equal to or greater than that of the phonon side band at 4248 cm⁻¹ (termed Q_r by R. J. Kriegler and H. L. Welsh (1968)); (2) for D₂, the apparent Q branch was obsd. only very weakly at 2973 cm⁻¹ and the strongest feature obsd. for D₂ is in good agreement with that reported by J. De Remigis and H. L. Welsh (1970) for the Q_r absorption, and split absorption at ~3156 cm⁻¹ appears appropriate for assignment to S₀(0); and (3) for HD, 1 strong transition was obsd. at 3727 cm⁻¹ and is tentatively interpreted as the Q_r branch.

D₂

u.k. b
matrix

(+2)

C.A. 1976 85 n 16



H₂

X4 - 14838

1976

HD

D₂

5 B135. К вопросу об идентификации полос поглощения H₂, HD и D₂ в аргонных матрицах. Smith George R., Warren Jonathan A., Guillory William A. Note on absorptions due to H₂, HD and D₂ in argon matrices. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 4, 1591—1593 (англ.)

Проведено детальное изучение спектров ИК-поглощения H₂ (4296, 4248, 4246, 4137 и 4130 см⁻¹), D₂ (3237, 3161, 3152, 3108, 3063 и 2973 см⁻¹) и HD (3727 см⁻¹), изолированных в Ar-матрицах при t-ре 13 К. Предложена идентификация наблюдаемых полос и обсужден вопрос о симметрии положения молекул вблизи примеси.

О. Г. Гаркуша

(J.)

(+1) X

X. 1977 № 5

H₂

Spiridonov V. P.

1976

„Kem. Rozl. 1976, 45(1)

(спектрогр.) 1-12. (Hung)

(au H₂; I)



1976

 H_2

11 Д114. Молекулы водорода в межзвездном пространстве. Spitzer Lyman. Hydrogen molecules in interstellar space. «Quart. J. Roy. Astron. Soc.», 1976, 17, № 2, 97—120 (англ.)

межзв.
газ.

Изложены результаты программы исследования молекул H_2 в межзвездной среде по поглощению ими УФ-излучения звезд. В этой программе использовался УФ-телескоп-спектрометр, работающий в диапазоне длин волн 900—1500 Å с разрешением 0,05 Å и установленный на спутник «Коперник», который был запущен 21 августа 1972 г. Обсуждаются механизмы образования и гибели молекул H_2 , процессы заселения различных возбужденных состояний их. Приведены данные по плотностям H_2 в межзвездных облаках и эффективным т-рам, определяющим заселенности вращательных состояний.

Б. Ф. Гордиец

+ 1976 N 11

4 Д178. Вариационные расчеты нестационарным методом Хартри — Фока. III. Потенциальные кривые двух-электронных молекулярных систем. Stewart R. F., Watson D. K., Dalgarno A. Variational time-dependent Hartree — Fock calculations. III. Potential curves for two-electron molecular systems. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 6, 2104—2111 (англ.)

Расчет энергий возбуждения и сил осцилляторов переходов $X^1\Sigma_g^+ - B^1\Sigma_u^+$, $X^1\Sigma_g^+ - B'^1\Sigma_u^+$, $X^1\Sigma_g^+ - C^1\Pi_u$ и $B^1\Sigma_u^+ - E$, $F^1\Sigma_g^+$, а также параллельных и перпендикулярных компонент полярizуемости для молекулы H_2 выполнен путем решения нестационарных уравнений Хартри — Фока вариационным методом (РЖФиз, 1976, 3Д167). Межъядерное расстояние варьировалось в интервале $1 \leq R \leq 2,5$ ат. ед. Динамич. полярizуемость и анизотропия вычислены при $R = 1,4$ ат. ед. Аналогичные расчеты проведены для иона HeH^+ ($0,5 \leq R \leq 4$ ат. ед.). Результаты сопоставлены с данными, полученными более точными методами. Показано, что, несмотря на некоторое ухудшение качества расчетов с увеличением R (особенно при вычислении полярizуемости), нестационарный метод Хартри — Фока хорошо описывает молекулярные свойства в широком диапазоне межъядерных расстояний. Ч. II см. РЖФиз, 1977, 1Д148. О. С.

H_2

HeH^+

Х6551-57

расчет
ж. возбужд.
f m m

Ф. 1977
N 4

1976

(+1)

✗

HeH⁺

ХС-15594

1576

H₂

по темиз.
кривые

7 Б19. Вариационные расчеты временным методом Хартри — Фока. III. Потенциальные кривые для двух-электронных молекулярных систем. Stewart R. F., Watson D. K., Dalgarno A. Variational time-dependent Hartree — Fock calculations. III. Potential curves for two — electron molecular systems. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 6, 2104—2111 (англ.)

В рамках временного формализма метода Хартри — Фока (Сообщ. I см РЖХим, 1976, 5Б35) проведены расчеты энергии и молек. св-в двухэлектронных систем H₂ и HeH⁺ в состояниях симметрии ¹Σ⁺ и ¹Π. Результаты расчетов потенциальных кривых, сил осцилляторов для нескольких первых электронных переходов из основного состояния, компонент статич. и динамич. поляризуемостей и-анизотропии поляризуемости хорошо согласуются

Х. 1977 № 7

(71) 

с данными известных неэмпирич. расчетов. Изучено поведение вычисляемых величин в зависимости от изменения межъядерного расстояния R (от 1 до 2,5 ат. ед. для H_2 и от 0,5 до 4 ат. ед. для HeH^+). В случае HeH^+ , где метод Хартри — Фока правильно описывает диссоциац. предел, ошибки мало меняются с изменением R ; в случае же H_2 , где диссоциац. предел предсказывается плохо, результаты расчетов ухудшаются с увеличением R , что наиболее заметно для поляризуемостей.

А. В. Немухин

H₂

1976

7 Д240. Диссоциативная фотоионизация H₂ при энергии 26,9 эв. Strathdee S., Browning R. Dissociative photoionization of H₂ at 26.9 eV. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1976, 9, № 16, L505—L507 (англ.)

фото-
ионизация

С помощью времяпролетной методики измерен энергетич. спектр протонов, образуемых при диссоциативной фотоионизации молекул H₂. Использовалось излучение линии NeII из интенсивного капиллярного разряда, которое пересекало газовую струю. Фотоны проходили времяпролетную трубку; с помощью соответствующей радиоэлектронной аппаратуры выделялся и анализировался выходной сигнал и регистрировался спектр протонов. Энергетич. спектры протонов пред-

Ф. 1977. № 2

ставлены для энергии фотонов 19,8 и 26,9 эв. Показано, что при обоих значениях энергии состояние H_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$) дает протоны с энергией $E \leq 1$ эв. Протоны с большей энергией (до 4,4 эв) образуются фотонами с энергией 26,9 эв. Образование протонов с энергией 2—4,4 эв, по-видимому, обусловлено наиболее низким состоянием $^1\Sigma_u^+$ (преимущественно $2p\sigma_u$ и $2s\sigma_g$). Комбинируя настоящие результаты с известными данными о полных сечениях, оценено сечение диссоциативной фотоионизации H_2 с образованием протонов с энергией 2—4,4 эв при энергии фотонов 26,7 эв. Оно равно $0,012_{-0,004}^{+0,007}$ Мбарн.

И. Флакс

H₂

Щелочн.
метал.

ин. газ.

f_{ин}

8 Д48. Верхние и нижние границы коэффициентов двух- и трехчастичного дипольного, квадрупольного и октупольного ван-дер-ваальсова взаимодействия атомов водорода, инертных газов и щелочных металлов.

1976

Tang K. T., Norbeck J. M., Certain P. R. Upper and lower bounds of two- and three-body dipole, quadrupole, and octupole van der Waals coefficients for hydrogen, noble gas, and alkali atom interactions. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 7, 3062—3074 (англ.)

На основе анализа данных о динамич. поляризуемости вычислены суммы сил осцилляторов $S(0)$, $S(-2)$, $S(-4)$, $S(-6)$, $S(-8)$ и $S(-10)$ для основного состояния атомов водорода, щелочных металлов и инертных газов. Полученные результаты использованы для составления паде-приближений к мнимочастотным динамич. поляризуемостям различных типов (дипольной, квадрупольной и октупольной), а последние — для расчета верхних и нижних границ постоянных ван-дер-ваальсова взаимодействия C_6 , C_8 и C_{10} между различными атомами. Результаты представлены в виде обширных таблиц постоянных взаимодействия. Т. К. Ребане

Ф. 1976 № 8 (42) IX

Оценка основы, состоящий 1976

H_2

He

к в. м. х

расчет

8 Д119. Новая формула для оценки энергии основного состояния E_0 . Thomas Gerald F., Javor Frank, Rothstein Stuart M. New formula to estimate the ground state energy, E_0 . «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 4, 1574—1579 (англ.)

Введена одноэлектронная приведенная локальная плотность энергии E_L (1) для многоэлектронной системы, как отношение приведенной плотности локальной энергии к приведенной матрице плотности первого порядка. Среднее значение приведенной одноэлектронной локальной энергии равно среднему значению полной энергии: $\langle E_L \rangle = \langle H \rangle$, а средние значения квадратов этих же величин связаны неравенством: $\langle E_L^2 \rangle \leq \langle H^2 \rangle$. С помощью этого неравенства доказывается, что величина $E_W' = \langle H \rangle - \langle (E_L - \langle E_L \rangle)^2 \rangle$ удовлетворяет неравенству $E_W \leq E_W' \leq \langle H \rangle$, где $E_W = \langle H \rangle - \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle$ есть нижняя граница Вайнштейна для основного уров-

(11)

☒

Ф. 1976. № 8.

ния энергии E_0 . В общем случае величина E_w' представляет собой только некую оценку для E_0 , но не является ее строгой нижней или верхней границей. Исключением является случай самосогласованной волн. ф-ции: для нее величина E_w' представляет собой верхнюю границу E_0 (и ближе к E_0 , чем среднее значение энергии $\langle H \rangle$). В качестве примеров с различными приближенными волн. ф-циями вычислены значения E_w' для молекулы водорода, а с однопараметрич. ф-цией типа $\exp(-\xi r_1 - \xi r_2)$ — также для атома гелия. В большинстве случаев E_w' лежит ниже E_0 ; в случае самосогласованных ф-ций для молекулы водорода величина E_w' лежит ниже хартри-фоковского предела и включает в себе $\sim 50\%$ энергии корреляции, давая заведомо верхнюю границу для точной энергии E_0 . Т. К. Ребане

H₂

86511-5

 Σ_4^+ энерг.
колебательн.
уровней

9 1976 N7

7 Д110. Применение метода конечных разностей граничных значений для вычисления борн-оппенгеймеровской энергии колебательных уровней молекулы водорода в электронном состоянии $E, F^1\Sigma_g^+$ с двойным минимумом. Truhlar Donald G., Tarara William Daniel. Application of the finite-difference boundary value method to the calculation of Born—Oppenheimer vibrational eigenenergies for the double-minimum $E, F^1\Sigma_g^+$ state of the hydrogen molecule. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 1, 237—241 (англ.)

Методом конечных разностей численно решено радиальное уравнение Шрёдингера для возбужденного электронного состояния $E, F^1\Sigma_g^+$, потенц. ф-ция которого имеет двойной минимум. Вычислены энергия колебательных уровней с $v < 25$ и среднее значение R^{-2} для уровней с $v \leq 8$ при варьировании граничных значений R , соответствующих нулевым значениям колебательной волн. ф-ции. Потенц. ф-ция при больших R выбрана в виде суммы потенциалов обменных и дисперсионных сил, а при малых R — в виде комбинации R^{-1} , R^{-3} и R^{-4} . Показано, что энергия уровней заметно изменяется при расширении граничных значений R . М. Р. Алиев

1976

H₂

*U-11518

1976

kb. acc.
packet

84: 65554n. Application of the finite-difference boundary value method to the calculation of Born-Oppenheimer vibrational eigenenergies for the double-minimum $E, F^1\Sigma_g^+$ state of the hydrogen molecule. Truhlar, Donald G.; Tarara, William D. (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(1), 237-41 (Eng). The finite-difference boundary value method is applied to the calcn. of Born-Oppenheimer vibrational energies and expectation values of R^{-2} for an excited state of H₂. The accuracy attained by this method is given. A systematic error is shown in the calcns. of F. L. Tobin and J. Hinze (1975). There is a large uncertainty in the final results due to choice of interpolation scheme.

C.A. 1976. 84 N10

1976

H₂

6 Д226. Приближение внезапных возмущений бесконечно высокого порядка для описания вращательного возбуждения молекул водорода электронами с энергией (10—40) эв. Truhlar Donald G., Poling Ruth E., Brandt Maynard A. Infinite-order sudden approximation for rotational excitation of hydrogen molecules by electrons in the energy range 10—40 eV. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 2, 826—829 (англ.)

С использованием нецентрального потенциала взаимодействия, включающего статические, обменные и поляризационные эффекты, дается теоретич. описание рассеяния электронов молекулами H₂. Молекула рассматривалась в модели жесткого ротора, а рассеяние — в приближении внезапных возмущений. Показано, что для больших углов рассеяния и промежуточных энергий сечение вращательного возбуждения превышает сечение упругого рассеяния, тогда как при малых углах рассеяния и низких энергиях электронов соотношение между сечениями становится обратным. Библи. 22.

Резюме

вращат.
возбужд.
молекулы
водорода

Ф 1976 №6

H₂

1976

factor 85: 130813h Comparison of three numerical techniques for calculating eigenvalues of an unsymmetrical double minimum oscillator. Wicke, Brian G.; Harris, David O. (Chem. Dep., Univ. California, Santa Barbara, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(12), 5236-42 (Eng). Disagreement between calcd. vibrational eigenvalues for the $E, F^1\Sigma_g^+$ state of H₂ obtained by 3 different numerical techniques was interpreted in the literature in terms of inherent inadequacies of these techniques. These 3 numerical procedures were tested by using each to obtain the eigenvalues of an unsymmetrical double min. potential. An analytical potential was used to eliminate uncertainties introduced by interpolation. All 3 techniques give accurate results when properly applied.

C.A. 1976 85 ~ 18

H₂

расчет
молекулы



① теорет.
спектроскоп.

ж. 1977 № 1

1 Б10. Сравнение трех численных методов расчета собственных значений для несимметричного осциллятора с двойным минимумом. Wicke Brian G., Harris David O. Comparison of three numerical techniques

for calculating eigenvalues of an unsymmetrical double minimum oscillator. «J. Chem. Phys.», 1976: 64, № 12 5236—5242 (англ.)

Проведено сравнение трех численных методов решения радиального уравнения Шредингера: 1) итерационного метода Нумерова—Кули, 2) метода конечных разностей для граничных задач, 3) вариационного метода, использующего базисные функции гармонического осциллятора. Для устранения ошибок, связанных с интерполяцией потенциала, все три метода применены к асимм. потенциалу с двойным минимумом, представленному в виде суммы потенциала Морзе и барьера гауссовой формы. Все три метода приводят к согласующимся результатам при их корректном применении и характеризуются примерно одинаковой трудоемкостью вычислений. Отмечено, что полученные ранее для состояния $E, F^1\Sigma_g^+$ молекулы H₂ разногласия между результатами, вычисленными исследованными методами при расчете колебательных уровней, связаны либо с ошибками в экстраполяции потенциала, либо с неаккуратным применением метода.

1976

#4-17092

 H_2 D_2 HD

7 Д216. Неадиабатические поправки к вращательной энергии молекулы водорода. Wolniewicz L. Nonadiabatic corrections to the rotational energies of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 3, 537—546 (англ.)

поправки
к вращат.
энергиям

Для колебательно-вращательных уровней с $v \leq 4$, $J \leq 3$ основного электронного состояния молекул H_2 , D_2 и HD вычислены неадиабатич. поправки к вращательной энергии. Результаты с точностью до $0,01 \text{ см}^{-1}$ согласуются с эксперим. данными.

М. Р. Алнев



р. 1977. №7

H₂

X4-17092

1976

HD

D₂

Spaciam.
no cm.

86: 23703w Nonadiabatic corrections to the rotational energies of the hydrogen molecule. Wolniewicz, L. (Inst. Phys., N. Copernicus Univ., Torun, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 63(3), 537-46 (Eng). Nonadiabatic corrections to the rotational energies and rotational consts. B_v were computed by a variational perturbation method for several vibrational levels of the H₂, HD, and D₂ mols. It is believed that the convergence error in the computed corrections to the energy is $<10^{-3}$ cm⁻¹. The corrections improve the agreement of theor. and exptl. rotational quanta, but there are still discrepancies that amt. in some cases to a few hundredths of a cm⁻¹. These discrepancies are irregular and it is argued that they are at least partly due to exptl. inaccuracies.

(+2)

~~X~~

CA 1977 86 N4

43-17092

1976

1/13 Б27. Неадиабатические поправки к вращательным энергиям молекулы водорода. Wolniewicz L. Nonadiabatic corrections to the rotational energies of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 3, 537—546 (англ.)

Вариационно-пертурбационным методом рассчитаны неадиабатич. поправки к значениям вращат. энергии для колебательных уровней основного состояния Σ_g молекул H_2 , HD и D_2 с учетом взаимодействия этого состояния с ближайшим Π_g -состоянием (а также Π_u для молекулы HD). Приведены поправки ΔB_v к вращательным постоянным для всех трех молекул при $v=0-3$, а также дано сравнение теор. и эксперим. значений B_v ($v=0-4$). Для вращат. уровней энергии при $v=0-4$, $J=0-3$ вычислены разности $E_{v,J+1}-E_{v,J}$. Найдено, что эти разности отличаются от эксперим. значений в пределах нескольких тысячных cm^{-1} (ошибка возрастает по мере роста J). Эти отличия носят, однако, нерегулярный характер, что по мнению автора, хотя бы отчасти связано с неточностью эксперим. данных.

А. Дементьев

H_2

HD

D_2

расчет
вращат.
энергии
(поправки)

х. 1977. № 13

(41)

17

6122 O. 8844
Ch, Ph, TC, MGU

96201

1976

H₂

*B-15908

Yurtsever E., Shillady D.

Slater-Transform-Preuss basis sets for He
to Ne and energies for H₂, LiH and HF.

"Chem. Phys. Lett.", 1976, 43, N 1,
20-22 (англ.)

0776 пнк

734 739

ВИНИТИ

H2

1976

Сил. пов.
постоян.

12 Д139. Оптимизация поворотов базиса — метод не-
эмпирического расчета силовых постоянных молекул.

Цауне А. Я., Глушков В. Н. (Ин-т теор. физ.
АН УССР. Препринт ИТФ—76—60Р). Киев, 1976.
14 с., ил., 6 к.— На ротапринте

Развивается новый аналитич. метод неэмпирич. расче-
та силовых постоянных молекул. Вводятся внешние
управления базисом. Рассматривается вариант, связан-
ный с уменьшением размерности исходного подпро-
странства. Приводятся и обсуждаются результаты рас-
чета гармонич. силовой постоянной молекулярного иона
водорода.

Автореферат

④1 расчет

сил. пов.

ф 1976 N 12.

