

60407.7235
Ch, Ph, G ph, TC

40892

1976

O_2^+ ; O_2^{2+}

X 4-12394

Beebe Nelson H.F., Thulstrup Erik
W., Andersen Andreas.

Configuration interaction calculations
of low-lying electronic states of
 O_2 , O_2^+ , and O_2^{2+} .

(см. O_2 ; III)

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 5, 2080-2093
(англ.)

0595

571 574 5 8 8

ВИНИТИ

61203.2731

Ch, Ph, Gph, TC,
MGU

O_2^+ (H_2O) 2339 O_2^+ (CO_2) 1976

O_2^+ (CO_2) (фотоионизация) 4771

Beyer R.A., Vanderhoff J.A.

Cross section measurements for photo-
detachment or photodissociation of ions
produced in gaseous mixtures of O_2 , CO_2 ,
and H_2O .

"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 6, 2313-2321

(англ.)

0757

714 7243 2 9

ВИНИТИ

10 B120. Синглетные электронные состояния молекулы кислорода и ее первый ионизационный потенциал. Bha le G. L. Singlet electronic states of oxygen and its first ionization potential. «Singlet Mol. Oxygen. Proc. Symp., Bombay, 1975.» Delhi, 1976, 80—83 (англ.)

Измерены спектры второй отриц. системы полос O_2^+ , связанные с переходом $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$, в вакуумной УФ-области. Спектры возбуждались СВЧ-разрядом. Определены изотопные сдвиги кантов полос молекул $^{16}O_2^+$ и $(^{16}O^{18}O)^+$. Показано, что молек. постоянные в состоянии $X^2\Pi_g$ должны быть немного изменены по сравнению с имеющимися в лит-ре. Обнаружены 4 новых состояния молекулы O_2 ($^1\Pi_u$, $^1\Delta_u$, $\beta^1\Sigma_u^+$, $\alpha^1\Sigma_u^+$). Приведены энергии электронного возбуждения и вращательные постоянные для вновь обнаруженных электронных состояний O_2 и для состояния $X^2\Pi_g$ O_2^+ . Для состояний $\beta^1\Sigma_u^+$, $\alpha^1\Sigma_u^+$, $X^2\Pi_g$ приведены также значения $\Delta G_{1/2}$. Отмечается, что значения B_0 в $^1\Pi_u$ и $^1\Delta_u$ значительно отличаются от B_0 в четырех известных низколежащих состояниях O_2^+ , а в $\alpha^1\Sigma_u^+$ O_2 и указанных состояниях эти величины очень близки. Предположено, что состояние $\alpha^1\Sigma_u^+$ может быть ридберговским состоянием, относящимся к первому ионизац. пределу молекулы кислорода.

С. Б. Осин

O_2^+

O_2

u, n, j, l

(+1)



ж, 1977, N10

O_2^+

6 Д431. Исследование второй отрицательной системы полос $O_2^+(A^2\Pi_u-X^2\Pi_g)$. Bhale G. L., Narasimham N. A. Reinvestigation of the second negative ($A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$) band system of O_2^+ . «Pramana. J. Phys.», 1976, 7, № 5, 324—333 (англ.)

1976

Выполнен вращательный анализ нескольких полос 2-й отрицат. системы $O_2^+(A^2\Pi_u-X^2\Pi_g)$, сфотографированных в спектре испускания O_2^+ , возбуждаемом СВЧ-разрядом в кислороде. Полосы 1—7 и 0—8 (3492,9 и 3829,5 Å), меньше других перекрывающихся с соседними, сфотографированы в 3-м порядке (обратная дисперсия 0,55 Å/мм), полосы 5—3 и 6—3 в 4-м порядке и полосы 7—2 и 8—2 во 2-м порядке 3,4-м спектрографа Эберта. Показано, что константа спин-орбитального взаимодействия A в состоянии $A^2\Pi_u$ зависит от

колебательного квантового числа v . Константа отрицательна для уровней $v=0,1$ и 5 и положительна для $v=6, 7$ и 8. Установлено, что для состояний $A^2\Pi_u$ нельзя пренебрегать спин-вращательным взаимодействием. Для различных колебательных уровней этого электронного состояния определены константы спинового расщепления γ .

М.П.

ф. 1977
№ 6

O_2^+

1976

786: 63045q Reinvestigation of the second negative ($A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$) band system of O_2^+ . Bhale, G. L.; Narasimham, N. A. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *Pramana* 1976, 7(5), 324-33 (Eng). The rotational anal. of a few more bands of the A-X system of O_2^+ was completed. These studies show that the spin-orbit coupling const. A in the $A^2\Pi_u$ state gradually varies with the vibrational quantum no v and is pos. for $v \geq 6$. The spin-rotation interaction is not negligible in the $A^2\Pi_u$ state. The spin splitting const. γ is reported for various vibrational levels of this electronic state.

(u.n)

C.A. 1977. 86. N10

O_2^+

9 Д398. Спектры молекулярного кислорода и его твердых растворов в области перехода Шумана—Рунге.

1976

Фуголь И. Я., Гимпелевич Л. Г., Тимченко Л. И. В сб. «Соврем. пробл. спектроскопии молекуляр. кристаллов». Киев, «Наук. думка», 1976, 115—126

Изложены результаты эксперим. работ с коротковолн. разрешенным переходом молекулярного кислорода $X^3\Sigma_g^- \rightarrow B^3\Sigma_u^-$ и описаны некоторые его особенности. Межмолекулярное взаимодействие возбужденной молекулы ($B^3\Sigma_u^-$) в конденсированной фазе исследовано на примере твердых растворов кислорода в кристаллах азота и инертных газов. Метод примесной спектроскопии позволил получить параметры потенциалов взаимодействия возбужденных молекул кислорода между собой, а также с норм. молекулами кислорода, азота и атомами инертных газов. Результаты получены для всех колебательных состояний возбужденной молекулы $O_2 \cdot B^3\Sigma_u^-$. Библ. 24.

Автореферат

Спектры
возбужден-
ных состояний

ар. 1976 №9

61206.4294

Ph, Ch, TC

40892

O_2^+ (no men
pub.)

1976

45-156/10

Mochizuki T., Lachmann K. Kinematic
studies of electron transfer processes
between alkali atoms and molecules. 45-156/10

$K+O_2$. "J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 8,
3257-3265 (англ.)

0760 лжж

739 746 57 5

ВИНИТИ

1976

 O_2^+

85: 169431g High resolution threshold photofragment spectroscopy of molecular oxygen($+$)($a^4\Pi_u \rightarrow f^4\Pi_g$). Moselev, J. T.; Tadjeddine, M.; Durup, J.; Ozanne, J. B.; Pernot, C.; Tabche-Fouhaille, A. (Lab. Collisions Ioniques, Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *Phys. Rev. Lett.* 1976, 37(14), 891-5 (Eng). A new technique of laser photofragment spectroscopy is introduced and applied to a study of transitions from the $v=4$ level of the $a^4\Pi_u$ state of O_2^+ to predissoc. levels of the $f^4\Pi_g$ state near the dissocn. limit. A resoln. of 0.5 MeV is obtained, and specific (Ω, J) levels of the a state are identified. Much higher resoln. is possible.

Min.

C.S. 1976, 85. 122

70224.7725
C, T, C, MGU, Ph

$O_2 + \text{Kipamez.}$
 enerf.

1976
Xy-17112

Natalis P.

On the measurements of vibrational intensity in the photoelectron spectra of oxygen for the ionic ground state.

"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 26,
2829-2834

0816

779 782

808

ВИНИТИ

1976

 O_2^+

5 Д809 Д. Фотодиссоциация молекулярных ионов O_2^+ . Tabche-Fouhaille Abdallah. Photodissociation des ions moléculaires O_2^+ . Thèse doct. Univ. Paris-Sud, 1976. 110 p., ill. (франц.)

Диссертация, посвященная изучению процессов фотодиссоциации молекулярных ионов O_2^+ в ионном пучке под действием излучения рубинового лазера или лазера на красителях. Проведено исследование угловых и энергетич. распределений продуктов фотодиссоциации. Показано, что такие данные позволяют получить информацию о положении и заселенности колебательных уровней исходного состояния ионов в пучке, о симметрии электронных состояний ионов, о процессах преддиссоциации и т. д.

Ю. М. Л.

фото-
диссоц.

Ф.1673.15

$\cdot O_2^+$

1986

8 Б1053. Лазерная фотофрагментная спектроскопия ионов O_2^+ . Переход $\tilde{a}^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$. Tabché-Fouhailé Abdallah, Durup Jean, Moseley John T., Ozenne Jean-Bernard, Pernot Cristiane, Tadjeddine Mireille. Laser photofragment spectroscopy of O_2^+ : $\tilde{a}^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$. «Chem. Phys.», 1976, 17, № 1, 81—89 (англ.)

М.И.

Методом скрещенных пучков (лазерного и ионного) изучены спектры поступательных энергий ионов O^+ , возникающих при фотодиссоциации ионов $^{16}O_2^+$ и $^{18}O_2^+$ под действием света с энергией фотонов $E = 1,786$ эв импульсного лазера на рубине и света импульсного перестраиваемого лазера на красителе с несколькими значениями E в области 2,1 эв. На основании наблюдавшейся структуры спектра и ее угловой зависимости фотодиссоциац. переход O_2^+ идентифици-

1815-1X

5X

X. 1987. №8

рован как $\tilde{a}^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$, причем его верхнее состояние идентифицировано как конфигурация $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\pi_u^2 1\pi_g^3$. Фотодиссоциация происходит с отдельных вибронных уровней, варьирующих от $v''=4$ до $v''=20$ для $^{16}\text{O}_2^+$. Наблюдали несколько случаев, в которых в процессе фотодиссоциации использовалась энергия вращательного возбуждения. Структура в од-

ном из спектров предположительно приписана тонкой структуре осколочного атома $\text{O}(^3P_{0,1,2})$.

В. Е. Сквнрат

O_2^+

4 Д849. Лазерная фотофрагментарная спектроскопия иона O_2^+ : $\tilde{a}^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$. Tabché-Fouhaillé Abdallah, ~~Dutur~~ Jean, Moseley John T., Ozenne Jean-Bernard, Pernot Cristiane, Tadjedine Mireille. Laser photofragment spectroscopy of O_2^+ : $\tilde{a}^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$. «Chem. Phys.», 1976, 17, № 1, 81—89 (англ.)

Спектры кинетич. энергии ионов O_4^+ , образующихся при фотодиссоциации $^{16}O_2^+$ и $^{18}O_2^+$ под действием света рубинового лазера или перестраиваемого лазера на красителе, получены в эксперименте с пересекающимися пучками. Угловая зависимость и структура спектров позволили идентифицировать наблюдаемый переход как $\tilde{a}^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$, где состояние $^4\Pi_g$ принадлежит конфигурации $(1\sigma_u^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\Pi_u^2 1\Pi_g^3)$. Для иона $^{16}O_2^+$ фотодиссоциация наблюдалась в переходах с $v''=4 \div 20$. В некоторых случаях обнаружено участие в фотодиссоциации вращательной энергии молекулярного иона. Слабая, но воспроизводимая структура, обнаруженная в одном из спектров, предположительно связана с тонкой структурой фрагментарного атома $O(^3P_{0,1,2})$.
Библи. 37.

В. С. Иванов

1976

1815
66-51-54
15-79-5181

М. П.

Ф. 1977
N 4

* 8-15779

1976

85: 200394y Laser photofragment spectroscopy of molecular oxygen(+): $a^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$. Tabche-Fouhaille, Abdallah; Durup, Jean; Moseley, John T.; Ozenne, Jean B.; Pernot, Christiane; Tadjeddine, Mireille (Lab. Collisions Ioniques, Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *Chem. Phys.* 1976, 17(1), 81-9 (Eng). Translational energy spectra of O^+ ions from photodissocn. of $^{16}O_2^+$ and $^{18}O_2^+$ ions by a ruby laser and a flash-lamp pumped tunable dye laser in a crossed-beam expt. are reported. From the obsd. structure and from its angular dependence the transition is identified as a $a^4\Pi_u \rightarrow ^4\Pi_g$, where the upper state belongs to configuration $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\pi_u^2 1\pi_g^3$. The individual vibronic levels whose photodissocn. was obsd. range from $v'' = 4$ to $v'' = 20$ in $^{16}O_2^+$. Some cases were obsd. where rotational energy was energetically required for photodissocn. to occur. Finally, distinct reproducible structure obsd. in 1 spectrum is tentatively attributed to the fine structure of the $O(^3P_{0,1,2})$ fragment.

1815-17

C.A. 1976. 85 N26

60407.7255
Ch, Ph, G ph, TC,
MGU

40892

O₂⁺

1976

8-4-12395

Yoshimine Megumu, Tanaka Kiyoshi,
Tatewaki Hiroshi, Obara Sigeru,
Sasaki Fukashi, Ohno Kimio.

The second $3\Sigma_u^-$ state of O₂. (сщ. O₂; III)

"J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 5, 2254-2255
(АНГЛ.)

0585

571 574 587

ВИНИТИ

1977

 O_2^+

12 Б138. Анализ первой отрицательной системы по-
 лос $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ молекулы O_2^+ . Albritton D. L.,
 Schmeltekopf A. L., Hattori W. J., Lane R. N.,
 Czarny J. An analysis of the $O_2^+ b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ first
 negative band system. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 67,
 № 1—3, 157—184 (англ.)

Сфотографированы полосы 1—0, 2—0 и 3—1 первой
 отриц. системы $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ молекулы O_2^+ с обратной
 дисперсией 0,21 Å/мм и эффективным разрешением
 250 000. Проведен анализ вращательной структуры по-
 лученных полос, а также других полос, измеренных в
 других работах. Молек. постоянные определялись от-
 дельно для каждой полосы и затем усреднялись путем
 обработки всех имеющихся данных по методу наимень-
 ших квадратов. В результате получены «оптим.» по-
 стоянные ν_0 , B , D , γ , ϵ , A , A_D для колебательных
 уровней состояния $b^4\Sigma_g^-$ ($v' \leq 3$ и $a^4\Pi_u$ ($v'' \leq 6$)).
 Найдено, что аномалии в расщеплении линий тонкой
 структуры состояния $a^4\Pi_u$ полностью объясняются с
 помощью учета как диагональных, так и недиагональ-
 ных матричных элементов в феноменологич. спин-спино-

М. И.

388-17-3853

X, 1978, № 12

вом Гамильтониане. Расчет интенсивностей линий позволил в ряде случаев провести отнесение частично перекрытых линий вращательной структуры. Отмечено существование сильной корреляции между спин-орбитальной постоянной центробежного растяжения A_D и постоянной спин-вращательного взаимодействия γ в состоянии $a^4\Pi_u$. Определены коэф. Данэма Y_{ij} для обоих состояний. Найдены возмущения в $a^4\Pi_u$ состоянии ($v=3$). С. Б. Осип

1977

ВФ-Х1-3853

 O_2^+

5 Д177. Анализ первой отрицательной системы полос $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ иона O_2^+ . Albritton D. L., Schmeltekopf A. L., Harrop W. J., Zare R. N., Czarny J. An analysis of the $O_2^+ b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ first negative band system. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 67, № 1—3, 157—184. (англ.)

анализ
вращат.
структур

Проведен анализ вращательной структуры полос $(0, v'')$, $v'' = 0-5$, $(1,4)$, $(1,5)$, $(1,6)$, $(1,0)$, $(2,0)$, $(3,1)$ системы $b^4\Sigma^- - a^4\Pi_u$ иона O_2^+ . Для последних трех полос использовались эксперим. результаты, полученные в данной работе с погрешностью измерений частот $\pm 0,03 \text{ см}^{-1}$, для остальных полос использовались полученные ранее данные. Анализ проведен с помощью феноменологич. гамильтонианов, включающих вращательную энергию, спин-спиновое и спин-вращательное взаимодействия для состояния $b^4\Sigma^-$, а для состояния $a^4\Pi_u$ еще спин-орбитальное, Λ -удвоение и педнаго-

Ф., 1978/15

нальные члены спин-вращательного взаимодействия. Последние члены позволили объяснить аномалии, наблюдавшиеся в тонкой структуре уровней состояния $\alpha^4\text{P}_u$. Определение молекулярных постоянных проводилось путем идентификации линий отдельных полос с последующей минимизацией расхождений для частот линий всех полос. Для идентификации большого числа перекрывающихся линий использовались расчетные относит. интенсивности их. Вычислены коэф. Данхэма для обоих электронных состояний. Библ. 38.

Р. Мухтаров



B9-11-3853

1944

 O_2^+ $b^1\Sigma - a^1\Pi_4$

87: 159433m An analysis of the molecular oxygen(+) $b^1\Sigma_g^- - a^1\Pi_u$ first negative band system. Albritton, D. L.; Schmeltekopf, A. L.; Harrop, W. J.; Zare, R. N.; Czarny, J. (Aeron. Lab., NOAA Environ. Res. Lab., Boulder, Colo.). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 67(3), 157-84 (Eng). The $O_2^+ b^1\Sigma_g^- - c^4\Pi_u$ 1st neg. band system was extended to the $v = 3$ level of the upper state by photographing the (3, 1) band in high resolu. This and other newly recorded bands and the previously measured bands of this system were reduced to mol. const. using a method to merge the least-squares results of sep. band-by-band fits. First, the line positions of each were fitted sep. by, and 2nd, these band-by-band results were combined to obtain the best single values of each mol. const. of each vibrational level $v' \leq 3$ and $v'' \leq 6$. Anomalies in the fine-structure splittings of the $a^1\Pi_u$ state were accounted for fully by including the diagonal and off-diagonal elements of the phenomenol. spin-spin Hamiltonian. The information contained in blended lines was partially recovered by using calcd. line intensities to resolve ambiguities in their assignments. Particular attention was paid to the strong correlation between the centrifugal distortion spin-orbit const. A_D and the spin-rotation const. γ of the $a^1\Pi_u$ state. Dunham Y_{ij} coeffs. were obtained for both states. A previously unnoticed possible perturbation in the $v = 3$ level of the $a^1\Pi_u$ state was found.

C.A. 1944
84, N20

Q_2^+

Omni 5078
Asthana B.P.,
Rai S.B.

1977

"Indian J. Pure and Appl.
Phys.", 1977, 15, N1, 26-28.

Do

(see. BD) III

1977

 O_2^+ CO^+

88: 81412c Laser spectroscopy of gaseous free radicals and molecular ions. Carrington, Alan (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton/Hants., Engl.). *Lasers Chem., Proc. Conf.* 1977, 90-3 (Eng). Edited by West, Michael A. Elsevier: Amsterdam, Neth. Four different expts. which use fixed frequency CW lasers are described: (1) the vibration-rotation spectra of gaseous free radicals; (2) the photofragment momentum spectra of mol. ions; (3) the electronic absorption spectrum of CO^+ in an ion beam; and (4) the predissocn. spectrum of O_2^+ in an ion beam.

24. chem

① ⊠



C.A., 1978, 22, 12

1977

 O_2^+

24 В127. Спектр преддиссоциации O_2^+ в ионном пучке, возбужденный лазером. Carrington Alan, Roberts Philip G., Sarre Peter J. Laser-induced predissociation spectrum of O_2^+ in an ion beam. «Mol. Phys.», 1977, 34, № 1, 291—295 (англ.)

спектр
преддиссоц.

Наблюдены вращательные компоненты электронного перехода $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ в молекуле O_2^+ с помощью нового метода, связанного с лазерным резонансом в ионном пучке. Описаны принципиальная блок-схема и принцип работы установки. Показано, что возбужденное электронное состояние преддиссоциирует с образованием атомов O и ионов O^+ . Всего наблюдается 22 вращательные линии с разными полуширинами и интенсивностями. Найдено, что наименьшим вращательным уровнем в $b^4\Sigma_g^-$ ($v^1=4$) состоянии с энергией, достаточной для диссоциации, является уровень с $N^1=9$. Преддиссоциация в состоянии $b^4\Sigma_g^-$ обусловлена взаимодействием с состоянием $f^4\Pi_g$. Предложена схема расположения исследуемых электронных состояний.

С. Б. Осин

ж. 1977
№ 24

O_2^+

1977

1 Д352. Спектр индуцированной лазером преддиссоциации O_2^+ в ионном пучке. Carrington Alan, Roberts Philip G., Sarre Peter J. Laser-induced predissociation spectrum of O_2^+ in an ion beam. «Mol. Phys.», 1977, 34, № 1, 291—295 (англ.)

С помощью аппаратуры, использующей коллинеарные лазерный ($\lambda=4965 \text{ \AA}$) и ионный пучки, доплеровский сдвиг полосы при изменении скорости ионов пучка и масс-спектрометрич. регистрацию заряженных продуктов фотодиссоциации, наблюдались вращательные компоненты электронного перехода $b_4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ иона O_2^+ . (Состояние $b^4\Sigma_g^-$ преддиссоциирует с образованием O^+ , которые и регистрируются в анализаторе). Кроме вращательных линий, наблюдался континуум, обусловленный прямыми фотодиссоциационными переходами на отталкивательную часть потенц. кривой со-

спектр
искусств.

ф. 1978 № 1

стояния $f^4\Pi_g$. Положения 22 наблюдавшихся вращательных линий с точностью $\pm 0,1$ см $^{-1}$ согласуются с рассчитанными по результатам исследования системы $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ в спектре испускания иона O_2^+ . Ширины линий, обусловленные преддиссоциационными временами жизни вращательных уровней состояния $b^4\Sigma_g^-$, меняются от 140 до 1200 мГц, осциллируя с увеличением квантового числа N' .

В. С. Иванов

O_2^+

1974

88: 13806j Laser-induced predissociation spectrum of oxygen cation (O_2^+) in an ion beam. Carrington, Alan; Roberts, Philip G.; Sarre, Peter J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *Mol. Phys.* 1977, 34(1), 291-5 (Eng). Rotational components of the $b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$ electronic transition in O_2^+ were detected using a new ion beam-laser beam resonance technique. The lines arise through predissocn. of individual rotational levels of the excited state, but there is also an underlying continuum of O^+ due to direct photodissocn. The line widths, typically 140-1200 MHz, are detd. by the predissocn. lifetimes of the excited levels. The lifetimes (ns) are considerably shorter than the expected fluorescence lifetimes (~ 1 ms).

Dr. Carrington

C.A., 1978, P.I. NR

1947

 O_2^+

88: 81413d Sub-Doppler electronic absorption spectra of molecular ions in an ion beam. Carrington, A.; Sarre, P. J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton/Hants., Engl.). *Lasers Chem., Proc. Conf.* 1977, 94-6 (Eng). Edited by West, Michael A. Elsevier: Amsterdam, Neth. A predissocn. spectrum of O_2^+ was obtained. A fast beam of O_2^+ was irradiated with an axially coincident Ar ion laser. Rotational lines in the $b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\pi_u$ transition were Doppler-shifted into resonance by velocity tuning, and O fragment ions were detected. The linewidths were detd. by the predissocn. lifetimes.

2, see mpou.
Chemistry notes.



C.A., 1948, 28, N12

1977

 O_2^+ спектр
преддиссоц.

1 Д320. Электронные спектры поглощения молекулярных ионов в ионном пучке при малых доплеровских ширинах линий. Carrington A., Sarge P. J. Sub-doppler electronic absorption spectra of molecular ions in an ion beam. «Lasers Chem. Proc. Conf., London, 1977». Amsterdam e. a., 1977, 94—96 (англ.)

С помощью тандема масс-спектрометров и Ag^+ -лазера ($\lambda = 4965 \text{ \AA}$) исследован спектр преддиссоциации иона O_2^+ . Вращательные линии перехода $b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$ смещались по частоте, за счет доплеровского сдвига при изменении скорости ионов пучка, до совпадения с частотой лазерного излучения. Кинематич. сжатие распределения ионов по скоростям позволило уменьшить доплеровскую ширину линий до $< 100 \text{ Мгц}$. Наблюдаемые ширины вращательных линий, обусловленные преддиссоциацией, лежат в пределах $140—1200 \text{ Мгц}$.

Ф. 1979, N 1

Оттиск 5289

1974

 O_2^+ N_2^+

23 Б164. Повторное определение некоторых постоянных молекул O_2^+ и N_2^+ . Colbourn E. A., Douglas A. E. A remeasurement of some constants of the O_2^+ and N_2^+ molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 2, 332—333 (англ.)

Повторно исследована вращательная структура полос 0—7, 1—6, 12—1, 13—0, 13—1, 14—0, 15—0 системы $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ молекулы O_2^+ и ряда полос систем $A^2\Pi-X^2\Sigma$ и $B^2\Sigma-X^2\Sigma$ молекулы N_2^+ . Определены постоянные спинowego расщепления, Λ -удвоения и вращательные постоянные. Для молекулы $O_2^+v_0=27644,89$ (0—7), 30193,38 (1—6), 46862,80 (12—1), 47410,00 (13—0), 49283,24 (13—1), 49803,85 (14—0), 50297,70 (15—0): $A'=-3,55$ ($v'=0$), $-3,174$ ($v'=1$), $6,79$ ($v'=13$), $8,5$ ($v'=14$), $10,0$ ($v'=15$); $B'=1,05195$ ($v'=0$), $1,0322$ ($v'=1$), $0,7960$ ($v'=12$), $0,7762$ ($v'=13$), $0,7540$ ($v'=14$), $0,7298$ ($v'=15$); $p'=-0,025$ ($v'=0,1$), $-0,013$ ($v'=13$), $0,01$ ($v'=14$); $A''=200,33$ ($v''=0$), $199,68$ ($v''=1$), $196,146$

(и, и)

①

X. 1974 №23

$(v''=6), 195,335$ $(v''=7); B''=1,6800$ $(v''=0), 1,6606$
 $(v'=1), 1,56291$ $(v'=6), 1,54306$ $(v''=7); p''=0,0171,$
 $q''=0,00024; \gamma = -1,4 \times 10^{-3}$ $(v'=0,1), \gamma=0$ $(v'=12-15).$
 Значения $T_0 + G(v), B$ и D молекулы N_2^+ равны соотв.
 $(\text{см}^{-1}): X^2\Sigma$ $(v''=0) - 0, 1,92235, 6,10 \times 10^{-6}, v'' =$
 $= 1 - 2174,728. 1,90354, 6,38 \times 10^{-6};$ состояние $A^2\Pi, v' =$
 $= 2 - 12732,854, 1,69730, 6,03 \times 10^{-6}; v' = 3 - 1456,181,$
 $1,67847, 6,21 \times 10^{-6};$ состояние $B^2\Sigma, v' = 0 - 25566,039,$
 $2,07456, 6,17 \times 10^{-6}.$ Для $A^2\Pi$ $(v'=2,3)$ получены также
 значения A $(-74,608$ и $-74,631), p$ $(4,84 \times 10^{-3}), q$
 $(-6,0 \times 10^{-4})$ и A_D $(-1,5 \times 10^{-4}). \gamma$ $(X^0\Sigma, v''=0,1) =$
 $= 0,0083, \gamma$ $(B^2\Sigma, v'=0) = 0,0229. v_{0-0} (B-X)^1 N_2^+ =$
 $= 25562,69 \text{ см}^{-1}.$

В. М. Ковба

O_2^+

N_2^+

аттис 5289 1977

11 Д497. Новые измерения некоторых констант для молекул O_2^+ и N_2^+ . Colbourn E. A., Douglas A. E. A remeasurement of some constants of the O_2^+ and N_2^+ molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 2, 332—333 (англ.)

С помощью 10-м спектрографа сфотографированы некоторые полосы систем $A-X$ и $B-X$ молекулы N_2^+ и системы $A-X$ молекулы O_2^+ . Определены спектроскопич. постоянные основных и возбужденных состояний на-

М.Н.

(+1) ☒

Ф. - 1977 № 11

званных ионов. Для O_2^+ значения констант, за исключением констант Λ -удвоения p и q , согласуются с менее точными данными, полученными ранее. Результаты свидетельствуют о том, что, в отличие от ранее сделанного заключения, заметное удвоение существует и в состоянии $O_2^+(A)$. Для удовлетворительного описания целого ряда уровней состояний A и X молекулы O_2^+ необходимы дополнительные исследования. Для иона N_2^+ определено значение константы спинowego расщепления в основном состоянии и уточнены значения молекулярных постоянных состояния $A^2\Pi$.

O_2^+

1977

Durko T., et al.

"J. Chem Phys.," 1977, 67,
N4, 1792 - 1793 (ans.)

$Y; M.N;$
 ϵ_i

Cell. O_2 - $\overline{u}$

O_2^+

1977

15 Б119. Фотодиссоциационная спектроскопия некоторых двухатомных молекул и ионов. Dugur Jean. Photofragment spectroscopy of some diatomic species. «Etats atom. et mol. couples contin. atom. et mol. hautement excités. Colloq., Aussoi, 1977». Paris, 1977, 107—118 (англ.)

фото-
диссоциация

Обсуждены некоторые аспекты лазерной фотодиссоциационной спектроскопии двухатомных молекул и ионов. Особое внимание уделено теор. обоснованию метода и эксперим. результатам, полученным с использованием ионных пучков. На примере O_2^+ продемонстрировано высокое разрешение методов пороговой фотодиссоциационной спектроскопии и фотопрдиссоц. спектроскопии.

По резюме

Л. 1979, N 15

O_2^+

7 Д1023. Времена жизни возбужденных уровней некоторых важных молекулярных ионов. Ч. II. O_2^+ . E r-
man Peter, Larsson Mats. Lifetimes of excited
levels in some important ion-molecules. Part II. O_2^+ .
«Phys. scr.», 1977, 15, № 5—6, 335—338 (англ.)

Спектры и времена жизни излучающих уровней в си-
стемах $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ и $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ иона O_2^+ измерены
с использованием методики ВЧ-отклонения электронно-
го пучка. Измеренные значения времен жизни на 30—
50% превосходят полученные ранее. Показано, что по-
следние занижены вследствие эффектов кулоновского
отталкивания. С использованием известных коэф. Фран-
ка—Кондона и g -центroids определены зависимости
электронных моментов перехода от межъядерного рас-
стояния. Для вероятности преддиссоциации состояния
 $b^4\Sigma_g^-$ получена оценка сверху 10^5 сек^{-1} . Библ. 20. Ч. I,
Brzozowski J. et al., «Physica Scripta», 1974, 10, 241.

В. С. Иванов

спектры
и времена
жизни

Ф, 1978, № 4

1977

 O_2^+

C. A. 1978

88: 43430z Lifetimes of excited levels in some important ion-molecules. Part II: Molecular oxygen($1+$) ion. Erman, Peter; Larsson, Mats (Res. Inst. Phys., Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 1977, 15(5-6), 335-8 (Eng). The spectra and lifetimes of the $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ and $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$ systems in the O_2^+ mol. were studied at high resolu. using the High-Frequency Deflection technique. The measured lifetimes are 30-50% longer than earlier results which are shown to be distorted by Coulomb repulsion effects. The variations of the transition moments are established for both the systems using recently calcd. q and r values and an upper limit of 10^{-5} s⁻¹ was found for predissocns. of the b state.

C. A. 1978, 22, N 6

O_2^+

ommuch 5778

1977

Huntress W.E., Jr.

Astrophys. J. Suppl. Ser.,

1977. 22.(4), 495-514.

(AH^+, I)

$(\text{see } H^+, \text{ III})$

O_2^+

chem

1977
S9: 171268k $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ and $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$
emission by photoionization of molecular oxygen. Judge, D.
L.; Phillips, E.; Lee, L. C. (Dep. Phys., Univ. South.
California, Los Angeles, Calif.). *Ext. Abstr. - Int. Conf. Vac.
Ultraviolet Radiat. Phys.*, 5th 1977, 1, 272-4 (Eng). Edited
by Castex, M. C.; Pouey, M.; Pouey, N. CNRS: Meudon, Fr.
The partial cross sections for prodn. of the title bands were
measured with a synchrotron radiation source. The partial cross
section for the Σ - Π system shows structure similar to the total
absorption cross section at 500-680 Å. The partial cross section
for Π - Π emission shows only weak structure different from the
absorption spectra. The mechanism for the excitation processes
is discussed. The emission spectra of the excited vibrational
levels of $O_2^+(a^4\Pi_u)$ at 4900-6000 Å are relatively simple.

C.A., 1978, 89, N20

O_2^+

образов.
маленьк.
ионов

Kadoya Kiyoshi et al 1977
"J. Phys Soc Jap"
1977, 42, N1, 250-254/англ;
(англ N_2^+ ; iii)

1977

 O_2^+

7 Д454. Сравнение экспериментальных и теоретических относительных интенсивностей вращательных линий полосы $O_2^+(b^4\Sigma_g^-, v=0 - a^4\Pi_u, v=0)$. Lambert A. M., Gouge J. P., Albritton D. L. Comparison of experimental and theoretical relative intensities of the rotational lines of the (0-0) $O_2^+b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ band. «Can. J. Phys.», 1977, 55, № 21, 1842—1847 (англ.; рез. франц.)

спектр
и спектры
интенсивн.
полос

Спектр испускания иона O_2^+ получен с эффективным разрешением 100 000 с использованием фотоэлектрической регистрации. Определены относит. интенсивности вращательных линий полосы (0,0) системы $O_2^+(b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u)$. Интенсивности тех же линий рассчитаны с использованием для состояний $^4\Sigma$ и $^4\Pi$ гамильтонианов, содержащих экспериментальные молекулярные постоянные. Для пар неперекрывающихся вращательных ветвей, связанных с общим уровнем верхнего состояния, теоретические и эксперим. значения относит. интенсивностей полос совпадают в пределах ошибки измерений (5%).

В. С. Иванов

ф. 1978, № 7

1977

 O_2^+

7 Д441. Обнаружение колебательно-возбужденных молекул O_2 с помощью фотоэлектронной спектроскопии. Dechant P., Schweig A., Thon N. Detection of vibrationally excited O_2 by variable temperature photoelectron spectroscopy. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1977, 12, № 4, 443—449 (англ.)

Обнаружены «горячие» полосы в HeI-фотоэлектронном спектре O_2 , нагретого до т-ры $295 \div 512^\circ C$. Показано, что интенсивность «горячей» полосы соответствует больцмановскому распределению. Проведен анализ интенсивности фотоэлектронной полосы O_2^+ ($^2\Pi_g$) при фотонионизации колебательно-возбужденных молекул O_2 . Библиограф. *Final*

Ю. В. Чижов

анализ
фотоэлектронных
полос

ф. 1978, № 7

1974

 O_2^+

unmeasured
 energies

88: 43379q Comparison of experimental and theoretical relative intensities of the rotational lines of the (0-0) molecular oxygen(+) $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ band. Lambert, A. M.; Goure, J. P.; Albritton, D. L. (Lab. Trait. Signal Instrum., Univ. Saint-Etienne, Saint Etienne, Fr.). *Can. J. Phys.* 1977, 55(21), 1842-7 (Eng). The wavelengths and relative intensities of the rotational lines of the (0-0) band of the $O_2^+ b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ first neg. system were recorded photoelec. with a high-resoln. grating spectrometer. The wavelengths compare within 0.02 Å to those established by earlier high-resoln. photog. measurements. The relative intensities are compared line-by-line to rotational line strengths computed with $^4\Sigma$ and $^4\Pi$ Hamiltonians contg. exptl. obtained mol. consts. For pairs of non-superimposed branches that originate from the same upper levels, the measured and calcd. ratios typically agree within 5%, which is well within the exptl. uncertainties.

C. A., 1978, SP N°6

O_2^+

ommuca 5324

1977

Murthy N. S., et al.

Kor. Gauss. J. Phys. B: Atom
and Mol. Phys.,
1977, 10, N3, 491-4.

Оттиски 5501 1977

1 Д337. Колебательные уровни и энергия диссоциации иона $O_2^+(X^2\Pi_g)$. Samson James A. R., Gardner J. L. The vibrational energy levels and dissociation energy of $O_2^+(X^2\Pi_g)$. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 2, 755—758 (англ.)

Фотоэлектронный спектр (Ne I, $\lambda=736$ Å) молекулярного кислорода получен с разрешением 0,015 эв. Энергия квантов ионизирующего излучения совпадает с энергией перехода в неидентифицированное автоионизационное состояние молекулы O_2 . Как результат автоионизации наблюдается чрезвычайно высокое колебательное возбуждение ($v=0\div 25$) иона $O_2^+(X^2\Pi_g)$. С точностью, близкой к точности оптич. спектроскопии высокого разрешения, определены абс. энергии высоких колебательных уровней состояния $O_2^+(X^2\Pi_g)$. С помощью процедуры линейной экстраполяции оценена энергия диссоциации этого иона $D_0=(6,67\pm 0,18)$ эв. Показано, что энергии 56 колебательных уровней состояния $O_2^+(X^2\Pi)$ хорошо описываются выражением $G(v)=\omega_e(v+1/2)-\omega_e x_e(v+1/2)^2$.

В. С. Иванов

O_2^+

у, $\sqrt{e}$ ч.т.

ф. 1978
N1

оттиски 5501

1974

23 Б140. Уровни колебательной энергии и энергия диссоциации $O_2^+(X^2\Pi_g)$. Samson James A. R., Gardner J. L. The vibrational energy levels and dissociation energy of $O_2^+(X^2\Pi_g)$. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 2, 755—758 (англ.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии определены уровни колебательной энергии молекулы O_2^+ в состояниях $X^2\Pi_g$ ($v=0-25$) и $a^4\Pi_u$ ($v=0-6$). Спектр возбуждался Ne-I (736 и 744 А). Значения ω_e , $\omega_e x_e$ и D_0 (линейная экстраполяция) $O_2^+(X^2\Pi_g)$ равны $1910 \pm \pm 25$ см⁻¹, $16,67 \pm 0,3$ см⁻¹ и $6,67 \pm 0,18$ эв. Величина D_0 (лин. экстр., $v_{\text{макс}}=56$) в пределах ошибки эксперимента согласуется со значением полученным методом циклов — $D_0(O_2^+ \ ^2\Pi_g) = D_0(O_2^3\Sigma_g) + I(O^3P) - I(O_2^3\Sigma_g) = 6,661 \pm 0,001$ эв (I — потенциал ионизации). Ионизационные потенциалы переходов $O_2(x^3\Sigma_g v=0) \rightarrow O_2^+(X^2\Pi_{1/2} v=0, a^4\Pi_u v=0)$ равны соотв. 12,071 и 16,100 эв. В. М. Ковба

($M, n; y$)

Ж. 1974
№ 23

O_2^+

ammule 5501

1974

($\dot{D}_0$)

87: 93213f The vibrational energy levels and dissociation energy of molecular oxygen(+) ($X^2\Pi_g$). Samson, James A. R.; Gardner, J. L. (Behlen Lab. Phys., Lincoln, Nebr.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(2), 755-8 (Eng). The abs. vibrational energy levels of the $X^2\Pi_g$ state of O_2^+ are detd. by the method of photoelectron spectroscopy in the range $v = 0$ to 25. The precision of the method is comparable to that of conventional high resolu. optical spectroscopy. The dissocn. energy obtained by a linear extrapolation of the vibrational seps. is found to be $D_0 = 6.67 \pm 0.18$ eV.

C.A. 1974. 87 v12

O_2^+

1977

Summers N. L., et al.

"J. Amer. Chem. Soc.,"
1974, 99, N12, 3960-65
(amr)

кб. мех.
раскр

(corr. CF⁺; III)

1977

70503.8739

Ch, Ph, Gph, TC, MEU

O₂⁺

40392

группа 1-
ксерокопия

45-18229

Weiss Morris J., Berkowitz J., Appel-
man E.H.

Photoionization of ozone: formation of O₄⁺
and O₅⁺.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 5, 2049-2053

(англ.)

0869 лнк

834 842 00

ВИНИТИ

1978

 O_2^+

(90)

1 Д319. Энергия диссоциации молекулы $O_2X^3\Sigma_g^-$.
 Albritton D. L., Moseley J. T., Cosby P. C.,
 Tadjeddine M. The Dissociation Energy of $O_2(X^3\Sigma_g^-)$.
 «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 2, 326—329 (англ.)

Измерено распределение по кинетич. энергиям фотоосколков $O^+(^4S_{3/2}^0)$, образующихся в результате преддиссоциации молекулярных ионов O_2^+ в состоянии $b^4\Sigma_g^-$ ($v=4, j=9$). Возбуждение ионов $O_2^+(b^4\Sigma_g^-, v=4)$ на высоколежащие вращательные уровни осуществлялось лазером на красителе. Показано, что энергия диссоциации молекулы O_2 в основном состоянии $X^3\Sigma_g^-$ может быть рассчитана при рассмотрении спектроскопич. цикла, включающего полученное энер-

гетич. распределение и другие спектроскопич. постоянные, измеренные ранее с высокой точностью. Найденная из цикла величина энергии диссоциации $41\,262 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ хорошо согласуется с общепринятым значением $41\,260 \pm 15 \text{ см}^{-1}$, что свидетельствует о применимости предложенного метода. Библ. 14.

фр. 1049, N1

CMR 10462

1978

89: 120002m Rotational analysis of the 0-9, 0-10 and 0-11 bands of the $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ band system of $(^{16}\text{O}^{18}\text{O})^+$. Bhale, G. L.; Narasimham, N. A. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *Pramana* 1978, 10(5), 519-26 (Eng). High-resoln. spectra of the 0-9, 0-10 and 0-11 bands of the $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ system of $(^{16}\text{O}^{18}\text{O})^+$ ion were studied for their rotational structure. This study enables a direct detn. of the Λ -doubling parameters of the $A^2\Pi_u$ and $X^2\Pi_g$ states. The model of pure precession explains, though not entirely, the Λ -doubling of the $X^2\Pi_g$ state as arising out of its interaction with the $B^2\Sigma_g^-$ state. The Λ -doubling in the $A^2\Pi_u$ state was insignificant.

C.T., 1948, 89, N/14

Оттиски 10462

1978

22 Б150. Анализ вращательной структуры полос 0—9, 0—10 и 0—11 системы $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ ($^{16}O^{18}O$)⁺. B h a l e G. L., N a r a s i m h a m N. A. Rotational analysis of the 0—9, 0—10 and 0—11 bands of the $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ band system of ($^{16}O^{18}O$)⁺. «Pramana, J. Phys.», 1978, 10, № 5, 519—526 (англ.)

С высоким разрешением сфотографирована вторая отриц. система полос в спектре испускания O_2^+ (МВ-безэлектродный разряд, $p_{O_2}=0,1$ мм, 65% ^{18}O), связанная с переходом $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$. Анализ вращательной структуры проведен для полос 0—9, 0—10 и 0—11 ($^{16}O^{18}O$)⁺, к-рые, из-за значит. изотопного сдвига, меньше перекрываются с полосами др. изотопозамещенных молекул — $^{16}O_2^+$ и $^{18}O_2^+$. Получены след. значения молек. постоянных B_v , D_v и A_v ($^{16}O^{18}O$)⁺ (в cm^{-1}): состояние $A^2\Pi_u$; $V'=0-0,9940$, $5,6 \times 10^{-6}$, $-3,5$, состояние $X^2\Pi_g$; $V''=9-1,4257$, $5,8 \times 10^{-6}$, $193,9$; $V''=10-1,4067$, $5,5 \times 10^{-6}$, $193,0$; $V''=11-1,3880$, $5,4 \times 10^{-6}$, $191,9$. Постоянные Λ -удвоения ($^{16}O^{18}O$)⁺ в состоянии $X^2\Pi_g$ — $P=0,031$, $q=0,0024$ cm^{-1} . Λ -удвоение в состоянии $A^2\Pi_u$ незначительно. В. М. Ковба

B99-X-5844

Li. 17.

X. 1978, N 22

Докл. 10462

1949

O_2^+

М. П. 4995-IX-5664

1 Д323. Анализ вращательной структуры полос 0—9, 0—10 и 0—11 системы $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ иона $(^{16}O^{18}O)^+$. Bhale G. L., Narasimham N. A. Rotational analysis of the 0—9, 0—10 and 0—11 bands of the $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$ band system of $(^{16}O^{18}O)^+$. «Pramana. J. Phys.», 1978, 10, № 5, 519—526 (англ.)

С высоким разрешением получены спектры испускания иона $(^{16}O^{18}O)^+$ в области 4010—4580 Å. Спектры возбуждались СВЧ-полем в кислороде, давление которого составляло 0,1 мм рт. ст. Проведен анализ вращательной структуры полос 0—9, 0—10 и 0—11 системы переходов $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$. Определены параметры λ -удвоения состояний $A^2\Pi_u-X^2\Pi_g$. Сравнение теоретич. расчетов, выполненных в рамках модели «чистой прецессии», с эксперим. результатами свидетельствует о смешивании состояний $X^2\Pi_g$ и $B^2\Sigma_g^-$, в то время как λ -удвоение состояния $A^2\Pi_u$ относительно мало. Высказано предположение, что состояние $B^2\Sigma_g^-$ является не единственным, влияющим на параметры λ -удвоения состояния $X^2\Pi_g$.

Ф. 1949, N 1

6481 1978

90: 14186k Laser-induced predissociation of dioxygenyl ion ($b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$) in an ion beam. Carrington, Alan; Roberts, Philip G.; Sarre, Peter J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *Mol. Phys.* 1978, 35(6), 1523-35 (Eng). The 4-1 band of the $b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$ transition of O_2^+ was studied by high resolu. electron absorption spectroscopy. Rotational lines of varying width were obtained. The excited predissociating state was unambiguously assigned and refined values for both ground and excited state mol. consts. were derived. Anal. of the linewidth suggests that predissocn. of the $b^4\Sigma_g^-$ state probably occurs through coupling with a $^4\Sigma_g^+$ state.

M.M.

BP-X1-6773

C.A., 1978, 90, N2

O_2^+

оттиск 6481

1978

1 Б1352. Индуцированная лазером преддиссоциация O_2^+ ($b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$) в ионном пучке. Carrington Alan, Roberts Philip G., Sarre Peter J. Laser-induced predissociation of O_2^+ ($b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$) in an ion beam. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 6, 1523—1535 (англ.)

преддиссо-
циация

Предложен чувствительный метод исследования электронных спектров поглощения молек. ионов, испытывающих преддиссоциацию в возбужденном состоянии.

ВФ-Х1-6113



2.1979. N1

В этом методе пучок ионов определенной массы пропускают в вакуум через дрейфовую трубу. Ионы облучают коаксиальным лазерным лучом (лазер на ионах Ag^+ ; излучение 496 нм), под действием которого происходит преддиссоциация возбужденных ионов. Ионные продукты преддиссоциации выделяют магнитным анализатором и регистрируют соответствующий ионный ток. Изменяя скорость ионов в дрейфовой трубе, можно было на основании эффекта Доплера настраивать различные вращательные линии в системе полос электронного перехода иона в резонанс с лазерной линией 496 нм. Для ионов O_2^+ в возбужденном состоянии $a^4\Pi_u$ такую настройку можно было осуществлять в интервале от ± 5 до $\pm 10 \text{ см}^{-1}$. В опытах проводили исследования с ионами O_2^+ для полосы 4—1 электронного перехода $b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$. Спектральная ширина лазерного излучения составляла 50 МГц, а ширины вращательных линий O_2^+ менялись от 345 до 1364 МГц, причем вклад в ширины от остаточного распределения ионов по скоростям был равен 100 МГц. Наблюдавшееся уширение линий связано с конечным временем жизни соответствующих возбужденных вращательных состояний, участвующих в преддиссоциации O_2^+ из состояния $b^4\Sigma_g^- (v'=1)$. Анализ ширины линий показывает, что преддиссоциация происходит вследствие взаимодействия состояний $b^4\Sigma_g^- (v'=4)$ и $a^4\Sigma_g^+$. Менее вероятно участие состояния $f^4\Pi_g$. Участие состояний $X^2\Pi_g$ (основное состояние) и $^2\Sigma_g^+$, $^6\Sigma_g^+$ и $^6\Pi_g$ исключается, т. к. они либо не пересекаются с состоянием $b^4\Sigma_g^-$, либо пересекаются с ним при намного более высоких колебательных уровнях, чем уровень $v'=4$.

В. Е. Скурат

O_2^+

оттисек 6481

1978

1 Д321. Индуцированная лазером преддиссоциация $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u)$ в ионном пучке. Carrington Alan, Roberts Philip G., Sarre Peter J. Laser-induced predissociation of $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u)$ in an ion beam. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 6, 1523—1535 (англ.)

преддиссоц.

С помощью тандема масс-спектрометров и Ar^+ -лазера, с использованием доплеровского сканирования спектра, исследована вращательная структура полосы 4—1 перехода $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$. Выполнено однозначное отнесение вращательных линий. Уточнены значения молекулярных постоянных для верхнего и нижнего состояний. Вращательные линии имеют разные полуширины. Их анализ позволил высказать предположение о том, что состояние $b^4\Sigma_g^-$ преддиссоциирует за счет взаимодействия с состоянием $a^4\Sigma_g^+$. Подробно описаны аппаратные особенности эксперимента. Библ. 30.

ВФ-Х1-6113

Ф. 1949, № 1

O_2^+

Оттиск 6161

1948

21 B80. Наблюдение диссоциативных состояний O_2^+ методом пороговых фотоэлектрон-фотоионных совпадений. Guyon P. M., Baer T., Ferreira L. F. A., Nenner I., Tabché-Fouhaile A.,

Rotter R., Govers T. R. Observation of dissociative states of O_2^+ by threshold photoelectron-photoion coincidence. «J. Phys.», 1978, B11, № 5, L141—L144 (англ.)

С помощью монохроматизированного синхронного источника излучения методом пороговых фотоэлектрон-фотоионных совпадений с время-пролетной селекцией пороговых электронов исследована преддиссоциация молекул O_2^+ в состояниях $b^4\Sigma_g^-$ и $C^4\Sigma_u^-$ и диссоциация O_2^+ в области более высоких энергий. В пороговом фотоэлектронном спектре (ПФЭС) в интервале 18—19 эв (69—65 нм) наблюдалась прогрессия полос $V=0-6$ O_2^+ ($b^4\Sigma_g^-$). Порог диссоциации $O_2^+ \rightarrow O(^4S) + O(^3P)$ оценен в 18,73 эв, ($V'=4$), что подтверждается анализом время-пролетных ионных совпадений — для полосы с $V'=3$ в спектре

(Do)
порог
диссоц.

ж. 1948, № 21

обнаружены только ионы O_2^+ , а для полос с $V'=4, 5, 6$
 не только ионы O_2^+ , но и ионы O^+ (отношение
 O^+/O_2^+ соотв. 0,4, 0,9 и $0,8 \pm 0,1$). Для преддиссоцииро-
 ванных уровней оценено время жизни $\tau \leq 50$ нсек.
 Предиссоциация O_2^+ в состоянии $C^4\Sigma_4^-$ ($V''=5$), на
 $O^+(^4S) + O(^1D)$ происходит при 20,70 эв. Верхний пре-
 дел жизни этого уровня 200 нсек. В ПФЭС в интерва-
 ле 23—24,5 эв наблюдались два континуума с диссоц.
 пределами 23,75 эв — $O^+(^2P) + O(^3P)$ и 22,06 эв
 $O^+(^2D) + O(^3P)$.

В. М. Ковба

ГИИ
 арял

O_2^+

10 Д107. Исследование диссоциативных состояний O_2^+ методом совпадения пороговых фотоэлектронов с фотоионами. Guyon P. M., Baer T., Ferreira L. F. A., Nenner I., Tabche-Fouhaile A., Botter R., Govers T. R. Observation of dissociative states of O_2^+ by threshold photoelectron-photoion coincidence. «J. Phys.», 1978, B11, № 5, L141—L144 (англ.)

Метод совпадения пороговых электронов с фотоионами использован для исследования преддиссоциативных $b^4\Sigma_g^-$ - и $c^4\Sigma_u^-$ -состояний O_2^+ и процессов диссоциации в области энергий 23—24,5 эв. Источником возбуждения ионов O_2^+ служило монохроматизированное синхротронное излучение. Идентификация осколочных ионов и определение их кинетич. энергии производились времяпролетным методом. Из спектра пороговых фотоэлектронов $b^4\Sigma_g^-$ -состояния O_2^+ , представленного для области длин волн 69—65 нм (18—19 эв), следует, что порог диссоциации O_2^+ на $O^+(^4S) + O(^3P)$ соответствует $v'-4$ — колебательной полосе и энергии 18,73 эв. В случае $c^4\Sigma_u^-$ -состояния O_2^+ имеет место преддиссоциация в $O^+(^4S) + O(^1D)$ при энергии 20,70 эв. В области энергии 23—24,5 эв существенной структуры в спектре не наблюдалось. В этом случае при энергиях 23,75 эв и 22,06 эв получены пределы диссоциации на $O^+(2P) + O(^3P)$ и $O^+(2D) + O(^3P)$ соответственно. Библ. 8.

диссоциат.
состояние
преддиссоц.

ср. 1978, 110

1978
6161
отмечен

O_2^+

ammex 6161

1978

89: 97311a Observation of dissociative states of oxygen molecular cation by threshold photoelectron-photoion coincidence. Guyon, P. M.; Baer, T.; Ferreira, L. F. A.; Nenner, I.; Tabche-Fouhaile, A.; Botter, R.; Govers, T. R. (Lab. Collisions At. Mol., Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). J. Phys. B 1978, 11(5), L141-L144 (Eng). The photoelectron-photoion spectra of energy-selected states of O_2^+ were detd. using monochromatic synchrotron radiation. Photodissocn. was obsd. in the b $^4\Sigma_g^-$ and c $^4\Sigma_g^-$ states and in the continua at 23-24.5 eV.

b $^4\Sigma_g^-$ - c $^4\Sigma_g^-$

C.A. 1978, 89, NR

O_2^+

Оттиски 6479

1948

кривые
потенц.
энергии

1) 1 Д308. Расчеты энергетической структуры иона O_2^+ с учетом конфигурационного взаимодействия и исследование фотоэлектронного спектра O_2 . Nonjoi Nobumitsu, Tanaka Kiyoshi, Ohno Kimio, Taketa Hiroshi. Configuration interaction calculation of the O_2^+ ion and study of the photoelectron spectra of O_2 . «Mol. Phys.», 1978, 35, № 6, 1569—1578 (англ.)

Методом *ab initio*, с учетом конфигурационного взаимодействия, рассчитаны кривые потенц. энергии иона O_2^+ в состояниях: $X^2\Pi_g$, $A^4\Pi_u$, $A^2\Pi_u$, $B^4\Sigma_g^-$, $^2\Phi_u$, $^2\Delta_g$, $b^2\Sigma_g^-$ и $c^4\Sigma_u^-$. Расчеты проведены для значений межъядерного расстояния в интервале 1,0—2,0 Å. Приведены значения основных молекулярных постоянных: T_e , ω_e и R_e , характеризующих перечисленные состояния. Сравнение результатов вычислений с эксперим. данными показало их хорошее согласие: среднеквадратичные отклонения рассчитанных значений от наблюдавшихся не превышали 0,025 Å для R_e , 0,49 эв для T_e и 336 см⁻¹ для ω_e . На основании расчетов идентифицированы по-

лосы в фотоэлектронном спектре молекулы O_2 в области 27,9 и 33,6 эв. Библ. 15.

ф. 1949, № 1

1978

 O_2^+

12 Д401. Фотодиссоциация O_2^+ . McGilve-
y D. C., Morrison J. D., Smith D. L. The photo-
dissociation of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 10,
4759—4761 (англ.)

фотодиссоциация
С помощью тандема масс-спектрометров и перестраиваемого лазера на красителе получен спектр фотодиссоциативного поглощения ионов $O_2^+(a^1\Pi_u)$ во всей видимой области. Спектр представляет собой континуум с наложенными на него интенсивными структурными полосами. Континуальное диссоциативное поглощение приписано прямому переходу на отталкивательную часть потенц. кривой состояния $b^4\Sigma_g^-$, а структурные полосы — переходам на различные уровни преддиссоциирующего состояния $b^4\Sigma_g^-$.
В. С. Иванов

р. 1978, N 12

O_2^+

1978

1056. Фотодиссоциация ионов и фотофрагментарная спектроскопия. Moseley J. T. Ion photodissociation and photofragment spectroscopy. «Electron. and Atom. Collis. Proc. 10th Int. Conf., Paris, 1977. Inv. Pap. and Progr. Repts». Amsterdam e. a., 1978, 681–697 (англ.)

Рассмотрено современное состояние фотофрагментарной спектроскопии ионов. Показано, что реализованные в настоящее время методы позволяют: определять потенц. кривые двухатомных ионов, исследовать колебательную, вращательную и тонкую структуру различных состояний ионов, измерять времена жизни диссоциирующих состояний, исследовать квазисвязанные уровни и диссоциационные процессы в области у порога. Отмечено, что за последние 2 года исследовано более 20 различных ионов, в том числе: O_2^+ , Ar_2^+ , Kr_2^+ , CH_3J^+ , N_2O^+ , O_3^- и CO_3^- . Библи. 27. В. С. Иванов

фото-
диссоц.

ф. 179, №

O_2^+
2

Оттиски 6711

1948

4 Б1091. Спектроскопия фотоосколков — продуктов преддиссоциации квартетных состояний O_2^+ . Tadjed-dine M., Abouaf R., Cosby P. C., Huber B. A., Moseley J. T. Predissociation photofragment spectroscopy of O_2^+ quartet states. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 2, 710—719 (англ.)

фото-
диссоц.

Исследована фотодиссоциация ионов O_2^+ в области 5750—5870 Å с использованием перестраиваемых лазеров на красителе. Изучали спектры преддиссоциации (ПД) — зависимости от длины волны света тока ионов O^+ , возникающих с нулевой энергией разлета, а также энергетич. спектры фотоосколков, регистрируемые при фиксированных значениях длины волны. Показано, что основная часть ПД обусловлена переходом $O_2^+ b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$ с участием уровней $N'=9-23$ $v'=4$ и уровней $N=7-15$ $v'=5$ состояния $a^4\Pi_u$. Показано, что уровень $N'=9$ состояния $a^4\Pi_u$ ($v'=4$) лежит на $1,1 \pm 1,1$ мэВ выше порога диссоциации этого состояния на $O(^3P_2) +$

2.1948, N4

$+O+(^4S^0)$. На основе измерений кинетич. энергии фотоосколков, возникающих при ПД с уровня ($v'=4$, $N'=9$), уточнены положения вращательных и колебательных уровней состояния $b\ ^4\Sigma_g^-$ и получены уточненные значения энергий диссоциации след. состояний (см^{-1}): $O_2X^3\Sigma_g^-$ 41262 ± 10 ; $O_2+a^4\Pi_u$ ($v=0$) 21276 ± 10 ; $O_2+b^4\Sigma_g^-$ ($v=0$) 20411 ± 10 . Использование одномодового лазера с настройкой по скорости позволило разрешить компоненты ТС нек-рых из наблюдавшихся переходов в полосе (4,4). На основании ширины этих разрешенных компонент получены оценки времен жизни τ соотв-щих состояний тонкой структуры. Найдено, что для компонент F_1' и F_4' τ , по крайней мере в 1,5 раза больше, чем для компонент F_2' и F_3' . Величины $\tau = (70 \pm 15) \cdot 10^{-11}$ сек для уровней F_1' и F_4' , а для уровней F_2' и F_3' они равны $(42 \pm 8) \cdot 10^{-11}$ сек. В. Е. Скурат

O_2^+

Омтмен 6711

1978

✓ 2 Д356. Преддиссоциационная фотофрагментарная спектроскопия кватерных состояний O_2^+ . Tadjeddi-ne M., Abouaf R., Cosby P. C., Huber B. A., Moseley J. T. Predissociation photofragment spectroscopy of O_2^+ quartet states. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 2, 710—719 (англ.)

Методом преддиссоциационной фотофрагментарной спектроскопии с использованием перестраиваемого лазера на красителе исследована фотодиссоциация ионов O_2^+ . Показано, что спектры преддиссоциации в области 5750—5870 Å обусловлены переходами (4,4) и (5,5) первой отрицат. системы $O_2^+(b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u)$. Полосы (4,5), (5,6) и (4,3), (5,4) той же системы расположены, соответственно, в областях 6090—6210 и 5430—5550 Å. Предложенная ранее (Moseley J. T. et al., «Phys. Rev.

фото-
диссоц.
ионов

Р. 1979. 2

Lett.), 1976, 37, 891) интерпретация полос преддиссоциационного спектра (как обусловленных переходом $f^4\Pi_g \rightarrow a^4\Pi_u$) ошибочна. Однако в исследованной области длин волн значительна прямая диссоциация ионов O_2^+ через состояние $f^4\Pi_g$. Измерены кинетич. энергии фотофрагментов (для уровня $v'=4$, $N'=9$) и уточнены значения энергий диссоциации состояний $b^4\Sigma_g^+$, $a^4\Pi_u$ и $X^3\Sigma_g^-$. С использованием доплеровской перестройки при возбуждении ионов излучением одномодового лазера получены спектры преддиссоциации, в которых разрешена тонкая структура компонент полосы (4,4). По полуширинам линий определены времена жизни, которые оказались равными $(70 \pm 15) \cdot 10^{-11}$ сек для компонент F_1' и F_4' и $(42 \pm 8) \cdot 10^{-11}$ сек для компонент F_2' и F_3' -уровней $N'=9-15$. Библ. 24.

В. С. Иванов

Обзор;

O_2^+

CO_2^+

N_2O

предисловие

(42) □

Ф. 1981 № 4

1979

4 Д287. Спектроскопия . фотоэлектрон-фотоионных совпадений. Photoelectron — photoion coincidence spectroscopy. El and J. H. D. «Mass Spectrom. Vol. 5». London, 1979, 91—99 (англ.)

Краткий обзор усовершенствований и результатов масс-спектрометрич. метода фотоэлектрон-фотоионных совпадений за последние 2 года. Как последние достижения отмечаются использование коротковолнового синхротронного излучения ускорителя электронов и импульсной структуры света с частотой 13,5 МГц при длительности импульса 1,2 нсек для детектирования электронов. Метод совпадений при времяпролетных измерениях сочетается с измерениями распределений по энергии методом задерживающего потенциала и с измерениями угловых распределений. Достигнутое разрешение при использовании времяпролетных методов для измерения энергий до 20 эв составляет 3 мэв. Большие

преимущества дает использование узких молекулярных пучков. Указаны достигнутые результаты: измерение преддиссоциационного времени жизни $O_2+b^4\Sigma_g^-$, анализ состояний и энергетики преддиссоциации $O_2+c^4\Sigma_g^-$ и $O_2+B^2\Sigma_g^-$, ионов CO_2^+ , N_2O^+ в различных состояниях. Исследовалась фрагментация, в том числе относит. вероятности различных процессов фрагментации и энергетика, в многоатомных ионах CH_4^+ , CH_3F^+ , CH_3Cl^+ , CH_3J^+ , CF_4^+ , $C_2F_6^+$, SF_6^+ , в олефинах ($C_3H_4^+$ и др.), карбонильных соединениях, изомерах $C_6H_6^+$ и родственном им ионе пиридина. Библ. 69. В. Н. Сошников

O_2^+

1979

Eland J. H. D.

J. Chem. Phys., 1979, 70(6), 2926-33.

guesses.

(see. I_2^+ ; III)

8440197

91: 46816c Ab initio calculation of a new spin-spin coupling constant for ${}^4\Pi$ states in diatomic molecules: the $a^4\Pi_u$ state in diatomic oxygen (O_2^+) and $B^4\Pi$ state in vanadium(II) oxide. Grimeland, B.; Veseth, L. (Inst. Phys., Univ. Oslo, 3 Oslo, Norway). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 77(1), 154-5 (Engl). Ab initio calcs. of the new spin-spin coupling consts. β (L. Veseth, 1975; D. L. Albritton et al., 1977) yielded $\beta = 0.127$ and 0.192 for the $a^4\Pi_u$ state in O_2^+ using the minimal basis LCAO wavefunction and the invariant orbital approxn., resp. For the $B^4\Pi$ state in VO the use of the invariant orbital approxn. yielded $\beta = 0.267$. The computed value of β depends rather strongly on the wave function used in the case of O_2^+ . The const. β yields a dominant contribution to the obsd. value of the Λ -doubling parameter C_0 in the case of O_2^+ .

OST-8440

(+1) ☒

C.A. 1979, 9, 116

O_2^+

VO

Кв. мик.
расчёты



Ф. 1649, 112

12 Д125. Неэмпирический расчёт новой константы спин-спинового взаимодействия для $^4\Pi$ -состояний двухатомных молекул: $a^4\Pi_u$ -состояние O_2^+ и $B^4\Pi$ -состояние VO. Ab initio calculation of a new spin-spin coupling constant for $^4\Pi$ states in diatomic molecules. The $a^4\Pi_u$ state in O_2^+ and $B^4\Pi$ state in VO. Grimeland B., Veseth L. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 1, 154—155 (англ.)

Выполнен расчёт введённой ранее (см. Veseth L., 1976, РЖФиз, 1Д132) константы спин-спинового взаимодействия (КССВ), связывающего $^4\Pi_{1/2}(\Lambda=1\Sigma=-1/2)$ и $^4\Pi_{-1/2}(\Lambda=-1\Sigma=3/2)$ -состояния молекул и дана оценка относит. вклада КССВ в постоянную Λ -удвоения термов $a^4\Pi_u$ молекулярного иона O_2^+ и $B^4\Pi$ молекулы VO ($v=0$). При вычислении матричного элемента для обеих молекул используются однопредельные волн. ф-ции метода ЛКАО. Расчёты показывают, что для O_2^+ относит. вклад КССВ в постоянную Λ -удвоения велик, а сами вычисления зависят от того, выбирается ли базис расширенным или минимальным. Для VO вклад КССВ невелик, что подтверждает сильное возмущение состояния $B^4\Pi$ близлежащим $^4\Sigma$ -термом. А. В. Гольцов

1979

Ф. 1649, 112

Оттиски 8440

1979

2 Б79. Неэмпирический расчет новой константы спин-спинового взаимодействия для ${}^4\Pi$ состояний двухатомных молекул. $a^4\Pi_u$ -состояние O_2^+ и $B^4\Pi$ -состояние VO. Grimeland B., Veseth L. Ab initio calculation of a new spin-spin coupling constant for ${}^4\Pi$ states in diatomic molecules: the $a^4\Pi_u$ state in O_2^+ and $B^4\Pi$ state in VO. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 1, 154—155 (англ.)

Проведен неэмпирич. расчет параметра спин-спинового взаимодействия β , связывающего ${}^4\Pi_{1/2}$ и ${}^4\Pi_{-1/2}$ -состояния и кроме того дающего дополнительный вклад в эффективную константу λ -удвоения. Параметр β рассчитан для состояний $a^4\Pi_{\pm 1/2}$ и O_2^+ и состояний $B^4\Pi_{\pm 1/2}$ VO с использованием однодетерминантных волновых функций. Расчет двухцентровых обменных интегралов проведен для приближенного представления оператора спин-спинового конечного взаимодействия в виде сферич. тензоров. Найдено, что полученные значения параметра β в случае O_2^+ сильно зависят от вида использованной волновой функции. Для объяснения λ -удвоения в VO параметр β оказывается несущественным.

Б. И. Жилинский

 O_2^+

VO

Кв. лев.
расчет.

(41) IV

X-1980. N2

O_2^+

1979

8 Д127. Потенциальные кривые для диссоциативной рекомбинации O_2^+ . Potential curves for dissociative recombination of O_2^+ . Guberman Steven L. — Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 11-17, 1979. — «Int. J. Quantum Chem.», Quantum Chem. Symp. № 13, 531—540 (англ.)

Методом МК ССП КВ рассчитаны основное состояние $O_2^+(X^2\Pi_g)$ и адиабатич. потенц. кривые O_2 , коррелирующие с состояниями $O(^3P)$, $O(^1D)$ и $O(^1S)$ и определяющие диссоциативную рекомбинацию O_2^+ . Адиабатические валентные состояния получены из ф-ций КВ, (1

потенц.
кривые

ср 1980 № 8

разложенных по орбиталям, оптимизированным для основного состояния O_2 . На каждом центре использован базис гауссовых ф-ций ($3s/2p/1d$), полученных сжатием из ($9s/5p/2d$). Для $O_2^+(X^2\Pi_g)$ рассчитанная энергия диссоциации 6,64 эв (эксперим. значение 6,78 эв). Рассчитанные ω_e и R_e также хорошо согласуются с экспериментальными. Потенциал ионизации приходит в согласие с экспериментальным после подъема кривой $X^2\Pi_g$ на 0,745 эв, т. е. на величину асимптотич. ошибки для $O(^3P) \rightarrow O^+(^4S)$. Полученные потенц. кривые позволяют рассчитывать диссоциативную комбинацию с первых четырех колебательных уровней $O_2^+(X^2\Pi_g)$.

А. И. Резников

1979

 O_2^+

14 B69. Потенциальные кривые для диссоциативной рекомбинации O_2^+ . Guberman Steven L. Potential curves for dissociative recombination of O_2^+ . Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 11—17, 1979; «Int. J. Quantum Chem.», Quantum Chem. Symp. № 13, 531—540 (англ.)

потенц.
кривые

Методом МК ССП с последующим учетом конфигурац. взаимодействия при использовании базиса из сгруппированных гауссовых функций, рассчитаны адиабатич. потенциальные кривые возбужденных состояний молекулы O_2 , необходимые для описания процесса диссоциативной рекомбинации O_2^+ при столкновении с электроном. Получены также потенциальная кривая для $X^2\Pi_g$ -состояния иона O_2^+ , для которой вычисл. спектроскопич. постоянные хорошо согласуются с эксперим. величинами. Полученные результаты сопоставлены с ранее выполненными расчетами. Обсуждены качеств. закономерности образования продуктов диссоциативной рекомбинации в зависимости от энергии падающего электрона и от колебательного состояния иона O_2^+ .

Б. И. Жилинский

№ 1980 N 14

O_2^+
2

1979

7 ДЗ97. Исследование преддиссоциирующего состояния $b^4\Sigma_g^-$ иона O_2^+ в быстром ионном пучке методом лазерной спектроскопии высокого разрешения. Norani M., Bukow H. H., Carre M., Druetta M., Gaillard M. L. High resolution laser spectroscopy of the predissociated $b^4\Sigma_g^-$ state of O_2^+ in a fast ion beam.—Fast ion spectroscopy. 5th Int. Conf. Beam-Foil Spectrosc., Lyon, 5—8 Sept, 1978. «J. phys.», (France), 1979, 40, № 2, Colloq. № 1, 57—62 (англ.; рез. франц.)

9

Описана методика, позволяющая исследовать распределение осколочных ионов по кинетич. энергиям. Возможности методики проиллюстрированы на примере изучения преддиссоциации ионов O_2^+ ($b^4\Sigma_g^-$). Возбуждение пучка ионов O_2^+ (энергия 10—350 кэВ) осуществлялось Аг-лазером ($\lambda = 4965 \pm 0,02$ Å). Измерение распределения осколочных ионов O^+ позволило установить, что преддиссоциирующим является уровень ($v'=4$, $J'=9$) состояния $b^4\Sigma_g^-$ (O_2^+). По эксперим. данным получены значения вращательных констант уровней $v'=4-5$ ($b^4\Sigma_g^-$): T_0 , B , D , γ и λ . Обсуждены преимущества предложенного метода при изучении энергетики ионов. Библ. 16.

М. Т.

Предис-
соц.

Резюме,
1979
№ 4

O_2^+

фото-
диссоц.

12 Д189. Индуцированная лазером фотодиссоциация O_2^+ . McGilvery D. C., Morrison J. D., Smither D. L. Laser induced photodissociation of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 10, 4761—4768 (англ.)

Измерен спектр фотодиссоциации O_2^+ для видимого диапазона длин волн (1,7—2,6 эв). В эксперименте для создания O_2^+ использован метод ионизации O_2 электронным ударом. Фотодиссоциация молекулярных ионов O_2^+ производилась импульсным перестраиваемым лазером. Регистрация ионов O^+ осуществлялась с помощью двойного квадрупольного масс-анализатора. Анализ полученных спектров проведен с целью идентификации состояний, участвующих в процессе фотодиссоциации. Найдено, что начальным состоянием молекулярного иона O_2^+ является $\tilde{a}^4\Pi_u$. Прямая диссоциация осуществляется при переходе с $\tilde{a}^4\Pi_u$ на отталкивательную часть потенц. кривой $\tilde{f}^4\Pi_g$ -состояния. Прямые фотодиссоционные переходы осуществляются преимущественно с $V=0 \div 8$ колебательных уровней $\tilde{a}^4\Pi_u$. Предполагается, что преддиссоционная структура обусловлена двумя механизмами: вращательной преддиссоциацией $\tilde{f}^4\Pi_g$ -состояния и электронной преддиссоциацией $\tilde{b}^4\Sigma_g^-$ -состояния.

Ю. Л. Малинkevич

Ф.1949, N12

1949

262

37

OM

1979

 O_2^+ Ar_2^+ gemo-
quency.

91. 33004f Photodissociation and photofragment spectroscopy of molecular ions. Moseley, J. T. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *Proc. Int. Conf. Lasers* 1978 (Pub. 1979), 207-14 (Eng). From measurements of the intensity and energy and angular distributions of photofragment ions as functions of wavelength, many mol. properties can be studied in a detail not normally possible with neutral mols. For O_2^+ , for example, using very high-resoln. techniques, it was possible to study in detail the rotational and fine structure levels of the $b^4\Sigma_g^-$ ($\nu = 3, 4, 5$) states, the predissocn. lifetimes of these levels, and the angular distributions of the resulting photofragments. A photofragment-spectroscopic study was also made of the Ar_2^+ mol. ion.

(+1) 10

O.A. 1979, 9/1, N24

O_2^+

Dimmick 8507

1949

91:149075q Accurate ionization energy values for the transitions oxygen ion (O_2^+), $X^2\Pi_g(v' = 0-20)$ — diatomic oxygen, $X^3\Sigma_g^-(v'' = 0)$ and molecular constants of oxygen ground ionic state, determined by neon($Ne\ I$)(73.6nm) photoelectron spectroscopy. Natalis, P.; Collin, J. E.; Delwiche, J.; Caprace, G.; Hubin, M. J. (Inst. Chim., Univ. Liege, B 4000 Liege, Belg.). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1979, 17(3), 205-7 (Eng). High resolu. $Ne(I)$ (73.6 nm) photoelectron spectroscopic measurements provide accurate values of the ionization energies for the 1st 21 vibrational levels of $O_2^+X^2\Pi_g$. From these data mol. consts. were derived for the ground state of the ion O_2^+ .

M, N.

C.A. 1049, 91, N18

O_2^+
2.

Джисс 8507

1978

1 Д305. Определение точных значений энергий ионизационных переходов и молекулярных постоянных иона O_2^+ в основном состоянии методом фотоэлектронной спектроскопии. Accurate ionization energy values for the transitions $O_2^+, X^2\Pi_g(v'=0-20) \leftarrow O_2, X^3\Sigma_g^-(v''=0)$ and molecular constants of oxygen ground ionic state, determined by Ne(I) (73,6 nm) photoelectron spectroscopy. Natalis P., Collin J. E., Delwiche J., Carpace G., Hubin M.-J. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1979, 17, № 3, 205—207 (англ.)

(М.Н.)
С высоким разрешением получен NeI (73,6 нм) фотоэлектронный спектр газообразного O. Вследствие проявления процесса автоионизации в спектре наблюдается полоса с хорошо развитой колебательной структурой, соответствующая образованию иона O_2^+ в основном состоянии $X^2\Pi_g(v'=0-20)$. Уточнены значения молекулярных постоянных основного состояния иона $O_2^+, X^2\Pi_g$ (в cm^{-1}): $\omega_e = 1977 \pm 20$, $\omega_e X_e = 16,9 \pm 1$, $D_e = 51500$.

М. Тимошенко

Ф1580.11

опубликована 8507 1.979

4 Б108. Точные значения энергии ионизации для переходов $O_2^+ X^2\Pi_g(v'=0-20) \leftarrow O_2 X^3\Sigma_g^-(v''=0)$ и молекулярные постоянные основного состояния молекулярного иона кислорода, определенные с помощью фотоэлектронной спектроскопии с возбуждением Ne-I (73,6 нм). Natalis P., Collin J. E., Delwiche J., Caprace G., Hubin M.-J. Accurate ionization energy values for the transitions $O_2^+ X^2\Pi_g(v'=0-20) \leftarrow O_2 X^3\Sigma_g^-(v''=0)$ and molecular constants of oxygen ground ionic state, determined by Ne(I) (73.6 nm) photoelectron spectroscopy. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1979, 17, № 3, 205—207 (англ.).

Измерены с высоким разрешением фотоэлектронные спектры с возбуждением источником Ne-I молекулы O_2 . Табулированы значения энергии ионизации для 21 нижних колебательных уровней основного электронного состояния $X^2\Pi_g$ молек. иона O_2^+ . Точность измерений оценивается как 0,003 эВ для $v'=1-14$ и 0,006 эВ для $v'=15-20$. Из полученных данных определены некие молек. постоянные основного состояния O_2^+ (спектро-скопич. константы ω_e и $\omega_e x_e$, спин-орбитальное расщепление, энергия диссоциации), проведено сопоставление с результатами оптич. спектроскопии. М. Гофман

2.1980. N4

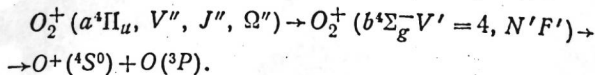
1979

 O_2^+

преддиссоц

4 Д238. Угловые распределения и энергии разделенных преддиссоциационных фрагментов $O_2^+(b^4\Sigma_g^-, v'=4, N', F')$. Angular distributions and separation energies of predissociation photofragments of $O_2^+(b^4\Sigma_g^-, v'=4, N', F')$. Pernot C., Durup J., Ozenne J.-B., Beswick J. A., Cosby P. C., Moseley J. T. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 6, 2387—2398 (англ.)

Измерены спектры кинетич. энергии фотодиссоциационных фрагментов, образующихся при переходах



В эксперименте использовался метод лазерной спектроскопии фотофрагментов молекулярных ионов с высоким оптич. разрешением. Исследовались изотопы $^{16,18}O_2^+$ и $^{16,18}O_2^+$. Из полученных спектров с точностью $\pm 0,05$ определены параметры анизотропии β угловых распре-

Ф. 1580 IV 4

Энергий, которые согласуются с рассчитанными по теории Заре (Zare R. N. «Mol. Photochem.», 1972, 4, 1). Подобным образом и с точностью $\pm 0,1 \text{ см}^{-1}$ определены кинетич. энергии разделенных фотофрагментов W. Они послужили для уточнения известных величин энергий диссоциации O_2 и O_2^+ в пределах нескольких десятков сантиметров. Показано, что при $W < 50$ мэв фрагмент O образуется в состоянии $^3\text{P}_2$. Это может означать, что преддиссоциационное состояние $^4\Sigma_g^+$ диссоциирует чисто адиабатич. путем. Библ. 38. И. Флакс

O_2^+

4 Б1346. Спектры испускания $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ и $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$ при фотоионизации O_2 . Robert C. Y. Wu, Phillips E., Lee L. C., Judge D. L. $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ and $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$ emissions by photoionization of O_2 . «J. Chem. Phys.» 1979, 71, № 2, 769—776 (англ.)

спектры
испускания

С использованием линейчатых источников света и синхротронного излучения в области 175—750 Å зарегистрированы спектральные зависимости сечений возбуждения флуоресценции $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ при 2000—5000 Å и $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$ при 3000—8000 Å. Определены моменты электронных переходов и распределения колебат. заселенностей результирующих ионов. Спектры возбуждения перехода $O_2^+(b \rightarrow a)$ обнаруживают структуру, совпадающую со спектром поглощения O_2 в области 500—700 Å, тогда как спектры возбуждения перехода $O_2^+(A \rightarrow X)$ имеют лишь слабую структуру и сильно отличаются от спектра поглощения O_2 . Обсуждаются причины различного поведения этих спектральных систем.

В. Е. Скурат

№ 1680. V4

1979

Gatewaki Hiroshi, et al.

Int. J. Quantum Chem. 1979,
15(5), 533-45

коп. уек.
пач.

coll. O₂ + $\square$

O_2^+

14 Б141. Определение коэффициента ветвления при
преддиссоциации $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$. Tadjeddine Mireille.
Branching ratio determination in the $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$ predi-
sociation. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 9, 3891—3893
(англ.)

1979

преддиссоц.
(E_i)

Исследована преддиссоциация в молек. пучке ионов O_2^+ при облучении поляризованным светом лазера на красителе. Определяли кол-во O^+ в зависимости от длины волны лазерного излучения при различных расположениях входного окна спектрометра. Определена энергия первого преддиссоциац. уровня $O_2^+(b^4\Sigma_g^-, v'=4)$ [для $N'=9$ $1,1 \pm 1,1$ мэв выше диссоциационного предела $O(^3P_2)$]. Из-за спин-орбитального взаимодействия атома $O(^3P)$, диссоциационный предел $O(^3P) + O^+(^4S_0)$ расщепляется на три: пределы $O(^3P_1)$ и $O(^3P_0)$, на 19,6 и 28,1 мэв соотв. выше предела $O(^3P_2)$. Определены коэф. ветвления в преддиссоциации $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$ с образованием $O(^3P_{2,1,0})$ и $O^+(^4S_0)$. Л. В. Серебренников

ж 1980 N 14

O_2^+

1979

92: 138560p Branching ratio determination in the diatomic oxygen($+1$) ion ($b^4\Sigma_g^-$) predissociation. Tadjeddine, Mireille (Lab. Collisions At. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1979, 71(9), 3891-3 (Eng). The branching ratio in the predissocn. of $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$ ions to the $O(^3P_{2,1,0}) + O^+(^4S^0)$ dissocn. limits was detd. from the predissocn photofragment spectra. The branching ratio detn. provides information on the electronic states. The predissocd. state $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$ is coupled at large internuclear distances with some of the 6 other states of symmetry g which are correlated to the $O(^3P) + O^+(^4S^0)$ dissocn. limits.

n/jguelley

C.A. 1980.92, N16

1979

 O_2^+

предиссоц

5 Д149. Определение эффективности каналов предиссоциации $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$. Branching ratio determination in the $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$ predissociation. Tadjeddine Mireille. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 9, 3891—3893 (англ.)

Экспериментально определены относит. эффективности каналов предиссоциации $O_2^+(b^4\Sigma_g^-) \rightarrow O(^3P_{1,2}) + O(^4S_0)$. $\rho(1)/\rho(2) = 0,0038$. Молекулы $O_2^+(b^4\Sigma_g^-)$ получались путем фотовозбуждения из состояния $a^4\Pi_u$. Предиссоциация наблюдалась из состояния с вращательным квантовым числом $N=15$.

А. И. Шушин

Ф. 1980 N 5

8046

1979

O_2^+

frequency

90: 177250r A theoretical study of the predissociation of the $c^4\Sigma_u^-$ state of diatomic oxygen(+1) ion. Tanaka, K.; Yoshimine, M. (Res. Lab., IBM, San Jose, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(4), 1626-33 (Eng). Extensive configuration-interaction calcs. were carried out to det. the potential curve for the $c^4\Sigma_u^-$ state of O_2^+ . The results show that this state is quasibound with a low potential barrier that could accommodate only a few vibrational levels. The lifetimes with respect to the tunneling through the barrier are too short, but the radiative lifetime of 2×10^{-8} s for the $u = 0$ level is reliable. Based on these results with available exptl. data, a semiempirical curve was constructed and the mean lifetimes were detd. as 10^{-8} and 5×10^{-11} s for the levels $u = 0$ and 1, resp. This result clearly explains absence of the $u = 1$ level in emission, and leads to a conclusion that the tunneling should be the dominant mechanism for the predissocn. of the $c^4\Sigma_u^-$ state of O_2^+ .



C.A. 1979, 20, N22

O_2^+

Омичисс

8046

1979

10 Д179. Теоретическое исследование преддиссоциации состояния $c^4\Sigma_u-O_2^+$. Tanaka K., Yoshimine M. A theoretical study of the predissociation of the $c^4\Sigma_u$ -state of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 4, 1626—1633 (англ.).

предиссоц

Рассчитана потенц. кривая (ПК) состояния $c^4\Sigma_u$ -иона O_2^+ и оценены времена жизни колебательных уровней, соответствующих квазистационарному состоянию. Расчеты проводились в расширенном слэтеровском базисе с включением $3d$ -поляризующих ф-ций в многоконфигурационном (МК) приближении метода ССП и методом КВ с использованием одноэлектронного базиса МО, полученного в МКССП расчетах. В различных вариантах расчета методом КВ использовалось различное число возбужденных конфигураций. Все расчеты

СНС

Ф.1579/10

указывают на то, что на ПК состояния $s^1\Sigma_u^-$ имеется минимум в области $R \approx 2,2$ Å, отделенный от сталкивательной части ПК барьером высотой 0,14—0,81 эв и шириной 0,07—0,16 Å (по данным, полученным в различных вариантах расчета), что обуславливает наличие двух квазисвязанных колебательных состояний. Рассчитанное время жизни состояния с $v=0$ относительно процесса туннелирования (τ) оказывается слишком малым по сравнению с экспериментальным. Сочетание расчетных и эмпирич. данных позволило построить ПК, параметры барьера которой дают значения τ , равные 10^{-8} и $5 \cdot 10^{-11}$ с для уровней с $v=0$ и $v=1$ соответственно. Это объясняет отсутствие уровня $v=1$ в спектре эмиссии. Т. обр., туннелирование является основным механизмом процесса преддиссоциации изученного терма.

В. И. Барановский

Оптимизация 8046

1979

 O_2^+

21596. Теоретическое исследование преддиссоциации $c^4\Sigma_u^-$ -состояния O_2^+ . Такака К., Yoshimine M. A theoretical study of the predissociation of the $c^4\Sigma_u^-$ state of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 4, 1626—1633 (англ.)

преддиссоц.
потенциальной
кривой

Проведены неэмпирич. расчеты потенциальной кривой состояния $c^4\Sigma_u^-$ молек. иона O_2^+ . Использован метод конфигурац. взаимодействия (КВ) с построением волновых функций из орбиталей многоконфигурац. приближения самосогласованного поля. Базисный набор составлен из слейтеровских функций s -, p - и d -типа. Проанализированы три различных варианта КВ, из к-рых лучшим признан подход с учетом всех одно- и двукратно возбужденных конфигураций. Рассчитанная потенциальная кривая имеет сложную форму с двумя минимумами и разделяющим их невысоким барьером.

2. 1979, № 1

Анализ электронной структуры показал, что наличие максимума связано с псевдопересечением двух электронных диабатич. состояний данного типа симметрии. Найденное положение основного колебательного уровня рассматриваемого квазисвязанного состояния хорошо согласуется с эксперим. оценками. Отмечено, что область внешнего минимума в основном определяется наведенным дипольным взаимодействием. С рассчитанной потенциальной кривой оценка времени жизни основного колебательного состояния приводит к разумной величине порядка 10^{-8} сек. Полученные результаты для времен жизни др. колебательных уровней позволяют заключить, что наиболее вероятным механизмом, объясняющим преддиссоциацию $c^4\Sigma_u^-$ -состояния O_2^+ , является туннелирование через потенциальный барьер.

А. В. Немухин

O_2^+

1979

2 Д718. Спектры испускания ионов O_2^+ ($A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi$) и O_2^+ ($b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$), возбуждаемые при фотоионизации молекул O_2 . O_2^+ ($A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$) and O_2^+ ($b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$) emissions by photoionization of O_2 . Wu C. Y. Robert, Phillips E., Lee L. C., Judge D. L. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 2, 769—776 (англ.)

В области 200—800 нм получены спектры флуоресценции ионов O_2^+ , образовывавшихся при фотоионизации газообразного кислорода. Для ионизации использовалось синхротронное излучение и излучение резонан-

И. М. М.



Ф. 1980.12

сных ламп в области 17,5—74,0 нм. В спектрах идентифицированы полосы, соответствующие системам переходов $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$ и $b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$. По эксперим. данным определены значения моментов электронных переходов и распределение ионов по колебательным уровням, построены спектральные зависимости сечений флуоресценции. Сравнение полученных спектров с известными из литературы спектрами поглощения O_2^+ показали хорошее соответствие структуры полос в системе $b \rightarrow a$ и значительные расхождения в системе $A \rightarrow X$. Обсуждены возможные каналы образования ионов O_2^+ в электронно-возбужденных состояниях. Библ. 32. М. Т.

O_2^+

Orrmace 10592

1980

94: 22337h Laser spectroscopy of the oxygen molecular ion using a fast ion beam. Fine structure and predissociation lifetimes in the $b^4\Sigma_g^-$ state. Carre, M.; Druetta, M.; Gaillard, M. L.; Bukow, H. H.; Horani, M.; Roche, A. L.; Velghe, M. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Lyon I, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Mol. Phys.* 1980, 40(6), 1453-80 (Eng). The predissocn. of the $b^4\Sigma_g^-$ state of O_2^+ was reexamd. using fast ion beam laser spectroscopy. The high-resoln. photofragment spectrum revealed several hundred lines which were classified in the (3-0), (4-1), and (5-2) bands of the $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ transition of O_2^+ . The v' levels of the $v' = 4$ and 5 levels of $b^4\Sigma_g^-$ were studied as a function of the vibrational, rotational, and fine structure quantum nos. The results were interpreted in terms of a new a priori theory for the predissocn. mechanism of O_2^+ .

nfequccoq

C.A. 1981. 24 N 4

O_2^+

8 Б1315. Лазерная спектроскопия молекулярного иона O_2^+ с применением пучка быстрых ионов. Тонкая структура и преддиссоциационные времена жизни состояния $b^4\Sigma_g^-$. Carre M., Druetta M., Gailard M. L., Bukow H. H., Horani M., Roché A. L., Velghe M. Laser spectroscopy of the O_2^+ molecular ion using a fast ion beam: fine structure and predissociation lifetimes in the $b^4\Sigma_g^-$ state. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 6, 1453—1480 (англ.) 1980

преддиссоц.,
м.п.
Методом лазерной спектроскопии высокого разрешения с пучком быстрых ионов исследована преддиссоциация состояния $b^4\Sigma_g^-$ иона O_2^+ . Проведено сравнительное обсуждение источников ионов для подобных исследований. В работе использован ВЧ-разряд в чистом O_2 . Пучок ионов ускоряется до энергии 10—150 кэВ, фокусируется квадрупольной системой, отклоняется секторным магнитным анализатором и проходит по дрейфовой трубе длиной 1,8 м коллинеарно с лучом лазера на ионах Ar^+ мощностью 15 Вт, модулированного частотой 1 кГц. Компоненту O^+ детектировали вторым магнитным анализатором и цилиндром Фарадея. В полосах (3—0), (4—1) и (5—2) перехода $b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$ наблюдали несколько сотен линий. Из анализа ширины

X.1981N8

линий определены преддиссоциац. времена жизни уровней $v'=4$ и $v'=5$, находящихся над преддиссоциац. пределом $O^+(^4S) + O(^3P)$, как ф-ция различных квантовых чисел (колебательных, вращательных, ТС). Рассчитаны кривые потенциальной энергии для состояний $^4\Sigma_g^+$ (методом полного взаимодействия валентных конфигураций) и $f^4\Pi_g$ (указанный метод + метод конфигурац. взаимодействия 1-го порядка). Обе потенциальные кривые состояния $f^4\Pi_g$ имеют широкий барьер с максимумом при $\sim 2,9$ А. Результаты хорошо согласуются с имеющимися измерениями, и рассматриваются в рамках новой теории механизма диссоциации O_2^+ , включающей вклад в преддиссоциацию диссоциационных континуумов состояний $^4\Sigma_g^+$ и $f^4\Pi_g$ для уровней с $v' \geq 6$. Обсуждаются направления исследований в данной области.

Н. И. Бутковская

O_2^+

1980

М.И.

4 Д472. Лазерная спектроскопия пучка быстрых молекулярных ионов O_2^+ : тонкая структура и время жизни преддиссоциации в состоянии $b^4\Sigma_g^-$. Laser spectroscopy of the O_2^+ molecular ion using a fast ion beam: Fine structure and predissociation lifetimes in the $b^4\Sigma_g^-$ state. Carre M., Druetta M., Gaillard M. L., Bukow H. H., Horani M., Roche A. L., Velghe M. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 6, 1453—1480 (англ.)

Метод лазерной спектроскопии пучков быстрых (~ 70 кэВ) ионов применен для исследования процесса преддиссоциации ионов O_2^+ в состоянии $b^4\Sigma_g^-$. Анализ энергетич. спектров фотофрагментов $O^+(4s)$, образу-

Ф. 1981 N 4

щихся при диссоциации молекулярных ионов, позволил отнести несколько сотен линий в этих спектрах к полосам (3—0), (4—1) и (5—2) системы $b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$ (O_2^+). Для возбуждения исходных ионов использовался много-модовый Ag^+ -лазер. Анализ контуров полос позволил получить зависимости времен жизни преддиссоциирующих состояний от значений колебательных и вращательных квантовых чисел и параметров тонкой структуры. Результаты работы согласуются с существующими теоретич. представлениями о механизме исследованного процесса. Библи. 53.

М. Т.

O_2^+

1980

3 Д558. Фотодиссоциация O_2^+ Photodissociation of O_2^+ . Cosby P. C., Helm H. «SASP. Symp. Atom. (and Surface Phys., Maria Alm-Salzburg, 1980. Contrib.»

S. 1., s. a., 91—95 (англ.). (Место хранения ГПНТБ СССР.)

Фотодиссоциация ионов O_2^+ исследована с использованием фотофрагментарного спектрометра с коаксиальной геометрией ионного и лазерного пучков. Зарегистрирована преддиссоциация квазисвязанных уровней состояния O_2^+ ($f^4\Pi_g$). Вращательный анализ полос, совместно с анализом кинетич. энергий фотофрагментов, позволил получить информацию о локализации состояния $f^4\Pi_g$.

В. С. Иванов

сп. 1982, 18, №3.

O_2^+

1980

5 Б1508. Фотодиссоциация O_2^+ . Cosby P. C., Helm H. Photodissociation of O_2^+ . «SASP. Symp. Atom. and Surface Phys., Maria Alm-Salzburg, 1980. Contrib.» S. 1., s. a., 91—95 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

м.п., спектр

Изучена фотодиссоциация электронно-возбужденных ионов O_2^+ под действием излучения лазера на красителе в диапазоне длин волн 5700—6500 Å. Эксперименты проводили на ионно-лазерном спектрометре с коаксиальным направлением пучка ионов и лазерного луча. Ионы O_2^+ получали электронным ударом из O_2 или H_2O_2 . Моноэнергетичный пучок ионов O_2^+ после масс-селектора попадал в р-ционную кювету, помещенную внутри резонатора лазера, что значительно повышает чувствительность. В ходе опытов регистрировали спектры фотодиссоциации — зависимость ионного тока O^+ от длины волны возбуждающего излучения. Кроме того, анализировали кинетич. энергии продуктов р-ции. В спектре высокого разрешения (0,001 Å) идентифи-

X, 1982, 19, № 5.

цированы две подполосы, отнесенные к переходу $f^4\Pi_g \leftarrow a^4\Pi_u$ ($v=5$) — полосы $^4\Pi_{5/2} \leftarrow ^4\Pi_{5/2}$ (A) и $^4\Pi_{3/2} \leftarrow ^4\Pi_{3/2}$ (B). Из ширины линий вращательных переходов в полосах A и B — от 4 до 22 ГГц определено время жизни преддиссоциирующего состояния: для низшего вращательного уровня полосы A 40 пс, полосы B 12 пс. На основе анализа спектра высокого разрешения определено равновесное межъядерное расстояние 2,1 Å в состоянии $f^4\Pi_g$. Из спектра кинетич. энергий фотофрагментов установлено расположение отталкивательной ветви f -состояния. Барьер диссоциации из состояния f составляет около 1500 см⁻¹. Отталкивательные ветви состояний $f^4\Pi_g$ и $d^4\Sigma_g^+$ должны совпадать при энергиях 0—4000 см⁻¹ выше предела диссоциации.

В. П. Булатов



O_2^+

1980

24 В1355. Фотодиссоциация O_2^+ . Cosby P. C., Helm H. Photodissociation of O_2^+ . «Symp. Atom. and Surface Phys.» 80, Salzburg, 1980. Contrib.» 91—95 (англ.)

фото-
диссоциация

Изучена фотодиссоциация O_2^+ при облучении лазерным излучением в интервале $\sim 5700-6450$ А с анализом кинетич. энергии фотофрагментов O^+ . Приведены кривые потенциальной энергии состояний O_2^+ $a^4\Pi_u$, $b^4\Sigma_g^-$, $d^4\Sigma_g^+$, $f^4\Pi_g$. Установлено, что равновесное межъядерное расстояние для наблюдаемых уровней состояния $f^4\Pi_g \sim 2,1$ А. Высота потенциального барьера для этого состояния ~ 1000 см $^{-1}$. Диссоциация состояния $f^4\Pi_{5/2}$ происходит с образованием всех трех $O(^3P)$ состояний, а $f^4\Pi_{3/2}$ — только $O(^3P_1)$. Ю. И. Дорофеев

X. 1980 N 24

O_2^+

Д 6 Д766. Фотофрагментарная спектроскопия высоко-
го разрешения первой отрицательной системы иона
 $O_2^+(b^4\Sigma_g^-, v'=3,4,5 \leftarrow a^4\Pi_u, v'=3,4,5)$ с использованием
коаксиальных лазерного (на красителе) и ионного (пе-
рестраиваемого по скорости) пучков. High-resolution
photofragment spectroscopy of the $O_2^+b^4\Sigma_g^- (v'=$
 $=3,4,5) \leftarrow a^4\Pi_u (v'=3,4,5)$ first negative system using
coaxial dye-laser and velocity-tuned ion beams. Cos-
by P. C., Ozenne J. - B., Moseley J. T., Albrit-
ton D. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 203—235
(англ.)

С помощью нового фотофрагментарного спектромет-
ра исследована вращательная структура перехода
 $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$. Положение 359 вращательных пе-
реходов полос (4,4), (4,5), (5,5) и (3,3) измерены с
точностью $\pm 0,0032 \text{ см}^{-1}$. Определены молекулярные
постоянные и коэф. Данхэма для состояний $O_2^+b^4\Sigma_g^-$
и $a^4\Pi_u$. Показано, что гамильтонианы состояний b и a ,
использованные ранее при описании структуры перехо-
да $b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$ в спектре испускания иона O_2^+ , не
описывают адекватно эти состояния в пределах точ-
ности, достигнутой в настоящем эксперименте. Подроб-
но описана аппаратура. Библи. 50. В. С. Иванов.

1980

9071

Омич

М, Н ..

Ф 1980 N 6

O_2^+

спектроскоп.
высокого
разрешения

12 Б1327. Фотофрагментная спектроскопия высокого разрешения перехода $O_2 + b^4\Sigma_g^-(V'=3,4,5) \leftarrow a^4\Pi_u(V'=3,4,5)$ первой отрицательной системы с использованием коаксиального лазера на красителе и ионных пучков с переменной скоростью. Cosby P. C., Ozenne J. - B., Moseley J. T., Albritton D. L. High-resolution photofragment spectroscopy of the $O_2 + b^4\Sigma_g^-(V'=3,4,5) \leftarrow a^4\Pi_u(V'=3,4,5)$ first negative system using coaxial dye-laser and velocity-tuned ion beams. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 79, № 1, 203—235 (англ.)

Описан новый фотофрагментный спектрометр с использованием коаксиального одномодового перестраиваемого лазера и быстрого пучка ионов с регистрируемой скоростью, предназначенный для измерения энергий перехода в первой отриц. системе $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u)$. Точность измерения на порядок выше точности, к-рая доступна эмиссионной спектроскопии с доплеровским ограничением. Техника состоит в изменении скорости пучка метастабильных ионов $O_2^+a^4\Pi_u$ таким образом, чтобы вращательные переходы первой отриц. системы могли находиться в резонансе с длиной волны лазерного излучения, что приводит к преддиссоциации уровней

х. 1980. N12

состояний $b^4\Sigma_g^-$ и наблюдению фотофрагментных ионов O^+ . Изменение скорости при различных частотах излучения лазера на красителях позволяет получить спектр первой отриц. системы для преддиссоциирующих верхних колебательных уровней, что невозможно сделать с помощью обычной эмиссионной спектроскопии. Фотофрагментные ионы O^+ имеют кинетич. энергию, зависящую от высоты преддиссоциирующего вращательного уровня относительно уровня разделенных атомов. Спектрометр включает анализатор энергий фотофрагментов, к-рый может быть использован для записи волновых чисел переходов в различные вращательные уровни верхнего состояния. Было получено 359 волновых чисел, включающие полосы (4,4), (4,5), (5,5) и (3,3) с

ошибкой $\pm 0,0032$ и точностью $0,0028 \text{ см}^{-1}$.

А. Шведчиков

$O_2^+(\epsilon_i)$ XI - 62110 1980

Chutjian A., Ajello J. M.

Chem. Phys. Lett, 1980, 72, v3, 504-508 (aug)

Threshold photoelectron spectrum of
 O_2 by electron attachment.

Ref. 3, 1980, 120 320

CO (40)

O_2^+

ommuch 10385

1980

homem,
Khubee

93: 248133e Spectroscopic determination of the dissociative $f^4\Pi_g$ potential curve of diatomic oxygen (+1) ion, Grieman, F. J.; Moseley, J. T.; Saxon, R. P.; Cosby, P. C. (Phys. Dep., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *Chem. Phys.* 1980, 51(1-2), 169-78 (Eng). Photofragment kinetic energy distributions were measured for the direct photodissocn. $O_2^+(a^4\Pi_u) + h\nu \rightarrow O_2^+(f^4\Pi_g) \rightarrow O^+ + O$, using a fast ion beam and continuous wave lasers at 12 wavelengths between 5208 and 7525 Å. Transitions originating in a state vibrational levels 4 through 10 were individually resolved. The data were used, along with the existing knowledge of the a state potential curve, to accurately det. the dissociative part of the $f^4\Pi_g$ potential curve in the Franck-Ondon region. Information was obtained about the populations of the a state vibrational levels. The exptl. detd. curve was compared with results of recent calcs.

C.A. 1980. 93 v26

O_2^+

диссоциат.
потенц.
кривая

6 Б1405. Спектроскопическое определение диссоциативной потенциальной кривой $f^4\Pi_g$ иона O_2^+ . Grieman F. J., Moseley J. T., Savon R. P., Cosby P. C. Spectroscopic determination of the dissociative $f^4\Pi_g$ potential curve of O_2^+ . «Chem. Phys.», 1980, 51, № 1—2, 169—178 (англ.)

Измерено распределение кинетич. энергии продуктов прямой фотодиссоциации $O_2^+(a^4\Pi_u) + h\nu \rightarrow O_2^+(f^4\Pi_g) \rightarrow O^+ + O$. Для фотодиссоциации использовали 12 длин волн в диапазоне от 5200 до 7525 Å. Показано, что в спектрах кинетич. энергии продуктов фотодиссоциации наблюдаются хорошо разрешенные максимумы, соотв-щие переходам с колебательных уровней $v'' = 4-10$ основного электронного состояния $a^4\Pi_u$. Определены относит. населенности колебательных уровней основного состояния. Полученные данные используются для нахождения отталкивательной потенциальной кривой $f^4\Pi_g$ в области пересечения со связывающей потенциальной кривой $B^4\Sigma_g^-$ иона O_2^+ . Отмечено, что экспериментально определенная потенциальная кривая заметно отличается от расчетной.

В. И. Захарьин

Х: 1981.16

1980

Виттман 10385

1980

 O_2^+

8 Б1314. Лазерная преддиссоциационная спектроскопия состояния $f^4\Pi_g$ иона O_2^+ . Helm H., Cosby P. C., Huestis D. L. Laser predissociation spectroscopy of the $f^4\Pi_g$ state of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2629—2640 (англ.)

Методом детектирования осколочных ионов O^+ , образующихся при фотодиссоциации иона O_2^+ , идентифицированы два квазисвязанных колебательных уровня состояния $f^4\Pi_g$ O_2^+ . Уровни наблюдали при поглощении света в переходе $f^4\Pi_g$ ($v'=2,3$) $\leftarrow a^4\Pi_u$ ($v'=5,6$) в пучке быстрых ионов O_2^+ , коаксиальном с лучом лазера на красителе. Измеряли преддиссоциац. уширение линий и кинетич. энергию фотофрагментов. Определены колебательные и вращательные постоянные этих уровней, эффективные спектроскопич. константы компоненты $\Omega'=5/2$ состояния $f^4\Pi_g$ равны $\omega_e=470,7$ см $^{-1}$, $\omega_e x_e=46,0$ см $^{-1}$, $B_e=0,6588$ см $^{-1}$, $\alpha_e=0,0696$ см $^{-1}$, $R_e=1,79$ А. Подтверждено теор. предсказание существова-

М.И.

X. 1984 N 8

ния потенциального барьера состояния f при больших
 меядерных расстояниях, для которого получена оценка
 высоты $\geq 360 \text{ см}^{-1}$. Определены преддиссоциационные
 времена жизни полосы (3,5) системы $f \leftarrow a$ как ф-ция
 $I'(I'+1)$ и отношения вероятностей различных каналов
 преддиссоциации. Преобладающими каналами диссоциации
 $\text{O}_2^+ f^4\Pi_g$ являются: на $\text{O}^+(^4S^0) + \text{O}(^3P_2)$ для уровня
 $v'=2$ $\Omega'=5/2, 3/2$ и уровня $v'=3, \Omega'=5/2$; на $\text{O}^+(^4S^0) +$
 $+\text{O}(^3P_1)$ для уровней $v'=3, \Omega'=5/2, 3/2$ и на $\text{O}^+(^4S^0) +$
 $+\text{O}(^3P_0)$ для уровня $v'=3, \Omega'=3/2$. Преддиссоциация
 уровня $v'=3$ включает туннелирование через потен-
 циальный барьер, а преддиссоциация уровня $v'=2$ обу-
 словлена взаимодействием с состояниями $d^4\Sigma_g^+, E^2\Sigma_g^+$
 и $\alpha^6\Pi_g$.

Н. И. Бутковская

армс

об

O_2^+

оттиски 10721

1980

3 Д619. Лазерная преддиссоциационная спектроскопия состояния $f^4\Pi_g$ иона O_2^+ . Laser predissociation spectroscopy of the $f^4\Pi_g$ state of O_2^+ . Helm H., Cosby R. C., Huestis D. L. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2629—2640 (англ.)

лазерн.
преддиссоц.

Две колебательных полосы, соответствующие переходам на квазисвязанные колебательные уровни состояния $f^4\Pi_g$ иона O_2^+ зарегистрированы в спектре фото-диссоциации иона $O_2^+(a^4\Pi_u)$. В результате вращательного и изотопич. анализа полос впервые определены спектроскопич. постоянные состояния $O_2^+(f^4\Pi_g)$. Измерены полуширины преддиссоциированных линий и кинетич. энергии фотофрагментарных ионов O^+ . Оценен барьер на потенц. кривой состояния $f^4\Pi_g$. Рассмотрены возможные механизмы преддиссоциации. Библ. 27.

В. С. Иванов

Ф. 1981 № 3

O_2^+

1980

лазер-
нечувств.
спектроск.

93: 213210a Laser predissociation spectroscopy of the $f^4\Pi_g$ state of diatomic oxygen ($1+$) ion. Helm, H.; Cesby, P. C.; Huestis, D. L. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). J. Chem. Phys. 1980, 73(6), 2629-40 (E: 5). Two quasibound vibrational levels of the $f^4\Pi_g$ state of O_2 were obsd. by monitoring O^+ photofragments resulting from absorption of laser radiation by the $a^4\Pi_u$ state. The first spectroscopic consts. for the f state were derived from rotational and isotopic analyses. Measurements of the predissocn. linewidths and photofragment kinetic energies were used to refine ests. of the barrier in the f state potential curve and to identify likely predissocn. mechanisms.

С.А. 1980. 93 w 22

O_2^+

3 Д31. Исследование резонансов в O_2 при помощи фотоэлектронной спектроскопии по времени пролета с использованием синхротронного излучения. Time of flight photoelectron spectroscopy using synchrotron radiation study of resonances in O_2 . Morin P., Nerner I., Guyon P. M., Dutuit O., Ito K. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1980, 77, № 7—8, 605—612 (англ.; рез. англ.) 1980

Для фотоэлектронной спектроскопии по времени пролета O_2 под действием синхротронного излучения в области вакуумного УФ использован новый анализатор, сочетающий угловую и временную дискриминацию фотоэлектронов. Описанная методика позволяет при малом времени накопления (5 мин) снять полный спектр, сохраняя высокую чувствительность во всем диапазоне энергий, и, в частности, вблизи порога (0—1 эв). Разрешение при энергиях ниже 1 эв достаточно для выявления колебательной структуры остаточного иона. Для переходов в состояния $a^4\Pi_u$ и $b^4\Sigma_g^-$ иона O_2^+ получены относительные интенсивности отдельных колебательных полос и вычислены соответствующие коэф. ветвления. Сильные отклонения от франк-кондовских распределений указывают на то, что при энергиях фотона вблизи 16,7 и 19 эв процесс ионизации не является прямым.

М. В. Кузьмин

фотоэлектр.
спектр

ф. 1981 № 3

O_2^+

1980

кварметт.
соединения

93: 247487m Laser spectroscopic studies of molecular ions using fast ion beams. Moseley, John; Durup, Jean (Phys. Dep., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1980, 77(7-8), 673-88 (Eng). The use of lasers and fast ion beams to study the spectroscopy of mol. ions is reviewed with 77 refs. The extensive work on quartet states of O_2^+ is used as a case study of the kinds of results that should be available for a large no. of ions in the near future.

С.Д. 1980. 93 наб

1980

Paxiari A.H., et al.,

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

O_2^+

cf. Mex-
paxium

(all. H_2 ; III)

O_2^+

кв. макс.
растет

1980
Saxon Roberta P;
et al.

J. Chem. Phys. 1980,
43, 112, 876-80.

суд. O_2 - III

Оттиск 1946

1981

O_2^+

ϵ_i

Кв. мех.
расчет

2 Б20. Сопоставление волновых функций, приведенных по симметрии и функций с нарушенной симметрией. Ионы O_2^+ с основной ионизацией $1s$. Agren Hans, Bagus Paul S., Roos Björn O. Symmetry adapted versus symmetry broken wavefunctions: the $1s$ core level ions of O_2^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 3, 505—510 (англ.)

Рассчитаны энергии электронных состояний молекулы O_2^+ , отвечающие ионизации электронов остова $1s$ молекулы O_2 . Вычисления проведены с использованием полной точечной группы симметрии $D_{\infty h}$ молекулы, а не с пониженной — $C_{\infty v}$, как это часто рекомендуется делать при трактовке основной ионизации. Волновые функции построены в многоконфигурац. приближении ССП в полном конфигурац. пространстве активных орбиталей. В активное пространство МО включены орбитали $1\sigma_g, 1\sigma_u, 1\pi_g, 1\pi_u$ в то время как МО типа $2\sigma_g, 2\sigma_u, 3\sigma_g$ отнесены к неактивным в конфигурац. взаимодействиях (дважды заняты во всех конфигурац. функциях). Использован двухэкспонентный базис сгруппированных гауссовых орбиталей с добавлением поляризац. d -функций. Вычисления выполнены при межъядерном расстоянии

X, 1982, 19AB, №2.

2,282 ат. ед. Сопоставлены между собой энергии различных состояний молек. иона $4,2\Sigma^-_{g,u}$, $2\Delta_{g,u}$, $2\Sigma^+_{g,u}$, а также эффективные веса конфигураций, отвечающих возбуждениям электрона с почти-вырожденных орбиталей $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$. Отмечено, что даже ограниченный учет корреляц. эффектов, предпринятый в данной работе, позволяет качественно объяснить нарушение симметрии, наблюдаемое в соотв-щих хартри-фоковских расчетах. Небольшие расхождения с эксперим. данными по потенциалам ионизации могут быть в принципе устранены при расширении активного подпространства МО и при использовании более полных базисов АО.

А. В. Немухин

Оттиск 11946

1981

 O_2^+

1 Д123. Сравнение приведенных и неприведенных по симметрии волновых функций. Уровни $1s$ внутренней оболочки иона O_2^+ . Symmetry adapted versus symmetry broken wavefunctions. The $1s$ core level ions of O_2^+ . Ågren Hans, Bagus Paul S., Roos Björ O. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 3, 505—510 (англ.)

Г, м.п.

На примере расчета потенциалов ионизации с оболочки $1s$ молекулы O_2 показано, что использование многоконфигурац. приближения ССП или ограниченного конфигурац. взаимодействия с учетом полной симметрии ($D_{\infty h}$) волн. ф-ции по результатам практически эквивалентно использованию приближения ССП с волн. ф-цией низшей симметрии $C_{\infty v}$. Т. обр., плохие значения энергий ионизации электронов с внутренних электронных оболочек молекул, получаемые в расчетах Δ ССП с ф-циями правильной симметрии, вызваны большими корреляционными поправками, связанными с близкими по энергии конфигурациями иона. В случае расчета дырочных состояний O_2^+ главные корреляционные эффекты связаны с включением конфигураций, отвечающих возбуждениям $1\sigma_g \rightarrow 1\sigma_u$ (или $1\sigma_u \rightarrow 1\sigma_g$) и $1\pi_u \rightarrow 1\pi_g$.

А. И. Дементьев

ср. 1982,
18, н1.

O_2^+

Ommuck 12610

1981

96: 26607k Competing pre-dissociations of oxygen molecular ion ($B^2\Sigma_g^-$). Blyth, R. G. C.; Powis, I.; Danby, C. J. (Phys. Chem. Lab., Oxford, UK OX1 3QZ). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 84(2), 272-5 (Eng). Photoelectron-photoion coincidence studies show that upper vibrational levels of the $O_2^+ B^2\Sigma_g^-$ are predissociated via 2 channels which lead to ground- and excited-state products. The repulsive states of O_2^+ which may be responsible for the reactions are discussed.

спегуе -
согласуе

C.A. 1982, 96, N 4

O_2^+

[Оттиск 12610]

1981

$(\tilde{B}^2\Sigma_g^-)$

конкуриру-
ющая пре-
диссоциация

5 Д547. Конкурирующая преддиссоциация ионов $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-)$. Competing pre-dissociations of $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-)$. Blyth R. G. C., Powis I., Danby C. J. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 84, № 2, 272—275 (англ.)

Методом фотоэлектрон-фотоионных совпадений показано, что верхние колебательные уровни состояния $\tilde{B}^2\Sigma_g^-$ иона O_2^+ преддиссоциируют по двум каналам: с образованием продуктов 1) в основных и 2) возбужденных состояниях. Предложена диаграмма, описывающая отталкивательные состояния иона O_2^+ , ответственные за обнаруженные в работе эффекты. Библ. 24. М. Т.



ф. 1982, 18, №5.

O_2^+

ommuca 12865 | 1981

Bombach R., et al.,

негущоос.
Di

Chem. Phys., 1981,

61, 215 - 219



O_2^+

1981

6 Б115. Преддиссоциация катионов молекулярного кислорода $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-)$. Bombach Rolf, Schmelzer Andreas, Stadelmann Jean-Pierre. The predissociation of molecular oxygen cations $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-)$. «Chem. Phys.», 1981, 61, № 1—2, 215—219 (англ.)

преддиссо-
циация

Методом фотоэлектрон-фотонных совпадений исследована диссоциация ионов $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-, v=4)$, образованных при возбуждении He-1 α . В измеренном ФЭС O_2 наблюдались пики, связанные с образованием $O_2^+(\tilde{b}^4\Sigma_g^-, v=0-5)$ и $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-, v=0-4)$. Найдено, что преддиссоциация $O_2^+(\tilde{B}^2\Sigma_g^-, v=4)$ протекает по двум каналам с образованием $O^+(^4S) + O(^3P)$ и $O^+(^4S) + O(D)$ в отношении 0,75 : 0,25. В. М. Ковба

X. 1982, 19, № 6.

O_2^+

1981

4 Д348. Предиссоциация молекулярных катионов кислорода $O_2^+(B^2\Sigma_g^-)$. The predissociation of molecular oxygen cations $O_2^+(B^2\Sigma_g^-)$. Bombach Rolf, Schmelzer Andreas, Stadelmann Jean-Pierre. «Chem. Phys.», 1981, 61, № 1—2, 215—219 (англ.)

предиссоциация

Методом фотоэлектрон-фотоионного совпадения при фиксированной длине волны фотонов (He—1α, 21,22 эВ) исследованы пути предиссоциации вибронного $B^2\Sigma_g^-, v=4$ состояния молекулярного катиона кислорода. Найдено, что катионы O_2^+ с $v \leq 4$ распадаются в соответствии с известными литературными данными на $O^+(^4S) + O(^3P)$ состояния. При $v=4$ открывается конкурирующий канал $O^+(^4S) + O(^1D)$, дающий возбужденное состояние продуктов. Отношение вероятностей распада $[O^+(^4S) + O(^3P)] / [O^+(^4S) + O(^1D)]$ найдено равным 0,75 : 0,25. Отмечается, что подобное поведение наблюдается и у более высоких электронных состояний O_2^+ .

А. Зембеков

Ф. 1982, 18, № 4.

O_2^+

Омск 12825 1981

10 В125. Тонкая структура более высокого порядка состояния $a^4\Pi_u O_2^+$. Brown J. M., Milton D. J., Watson J. K. G., Zare R. N., Albritton D. L., Horani M., Rostas J. Higher-order fine structure of the $a^4\Pi_u$ state of O_2^+ . «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 139—151 (англ.)

тонкая
структура

Показано, что уровень анализа структуры полосы (4,4) перехода $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ иона O_2^+ , измеренного при исследовании ионных пучков, может быть существенно повышен путем введения в эфф. гамильтониан для состояния $a^4\Pi_u$ члена ТС в виде $L_z S_z^2$, где L_z и S_z — компоненты общего орбитального и спинового углового момента соотв. вдоль межъядерной оси. Резюме

X. 1982, 19, N10.

O_2^+

Оттиск 12825 1981

5 Д417. Тонкая структура высокого порядка в состоянии $a^4\Pi_u$ иона O_2^+ . Higher-order fine structure of the $a^4\Pi_u$ state of O_2^+ . Brown J. M., Milton D. J., Watson J. K. G., Zare R. N., Albritton D. L., Horani M., Rostas J. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 139—151 (англ.)

Спектр

Показано, что качество расчетного воспроизведения положения линий полосы (4,4) перехода $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ иона O_2^+ может быть значительно улучшено путем включения в эффективный гамильтониан терма тонкой структуры вида $L_z S_z^3$ для состояния $a^4\Pi_u$, где L_z и S_z — проекции полного орбитального и спинного углового моментов на межъядерную ось соответственно. Отмечено, что попытки интерпретации величин параметров состояния $a^4\Pi_u(O_2^+)$ оказались безуспешными из-за отсутствия надежных данных о свойствах других электронных состояний иона O_2^+ . Библи. 21. М. Т.

Ф. 1982, 18, NS.

O_2^+

Ommuck 12825

1981

95: 177877d Higher-order fine structure of the $\alpha^4\Pi_u$ state of diatomic oxygen($1+$) ion. Brown, J. M.; Milton, D. J.; Watson, J. K. G.; Zare, R. N.; Albritton, D. L.; Horani, M.; Rostas, J. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl. SO9 5NH). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 90(1), 139-51 (Engl). The quality of the fit of frequencies for the (4, 4) band of the $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ transition of O_2^+ , obtained in an ion-beam expt., can be significantly improved by the inclusion of a fine structure term of the form $L_z S_z$ in the effective Hamiltonian for the $\alpha^4\Pi_u$ state, where L_z and S_z are, resp., the components of the total orbital and spin angular momenta along the internuclear axis. The various contributions to this term in the Hamiltonian were assessed from a general standpoint by the use of a new order-of-magnitude scheme. The sep. contributions to the parameter involved, η , are then considered in detail by means of a perturbation treatment of the spin-orbit and spin-spin interactions through 3rd order. Attempts to interpret the parameter values detd. for the $\alpha^4\Pi_u$ state of O_2^+ are severely limited by the present lack of detailed knowledge of the properties of the various electronic states of O_2^+ .

 $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ C. A. 1981, 95, N20.

O_2^+

оттиски 11575

1981

21 Б128. Влияние автоионизации на колебательные коэффициенты ветвления и угловое распределение фотоэлектронов при фотоионизации молекул. Образование основного состояния O_2^+ при возбуждении излучением с длинами волн от 574 до 600 А. Codling K., Parr A. C., Ederer D. L., Stockbauer R., West J. B., Cole B. E., Dehmer J. L. The effects of autoionisation on vibrational branching ratios and photoelectron angular distributions in molecular photoionisation: the formation of the ground state of O_2^+ between 574 and 600 А. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 4, 657—666 (англ.)

С использованием синхротронного излучения в качестве источника возбуждения в диапазоне длин волн $\lambda = 574-600$ А измерены фотоэлектронные спектры O_2 в

ача.
иктер

Х.М. 1981

фотоэл.
спектр

области образования основного состояния $X^2\pi_g O_2^+$. Высокое разрешение позволило получить колебательную структуру и определить парц. сечения фотоионизации σ_ν и параметры асимметрии углового распределения фотоэлектронов β_ν ($\nu=0-5$ нумерует колебательные уровни состояния $X^2\pi_g$). Для калибровки спектров использовались Ag и Xe. Зависимость $\sigma_\nu(\lambda)$ имеет максимумы при $\lambda=594,3$ и $589,0$ Å, что соответствует положению компонент $\nu'=0$ и $\nu'=1$ ридберговского состояния $(2\sigma_u)^{-1}3s\sigma$ молекулы O_2 (серия сходится к $c^4\Sigma_g^-$ -состоянию O_2^+). Отмечено, что полное сечение фотопоглощения имеет в этих точках минимумы. На этом основании предсказаны сильные резонансы для одного или нескольких других электронных состояний O_2^+ . Получено хорошее соответствие с результатами др. эксперим. исследований с использованием линейчатых источников возбуждения. Параметры β_ν также сильно зависят от λ в исследованной области, а при фиксированной λ значения β_ν для различных ν сильно отличаются. Проведено детальное сопоставление с лит. данными для возбуждения He-I ($\lambda=584$ Å).

М. Гофман

O_2^+

[Отмеч 12938]

1981

эмиссион.
спектр

Cossart D.,

J. chim. phys., 1981,
78(9), 703-709.

O_2^+

Оттиск 12261

1981

1 Д589. Новые оптически запрещенные ридберговские серии, сходящиеся к пределу $c^4\Sigma_u^-$ иона O_2^+ . A new, optically forbidden Rydberg series in O_2 converging to the $O_2^+ c^4\Sigma_u^-$ limit. Dillon M. A., Spence David. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6070—6074 (англ.)

$\xi_i, m.n;$

В области 16—26 эВ получены спектры энергетич. потерь электронов при рассеянии на молекулах газообразного кислорода. Энергия электронов в исходном пучке варьировалась в пределах 75—400 эВ, рассеянные электроны регистрировались под малыми углами (2° и 12°). Помимо полос, хорошо согласующихся с данными оптич. спектроскопии поглощения, обнаружены 4 новые, оптически запрещенные (положение максимумов в электронвольтах): 21,85; 23,30; 23,80 и 24,06. Для этой ридберговской серии, сходящейся к состоянию $c^4\Sigma_u^-(O_2^+)$, рассчитана величина квантового дефекта (0,75) и установлена квантовая номенклатура $pr\sigma_u^3\Sigma_g^-,$ где $n=3, 4, 5$ и 6. Библ. 25. М. Т.

ф. 1982, 18, №1.

O_2^+

Оттиск 11813 1981

12 Д315. О дальнедействующих эффектах спин-орбитальной связи в молекулярной динамике: диссоциация и преддиссоциация O_2^+ . On long-range spin-orbit coupling effects in molecular dynamics: O_2^+ dissociation and predissociation. D u r g J e a n. «Chem. Phys.», 1981, 59, № 3, 351—363 (англ.)

диссоциация
и преддиссо-
циация.

Обсуждается механизм диссоциации и преддиссоциации при фотовозбуждении O_2^+ и рассчитываются т. наз. соотношения ветвления (относит. вероятности) распада различных молекулярных состояний O_2^+ в определенные компоненты мультиплета атома O (3P_2 , 3P_1 , 3P_0). Считается, что основные переходы внутри компонент тонкой структуры происходят на средних $4,3 \leq R \leq 7$ а. е. или больших расстояниях $R > 7$ а. е., где производится полуколичеств. анализ спин-орбитальной связи. Найдено полуколичеств. согласие рассчитанных заселенностей компонент мультиплета O(3P_0) с экспериментальными.

А. Зембеков

Ср. 1981, 18, N 12.

O_2^+

1981
Gemmell D., et al.

rev; $2e$

IEEE Trans. Nucl. Sci.
1981, 28, N2, 1168-1173.

●
(an. H_2^+ ; III)

O_2^+

1 Ommuck 18408

1981

Kb. dell.
pract

Gollisch H.,

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

● 4457-4467.

Оттиски 11643 1981

O_2^+

20 Б1358. Преддиссоциационная спектроскопия O_2^+ : переходы $a^4\Pi_u(v''=6-11) \rightarrow b^4\Sigma_g^-(v'=5-9)$. Нап- sen J. C., Grafg M. M., Moseley J. T., Cos- by P. C. Predissociation spectroscopy of O_2^+ : $a^4\Pi_u(v''=6-11) \rightarrow b^4\Sigma_g^-(v'=5-9)$. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2195—2200 (англ.).

преддиссо-
циация

На фотофрагментном спектрометре с коаксиальными лучами — ионным и лазерным (перестраиваемый лазер на красителе непрерывного действия) — при разреше-нии 0,25 Å зарегистрированы спектры преддиссоциации в полосе (5,6), (5,7), (6,7), (6,8), (7,8), (7,9), (8,9), (8,10) и (9,11) перехода $O_2^+(a^4\Pi_u \rightarrow b^4\Sigma_g^-)$, где пред-диссоциирующим является верхнее b -состояние. В опы-тах регистрировали выход фотофрагментных ионов O^+ в зависимости от энергии фотонов. Это первое надеж-ное наблюдение преддиссоциации из b -состояния при $v' \geq 6$. Определены величины кантов колебат. полос и значения термов. Найдено, что величины колебат. тер-мов для высоких колебат. уровней несколько отлича-ются от значений, полученных в расчетах на основании определенных ранее коэффициентов Данхэма.

X.20.1981

В. Е. Скурат

Оттиск 11643 1981

O_2^+

10 Д424. Преддиссоциационная спектроскопия O_2^+ : $a^4\Pi_u (v'=6-11) \rightarrow b^4\Sigma_g^- (v'=5-9)$. Predissociation spectroscopy of O_2^+ : $a^4\Pi_u (v'=6-11) \rightarrow b^4\Sigma_g^- (v'=5-9)$. Hansen J. C., Graff M. M., Moseley J. T., Cosby P. C. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2195-2200 (англ.)

преддиссоц.

Полосы (5,6), (5,7), (6,7), (6,8), (7,8), (7,9), (8,9), (8,10) и (9,11) перехода $O_2^+ (a^4\Pi_u \rightarrow b^4\Sigma_g^-)$, где все уровни верхнего состояния $b^4\Sigma_g^-$ преддиссоциированы, исследованы с разрешением 0,25 Å методом ионной фотофрагментарной спектроскопии с использованием коаксиальной геометрии ионного и лазерного пучков. Определены значения соответствующих термов. Установлено, что значения термов для высоких колебательных уровней несколько отличаются от рассчитанных с использованием ранее определенных коэф. Данхема. Отмечено, что полученные данные должны упростить анализ спектров высокого разрешения, которые авторы намерены исследовать с целью уточнения значений молекулярных постоянных и выяснения механизма преддиссоциации состояния $O_2^+ (b^4\Sigma_g^-)$. Библ. 20.

В. С. Иванов

р. 10. 1981

DMICK 11643

1981

O_2^+

94:129746t Predissociation spectroscopy of molecular oxygen(+): $a^4\Pi_u(v'' = 6-11) \rightarrow b^4\Sigma_g^-(v' = 5-9)$. Hansen, J. C.; Graff, M. M.; Moseley, J. T.; Cosby, P. C. (Phys. Dep., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(4), 2195-2200 (Eng). Moderate-resoln. spectra ($\Delta\lambda \approx 0.25 \text{ \AA}$) were obtained for the (5,6), (5,7), (6,7), (6,8), (7,8), (7,9), (8,9), (8,10), and (9,11) bands of the transition $O_2^+ (a^4\Pi_u \rightarrow b^4\Sigma_g^-)$, where the upper $a^4\Pi_u$ state levels are all predissocd. The study was made by observing the resulting O^+ photofragments using a coaxial beams photofragment spectrometer. The results are used to obtain values of the vibrational band origins and term values. The remaining mol. consts. are, within the resoln. of this work, consistent with calcs. based on previously detd. Dunham coeffs.

frequency

C.A. 1981 94 N16

O_2^+

Comma 11719

1981

Lefebvre - Brion H.,
et al.

from -
messengers

J. Chem. Phys., 1981, 74
(12), 6686 - 91.

O_2^+

1981

спектр
в матрице

12 Д100. Об использовании соответствующих орбиталей в расчетах матричных элементов переходов на неортогональных функциях. On the use of corresponding orbitals in the calculation of nonorthogonal transition moments. Lengsfeld Byron H., Jafri Jawed A., Phillips Donald H., Bauschlicher Charles W., Jr. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6849—6856 (англ.)

Предложено использовать переход к соответствующим МО для упрощения расчета матричных элементов переходов между электронными состояниями молекулы, волн. ф-ции которых представлены рядами конфигурац. взаимодействия (КВ) в неортогональных друг другу подпространствах МО. Переход к соответствующим МО возможен лишь при условии инвариантности энергии системы к такому преобразованию. Такая ситуация, например, реализуется в случае полного учета КВ на под-

24
(+1)

ф. 1981, 18, N 12. → OF

пространстве валентных орбиталей. По предложенной методике для молекул O_2^+ и OF рассчитаны элементы дипольных электронных переходов между низколежащими электронными состояниями, волн. ф-ции которых получены при полном учете КВ на валентных МО.

А. Дементьев



1981

 O_2^+ (~~1981~~)

22 Б1221. Изучение ионно-молекулярных полуреакций $O_2^+(\bar{a}^4\Pi_u, v) \dots (O_2)_m \rightarrow O^{+2m+1} + O$, $m=1, 2$ или 3 , с использованием метода фотоионизации молекулярного пучка. Linn S. H., Ono Y., Ng C. Y. A study of the ion-molecule half reactions $O_2^+(\bar{a}^4\Pi_u, v) \dots (O_2)_m \rightarrow O^{+2m+1} + Q$, $m=1, 2$, or 3 , using the molecular beam photoionization method. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 6, 3348—3352 (англ.)

Изучены процессы образования и стабильности кластерных ионов типа $(O_2)_m^+$ с $m=2, 3, 4$ и $(O_2)^{+2m+1}$ с $m=1, 2, 3$. Пт ионизации димера $(O_2)_2^+$ составляет $11,68 \pm 0,03$ эВ. Рассчитана величина энергии связи иона $(O_2)_2^+$, к-рая равна $0,42 \pm 0,03$ эВ. Сравнением спектров эффективности фотоионизации для ионов O_2^+ и $(O_2^+)_m$ ($m=2, 3, 4$) показано, что возбужденные димерные комплексы $O_2^*(n, v) (O_2)_m$ ($m=1, 2, 3$), образующиеся в этой области длин волн, почти пол-

(7; A.P.)

7 (+5)

X. 1981/222/9AB X см. на обороте

ностью диссоциируют, и, следовательно, кластерные
 ионы образуются, гл. обр., в прямом фотоионизацион-
 ном процессе — $(O_2)_m + h\nu \rightarrow (O_2)_m^+ + c$ ($m=2, 3, 4$).
 Обнаружено, что ионы O_3^+ , O_5^+ и O_7^+ образуются в
 основном в результате диссоциации ионов $O_2^+ \cdot$
 $(\tilde{a}^4\Pi_u, v) \cdot O_2$, $O_2^+(\tilde{a}^4\Pi_u, v) \cdot (O_2)_2$ и $O_2^+(\tilde{a}^4\Pi_u, v) \cdot$
 $(O_2)_3$ соотв. Энергии появления ионов O_3^+ и O_5^+ рав-
 ны $16,66 \pm 0,03$ эВ ($744 \pm 1,5$ А) и $16,41 \pm 0,06$ эВ ($755,5 \pm$
 ± 3 А) соответственно.

В. А. Сараев

O_2^+

Amman 10989

1981

Miner B.F.; et al.

кв. мет.
фракт,
μ

Collect. Czech. Chem. Commun.
1981, 46, 179-193

Calculations of Quartet State
Spectra for ● diatomic species...
(cm. NO; ii) (cm CF; iii)

O_2^+

1981

по темиз.
Кривые

1 Д648. Спектроскопические лазерные исследования молекулярных ионов с использованием фотофрагментарной спектроскопии быстрых ионных пучков. Laser spectroscopic studies of molecular ions using fast ion beam photofragment spectroscopy. Moseley J. T. Proceedings of the Sixth Conference on the Application of Accelerators in Research and Industry, Denton, Tex., Nov. 3-5, 1980, — «IEEE Trans. Nucl. Sci.», 1981, 28, № 2, 1190-1193 (англ.)

В обзоре рассмотрены эксперим. техника и возможности лазерной спектроскопии быстрых молекулярных ионов в сочетании с фотофрагментарной спектроскопией. На примере исследования быстрых ($E_{кин} = 3000$ в) ионов O_2^+ показано, как можно получать информацию о-потенц. кривых чисто отталкивательных, квазисвязанных и связанных состояний молекулы. Особенное внимание уделено изучению процессов фотопреддиссоциации двухатомных молекул. Библ. 20. Ю. В. Чижев

фр. 1982, 18, 41.

1981

ommuck	11750
ommuck	12467

 $^{16}\text{O}_2^+$ $^{12}\text{O}_2^+$ $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$

195: 70376n Band analysis of the A-X transition in oxygen ($^{16}\text{O}_2^+$ and $^{18}\text{O}_2^+$) molecules. Pesic, D. S.; Rakotoarijimy, D.; Weniger, S. (Inst. Nucl. Sci., Belgrade, Yugoslavia). *Astrophys. J., Suppl. Ser.* 1981, 45(3), 507-15 (Eng). Using a low-pressure hollow cathode discharge cooled by liq. N the bands of the second neg. system A-X of $^{16}\text{O}_2^+$ and $^{18}\text{O}_2^+$ was obtained in emission between 4800 and 2600 Å. The vibrational anal. of the band heads of $^{18}\text{O}_2^+$ photographed with high-resolu. spectrograph; was consistent with the expected isotope shift. The rotational anal. yields preliminary values of mol. consts. and of band origins. The final values were obtained by the least-squares fitting technique of R. N. Zare et al. (1973). Rotational anal. was carried out on (3-4), (2-5), (2-6), and (1-12) bands of $^{16}\text{O}_2^+$ and on (1-8), (0-6), and (2-6) bands of $^{18}\text{O}_2^+$ mol. Mol. consts. for lower $X^2\Pi_g$ and upper $A^2\Pi_u$ electronic states are reported.

CA 1981, 95, N8

O_2^+

1981

Спектр

23 Б149. Теоретическое исследование резонансов формы в парциальных сечениях фотоионизации для состояний $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$ иона O_2^+ . Raçeev G., Lefebvre-Brion H., Le Rouzo H., Roche A. L. Theoretical study of shape resonances in the partial photoionization cross sections for the $b^4\Sigma_g^-$ and $B^2\Sigma_g^-$ states of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6686—6691 (англ.)

В рамках метода ССП МО ЛКАО рассчитаны сечения $3\sigma_g$ -ионизации молекулы O_2 . Для начальных и конечных состояний фотоионизации использовалось одноконфигурац. приближение. Волновая функция конечного состояния в непрерывном спектре находилась в одноцентровом приближении статич. обмена. Расчеты сечений ионизации для состояний $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$ иона O_2^+ проводились для различных значений межъядерно-

X. 1981, 19, № 23.

го расстояния R и усреднялись по R . В сечениях ионизации состояний $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$ установлено наличие резонансов формы, лежащих на 3 и 2,5 эВ соотв., выше порогов ионизации соответствующих состояний. Варьирование Пт иона O_2^+ показало, что резонанс в $^4\Sigma_g^-$ -канале ионизации имеет молекулярное, а не атомное происхождение. Данные проведенных расчетов согласуются с эксперим. сечениями ионизации для состояния $B^2\Sigma_g^-$ и параметром асимметрии β для состояния $b^4\Sigma_g^-$. Обсуждены причины большой ширины резонанса в сечении $^4\Sigma_g^-$ -ионизации и дана интерпретация эксперим. данным по сечениям σ_g -ионизации. Отмечено, что точный ответ о структуре сечений σ_g -ионизации м. б. получен только при учете верхних ридберговских и автоионизац. ридберговских состояний в O_2^+ .

И. А. Тополь



O_2^+

1981

(cncmp)

/ 95: 15669k Theoretical study of shape resonances in the partial photoionization cross sections for the $b^4\Sigma_g^-$ and $B^2\Sigma_g^-$ states of molecular oxygen(+). Raseev, G.; Lefebvre-Brion, H.; Le Rouzo, H.; Roche, A. L. (Dep. Chim. Gen. Phys., Univ. Liege, B-4000 Liege, Belg.). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(12), 6686-91 (Eng). By using the single-center static-exchange approxn., the $3\sigma_g$ photoionization cross section of O_2 was calcd. The R -averaged results were obtained for the prodn. of O_2^+ in the $b^4\Sigma_g^-$ and $B^2\Sigma_g^-$ states. Shape resonances, a few eV wide, were found at 3 and 2.5 eV from the threshold for these 2 states, resp. Reasonable agreement was found with the exptl. cross sections for the $B^2\Sigma_g^-$ state and with the β values for the $b^4\Sigma_g^-$ state. For this last state, comparison between theory and expt. leads to a possible integration of the data, but a definite answer can not be given without taking into account the autoionized Rydberg states.

C.A. 1981, 95, N2.

O_2^+

1981

ф-ии не-
прерывного
спектра,
резонанск,
сечения.

12 Д314. Теоретическое исследование роли резонансов формы в парциальных сечениях фотоионизации, приводящей к образованию $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$ состояний O_2^+ . Theoretical study of shape resonances in the partial photoionization cross sections for the $b^4\Sigma_g^-$ and $B^2\Sigma_g^-$ states of O_2^+ . Raşeev G., Lefebvre-Brion H., Le Rouzo H., Roche A. L. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6686—6691 (англ.)

Исследуется роль резонансов формы в парциальных сечениях фотоионизации $3\sigma_g$ молекулярной орбитали O_2 , приводящей к образованию $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$ состояний O_2^+ . Используется т. наз. одноцентровое статич. приближение с обменом, которое по существу является атомным расчетом по методу сильной связи, причем смешивание различных парциальных волн вызывает потенциал взаимодействия, имеющий симметрию молекулы (или иона). Кроме того, при определении ф-ций непре-
ка 7

ф. 1981, 18, N 12.

рывного спектра используются два приближения: а) для представления связанных орбиталей начального и конечного состояний применяются одни и те же ф-ции; б) матричные элементы переходов в $^4\Sigma_g^-$ и $^2\Sigma_g^-$ состояния рассчитываются с одинаковыми ф-циями непрерывного спектра. Усреднение по колебательной координате производится с колебательными ф-циями, полученными численным решением уравнения Шредингера с потенциалом РКР для $X^3\Sigma_g^-$ и $b^4\Sigma_g^-$ состояний и потенциалом Морзе для $B^2\Sigma_g^-$ -состояния. Найдены резонансы формы шириной в несколько электронвольт, лежащие на 3 и 2,5 эВ выше порога образования $^4\Sigma_g^-$ и $^2\Sigma_g^-$ состояний соответственно. Рассчитанные сечения для $^2\Sigma_g^-$ состояния хорошо согласуются с экспериментальным. Для $^4\Sigma_g^-$ состояния теоретич. интерпретация не совсем однозначна, поскольку она требует учета автоионизационных ридберговских состояний, однако рассчитанное значение параметра асимметрии β хорошо согласуется с эксперим. величиной. А. А. Зембеков

O_2^+

1981

Ramakrishna Rao
T. V. et al.

(No.)

J. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Trans-
fer., 1981, 25, v3,
295-298.

(see MgO; III).

O_2^+

? Roch O

Anne-Lise et al

1981

спектр;
сечение
фотоиониз.

J. Electron. Spectrosc. and
Relat. Phenom., 1981, 22,
N 3-4, 223-235.

● (see O_2) III

O_2^+

Оттиск 11844

1981

1 Д588. Использование моделей MCSCF для расчета спектроскопических постоянных некоторых низлежащих состояний O_2^+ . On the application of MCSCF models for the calculation of spectroscopic constants for several low lying states of O_2^+ . Rutting Paul J. A., Van Lenthe Joop H. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 10, 5785—5793 (англ.)

Исследованы свойства волн. ф-ций иона O_2^+ , рассчитанных многоконфигурац. ССП-методом и методом с ограниченным конфигурац. взаимодействием. Получены значения спектроскопич. постоянных пяти низлежащих состояний иона O_2^+ ($^2\Pi_g$, $^4\Pi_u$, $^2\Pi_u$, $^2\Phi_u$ и $^4\Sigma_g^-$), хорошо согласующиеся с экспериментальными. Библ. 27.
В. С. Иванов

М.П., Σ_i

ср. 1982, 18, 41

O_2^+

Оттиск 11844

1981

24 Б29. О применении многоконфигурационного метода ССП для вычисления спектроскопических постоянных нескольких низлежащих состояний O_2^+ . Rutting Paul J. A., van Lenthe Joop H. On the application of MCSCF models for the calculation of spectroscopic constants for several low lying states of O_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 10, 5785—5793 (англ.)

М.Л;

На примере молек. иона O_2^+ изучены св-ва волновых функций (ВФ) многоконфигурац. метода ССП и ограниченного метода конфигурац. взаимодействия (КВ). Изучены ВФ двух типов, соотв-щих методам МО и валентных схем (ВС). При построении ВФ МО-типа в кач-ве исходной ВФ для отбора конфигураций использовалась наиболее простая функция, приводящая к правильному диссоциац. пределу в миним. базисе. Найдено, что ВФ ВС-типа в области межъядерных расстояний $1,5 < R \leq 2,5$ ат. ед. имеет неправильную сим-

Х. 1981, 19, №24.

метрию, отвечающую группе $C_{\infty v}$. Многоконфигурац. методом ССП с ВФ МО-типа в двухэкспонентном базисе, содержащем поляризац. функции, рассчитаны потенциальные кривые и спектроскопич. постоянные R_e , D_e , ω_e и T_e для восьми нижних состояний иона O_2^+ . Найдено, что этот метод в случае состояний ${}^4\Pi_u$ и ${}^4\Sigma_g^-$ приводит к неточным результатам. Спектроскопич. постоянные для этих состояний рассчитаны методом КВ с ВФ ВС-типа. Результаты расчетов сравнены с эксперим. результатами, В. Б. Павлов-Веревкин.



O_2^+

Ommuck 11844

1981

95: 15258a On the application of MCSCF models for the calculation of spectroscopic constants for several low lying states of diatomic oxygen cation. Ruttink, Paul J. A.; Van Lenthe, Joop H. (Theor. Chem. Group, State Univ. Utrecht, Utrecht, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(10), 5785-93 (Eng). The behavior of multiconfiguration SCF (MCSCF) and restricted CI wave functions were investigated for the case of a homonuclear pos. diat., i.e., O_2^+ . Both MO and orthogonalized valence bond (VB) models were used. In the MO model, the normal symmetry restrictions ($D_{\infty h}$) were imposed on the orbital while these were lifted in the VB model, thus permitting a more correct behavior on dissocn. By using He_2^+ as a prototype system, the customary partitioning of the MO configuration set into subsets corresponding to proper dissocn., mol. extra correlation, and at. correlation was examd. When the orbitals are optimized, this partitioning is no longer valid, i.e., at. correlation cannot be excluded. For O_2^+ , the proper dissocn. function in the MO model is rather unwieldy. This arises because allowance must be made for the difference between the AO's of O and O^+ . The much simpler base wave function was used which corresponds to a correct dissocn. limit.

Kb. Mex.
p a c r e m

C. A. 1981, 95, N2.

n in a minimal basis set. The VB model does not suffer from these difficulties. However, due to the absence of symmetry restrictions, there is a symmetry breakdown in the VB calcn. in the range $1.5 < R < 2.5$ Å caused by a transition from $D_{\infty h}$ symmetry in the equil. conformation to effective $C_{\infty v}$ symmetry for $R = \infty$. Spectroscopic consts. of 4 of the 5 lowest lying states., $^2\Pi_g$, $^4\Pi_u$, $^2\Pi_u$, and $^2\Phi_u$, via MO-MCSCF calcns. were calcd. using the base wave function augmented by all valence shell (2p) configurations of the correct symmetry.

O_2^+

1981

Smith O. J., et al.

J. Chem. Phys., 1981, 74,
N 12, 6777 - 6783.

A.P.

● (cur. SO_2^+ ; III)

O₂

1981

1 Д608. Исследование O₂ ³Π_g(V) валентного и ³Π_g(R) ридберговского состояний в континууме Шумана—Рунге по энергетическим спектрам рассеянных и выбитых электронов. Studies of the O₂ ³Π_g(V) valence states and ³Π_g(R) Rydberg state in the Schumann—Runge continuum from ejected and scattered electron spectra. Spence David. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 7, 3898—3904 (англ.)

Спектр

В области 7—10 эВ получены спектры электронных потерь при электронном ударе O₂. Установлено, что 2 процесса дают вклад в спектры — рассеяние электронов при возбуждении ридберговского состояния ³Π_g(R) и автоионизационный распад резонансов Фешбаха с образованием O₂ в состоянии ³Π_g(V) и испусканием электронов. Путем детального анализа полученных данных показано, что франк-кондоновская зона валентного состояния O₂ ³Π_g(V) простирается в энергетич. диапазоне всего на 0,20 эВ. Это противоречит теоретическим

ср. 1982, 18, N1

и полученным ранее эксперим. данным. Определены ф-ции эффективного возбуждения четырех колебательных уровней состояния $O_2 \ ^3\Pi_g(R)$. Установлено, что из многочисленных O_2 -*-резонансов Фешбаха в этой области только один распадается с образованием состояния $\ ^3\Pi_g(R)$. Библ. 27. Ю. В. Чижов



Отмисл 12319

1981

2 Д786. Исследование автоионизации по спектрам возбуждения флуоресценции $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ и $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$. Autoionization observed in the $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ and $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$ fluorescence excitation spectra. Tabché-Fouhaile Abdallah, Nenner Irène, Guyon Paul-Marie, Delwiche Jacques. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 3, 1129—1138 (англ.)

При помощи методики возбуждения флуоресценции синхротронным излучением получены с высоким разрешением (0,2 Å) парциальные сечения фотоионизации $O_2^+(b^4\Sigma_g^-$ и $A^2\Pi_u)$ в спектральной области 450—750 Å. Измерено также полное сечение фотоионизации O_2 . Показано, что тонкая структура в спектрах возбуждения флуоресценции обусловлена автоионизацией ридберговских состояний. При $\lambda=650$ Å парциальное сечение фотоионизации $b^4\Sigma_g^-$ резко увеличивается; при $\lambda=620$ Å наблюдается интенсивная, хорошо разрешенная колебательная структура. Эти особенности трактуются авторами как $3\sigma_g \leftarrow \sigma_u$ — резонансы, связанные с выбросом $3\sigma_g$ -электрона. Библ. 48. Ю. В. Чижов

O₂⁺

м.п;

ф. 1982, 18,
N2.

O₂⁺

Омиск 12319

1981

4 B225. Автоионизация, наблюдаемая в спектрах возбуждения флуоресценции $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ и $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$. Tabché-Fouhaile Abdallah, Nenner Irène, Guyon Paul-Marie, Delwiche Jacques. Autoionization observed in the $O_2^+(A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ and $O_2^+(b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u)$ fluorescence excitation spectra. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 3, 1129—1138 (англ.)

Спектр;

X. 1982,
19, № 4

Методом возбуждения флуоресценции с высоким разрешением измерены парц. и полное сечения фотоионизации кислорода в диапазоне 450—750 Å. Использовалось монохроматизированное излучение синхротронного источника. Регистрировалось излучение иона O_2^+ в области переходов $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$ (2500—5000 Å) и $b^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$ (5000—8000 Å). Измерены коэф. ветвления фотоионизации O_2^+ в зависимости от энергии. Фотоионизация $3\sigma_g$ -электрона приводит к очень узким резонансам, к-рые появляются в непрерывной части спектра в случае $b^4\Sigma_g^- \leftrightarrow \sigma_u^3\Sigma_u^-$ резонанса по форме и в дискретной части спектра в случае $B^2\Sigma_g^- \leftrightarrow \sigma_u^3\Sigma_u^-$. Эти резонансы сильно взаимодействуют с рид-

берговскими сериями той же симметрии. Предполагается, что локализованный характер функций $\Sigma\sigma_u$ континуума, связанного с фотоионизацией $3\sigma_g$ электрона в O_2 , обуславливает такие основные особенности спектра для одно- и двухэлектронных процессов выше порога возбуждения состояния $b^4\Sigma_g^-$ как: большое сечение $3\sigma_g \rightarrow \Sigma\sigma_u$, сильную автоионизацию в континуумы b и $B\Sigma_u$ и резонансы по форме.

В. М. Ковба

O_2^+

1981

1 Д344 Д. Изучение эффективных сечений фотоионизации некоторых простых молекул с помощью синхротронного излучения в области энергий 10—35 эВ.
Etude des sections efficaces partielles de photoionisation de quelques molécules simples dans le domaine d'énergie 10 à 35 eV obtenus à partir du rayonnement synchrotron. Tabche-Fouhale A. Thèse doct. sci. phys. Univ. Paris, Sud, 1981. 210 p., ill. (фр.)

спектр,
ионизация
фотоионизация

Содержание диссертации. 1. Введение. Прямая ионизация. Автоионизация. Фотоэлектронная спектроскопия. Флуоресценция ионов. 2. Изучение профиля автоионизации. Применение к серии Ридберга, сходящейся к состоянию $c^4\Sigma_u-O_2^+$. Анализ профиля резонанса по полному и парциальному эффективному сечению. 3. Автоионизация, наблюдаемая в $O_2^+(A^2\Pi_u-X^2\Pi_g)$ и $O_2^+(b^4\Sigma_g^--a^4\Pi_u)$. Спектры флуоресценции. 4. Спектры флуоресценции $N_2^+(A\rightarrow X)$ и $(B\rightarrow X)$ при фотонном

(+2)

фр. 1983, 18, N1

H_2O, H_2O^+, CS_2

ударе. 5. Парциальные сечения ионизаций для $A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+$ -состояний CO^+ в области энергий 16—38 эВ.
6. Трехатомные молекулы H_2O . Диссоциация $OH(A^2\Sigma^+) + H(1S)$. Возбуждение состояния $A^2A_1H_2O^+$. Молекула CS_2 . Области возбуждения: 1000—1400, 850—1000, 760—860 и 350—760 Å. Библ. 35. Г. К.

O₂

1981

6 Б18. Самосогласованный, линеаризованный метод присоединенных плоских волн с потенциалом общего типа для расчетов электронного строения молекул и поверхностей: молекула O₂. Wimmer E., Weinert M., Krakauer H., Freeman A. J. Full-potential self-consistent linearized-augmented-plane-wave method for calculating the electronic structure of molecules and surfaces: O₂ molecule. «Phys. Rev. B. Condens. Matter», 1981, 24, № 2, 864—875 (англ.)

расчет

Линеаризованный метод присоединенных плоских волн (ЛМППВ), развитый ранее для описания электронного строения тонких пленок, обобщен с учетом рассмотрения самосогласованного Пт общего вида (без использования приближения маффин-тин). Предложена новая схема решения уравнения Пуассона, позволяющая эффективно использовать представление обобщенного потенциала (ОП) в ЛМППВ. В ЛМППВ при построении матричных элементов гамильтониана полностью учитывались все вклады от несферич. компонент ОП. Точность ЛМППВ с ОП продемонстрирована на примерах расчетов электронной плотности и спектра

X. 1982, 19, № 6.

собств. значений невзаимодействующих молекул O_2 , помещенных в бесконечную гексагон. решетку с расстоянием между соседними молекулами 6,846 ат. ед. Показано, что точность расчета электронной плотности и собств. значений O_2 в ЛМППВ превышает точность расчета соотв-щих величин дискретным вариационным методом (ДВМ) с базисом ЛКАО. При этом хорошее соответствие между результатами ДВМ и ЛМППВ м. б. достигнуто при добавлении в базис ЛКАО в ДВМ нескольких десятков базисных ф-ций, центрированных на связях ЛМППВ предназначен для расчетов электронного строения Пв полупроводников, Пв раздела фаз и молекул, адсорбированных на Пв металлов. И. А. Т.

O_2^+

1982

12 Д303. Предиссоциация молекулярных катионов кислорода $^{16}O_2^+$ и $^{18}O_2^+$, исследуемая методом спектроскопии совпадения фотоэлектрон — фотоион. Predissociation of the molecular oxygen cations $^{16}O_2^+$ and $^{18}O_2^+$ studied by photoelectron — photoion coincidence spectroscopy. Bombach Rolf, Schmelzer Andreas, Stadelmann Jean-Pierre. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1982, 43, № 2—3, 211—225 (англ.)

М.П;

Измерены отношения интенсивностей для фрагментации молекулярных катионов $^{16}O_2^+$ и $^{18}O_2^+$: $O_2^+ \rightarrow O^+ + O$ (4S) + $O(^3P)$ (1) и $O_2^+ \rightarrow O^+ + O(^1D)$ (2), полученных сначала в колебательных состояниях $\bar{b}^4\Sigma_g^- - v = 0 \div 5$ и $\bar{B}^2\Sigma_g^- - v = 0 \div 5$ при фотоионизации. В эксперименте использован метод спектроскопии совпадения фотоэлектрон — фотоион с разрешением, достаточным для выделения колебательных структур электронных

р. 1982, 18, № 2

состояний $b^4\Sigma_g^-$ и $\bar{B}^2\Sigma_g^-$ обоих изотопов. Пороговые энергии составляли 18,7334 эВ ($^{16}\text{O}_2$) и 18,7390 эВ ($^{18}\text{O}_2$) для реакции (1) и 20,7008 эВ ($^{16}\text{O}_2$) и 20,7064 эВ ($^{18}\text{O}_2$) для реакции (2). Отношения интенсивностей, полученных из $\bar{b}^4\Sigma_g^-$ -состояния O_2^+ , показывают, что $\sim 90\%$ ровибронных уровней (за исключением $v=4$ для $^{18}\text{O}_2^+$), расположенных над порогом для реакции (1), подвергается преддиссоциации. Из состояния $\bar{B}^2\Sigma_g^-$ катионы кислорода фрагментируют преимущественно через реакцию (1). Приводятся новые данные для электронного состояния $\bar{b}^4\Sigma_g^-$ иона $^{18}\text{O}_2^+$.

И. Флакс



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

1982

преддиссоциация

1724 Б118. Изучение преддиссоциации молекулярных катионов кислорода $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{18}\text{O}_2^+$ методом спектроскопии фотоэлектрон-фотоионных совпадений. Vom-bach R., Schmelzer A., Stadelmann J. P. Predissociation of the molecular oxygen cations $^{16}\text{O}_2^+$ and $^{18}\text{O}_2^+$ studied by photoelectron-photoion coincidence spectroscopy. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1982, 43, № 2—3, 211—225 (англ.)

Измерены спектры фотоэлектрон-фотоионных совпадений с возбуждением He—I α для процессов фрагментации молек. катионов $^{16}\text{O}_2^+$ и $^{18}\text{O}_2^+$ в электронных состояниях $b^4\Sigma_g^-$ и $b^2\Sigma_g^-$ с колебательными квантовыми числами $v=0-5$. Детально описана процедура эксперим. определения трансмиссионного коэф. масс-анализатора для ионов O_2^+ и O^+ энергий от 0 до 1,1 эВ. На основе полученных результатов рассчитаны коэф. ветвления (b) для конкурирующих процессов: радиац. распада $^{16}\text{O}_2^+(b^4\Sigma_g^-) \rightarrow ^{16}\text{O}_2^+(\bar{a}^4\Pi) + h\nu$ и преддиссоциации $^{16}\text{O}_2^+(b^4\Sigma_g^-, v \geq 3) \rightarrow ^{16}\text{O}^+(^4S) + ^{16}\text{O}(^3P)$.

X. 1982, 19, N 24

Найденные значения b хорошо согласуются с лит. данными при всех v . Впервые получены данные для этих же каналов фрагментации ионов $^{18}\text{O}_2^+$. Наиболее заметный изотопный эффект обнаружен для состояния $b^4\Sigma_g^-$ $v=4$: значение b уменьшилось от 0,56 до 0,1. Найдено, что состояние $b^2\Sigma_g^-$ для обоих изотопов при $v < 3$ преддиссоциирует согласно р-ции: $\text{O}_2^+(b^2\Sigma_g^-) \rightarrow \text{O}^+(^4S) + \text{O}(^3P)$. При $v \geq 3$ к этому каналу фрагментации добавляется конкурирующая р-ция: $\text{O}_2^+ \rightarrow \text{O}^+(^4S) + \text{O}(^1P)$. Из полученных эксперим. данных определена зависимость величин b от v ($v \geq 3$), на основе анализа к-рой заключено, что потенциальная кривая состояния $b^2\Sigma_g^-$ при $v=4$ пересекается с др. потенциальной кривой (по-видимому, состояния $a^4\Pi_g$ иона O_2^+).

О. А. Басченко

O_2^+

1982

negueccou-
asue

97: 153437a Predissociation of the molecular oxygen cations $^{16}O_2^+$ and $^{18}O_2^+$ studied by photoelectron-photoion coincidence spectroscopy. Bombach, Rolf; Schmelzer, Andreas; Stadelmann, Jean Pierre (Phys. Chem. Inst., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1982, 43(2-3), 211-25 (Eng). Branching ratios for the fragmentation of $^{16}O_2^+$ and $^{18}O_2^+$ mol. cations initially prepd. in their $b^4\Sigma_g^- v = 0-5$ and $B^2\Sigma_g^- v = 0-5$ vibronic states by direct ionization are reported. For the $b^4\Sigma_g^- v = 0-5$ vibronic states of $^{16}O_2^+$, the extent of competition between the emission process $b^4\Sigma_g^- \rightarrow d^4\Pi_u$ and predissocn. is in good agreement with the literature. New data for the $b^4\Sigma_g^-$ electronic state of $^{18}O_2^+$ were obtained. The $v = 3-5$ vibrational levels of the $B^2\Sigma_g^-$ electronic state of both isotopic species decay competitively via the fragmentation channels $O^+(^4S) + O(^3P)$ and $O^+(^4S) + O(^1D)$. The suggestion that at the ionization energy of the $B^2\Sigma_g^- v = 4$ vibronic state of $^{16}O_2^+$ a curve-crossing between the $^2\Sigma_g^-$ and presumably a $^4\Pi_g$ potential curve takes place is corroborated.

C.A. 1982, 97, N18

O₂

[Ommuck 13388]

1982

кв. мех.
расчет

Carsky P., Srcek M., et al.,
Chem. Phys. Lett., 1982,
85, n1, 17-20.

O_2^+

1982

23 Б158. Спектроскопия оптико-оптического двойного резонанса молекулярных ионов. Cosby P. C., Helm H. Optical—optical double resonance spectroscopy of molecular ions. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4720—4724 (англ.)

спектр

Метод двойного оптич. резонанса (ДОР) использован при изучении структуры полос систем $b^4\Sigma_g^-$ ($v'=4$) — $a^4\Pi_u$ ($v''=5$) и $f^4\Pi_g$ ($v'=1, 2, 3$) — $a^4\Pi_u$ ($v''=5$) O_2^+ . Образующиеся при электронном ударе ионы O_2^+ последовательно пропускались через камеры I, II и III. При переходе из I в II и из II в III пучок ионов поворачивался на 90° с помощью двух квадрупольных полей. Излучение пробного перестраиваемого лазера пропусклось вдоль III параллельно пучку ионов и настраивалось на переход из связанного состояния $a^4\Pi_u$ ($v''=5$) на преддиссоциированные уровни состояния $b^4\Sigma_g^-$. Образующиеся фрагментарные ионы O^+ отделялись с помощью анализатора энергии и регистриро-

Х. 1982, 19, N 23

вались канальным электронным умножителем. Сканиру-
 емое по частоте излучение второго лазера пропуска-
 лось через II антипараллельно ионному пучку. При
 возбуждении им одно-, двух- или трехфотонных пере-
 ходов с меченного уровня ($a^4\Pi_u$, $v''=5$) в связанные
 или квазидискретные состояния иона или в область
 континуума заселенность меченного уровня понижа-
 лась. Авторам впервые удалось наблюдать переходы в
 подсостояния $f^4\Pi_g$ ($\Omega=1/2$, $v'=1$) и $f^4\Pi_g$ ($\Omega=-1/2$,
 $v=1$). Кратко рассмотрены преимущества и перспек-
 тивы применения метода ДОР в спектроскопии молек.
 ионов.

В. М. Ковба

O_2^+

1982

1 Д593. Спектроскопия молекулярных ионов. Индуцируемая лазером преддиссоциация O_2^+ . Spectroscopy of molecular ions: laser induced predissociation of O_2^+ . Frey R., Kakoschke R., Müller-Dethlefs K., Schlag E. W. «Z. Phys.», 1982, A 307, № 1, 25—29 (англ.)

С помощью перестраиваемого импульсного лазера на красителе исследован спектр преддиссоциации ионов O_2^+ (переход в $^4\Sigma_g^- \rightarrow a^4\Pi_u$ $\Delta v=3$, $\Delta v=2$). Подробно описан магнетронный источник ионов и детектор продуктов диссоциации. Спектральное разрешение установки составляло $0,4 \text{ см}^{-1}$. Проведено тщательное сравнение полученного спектра с рассчитанным численно с использованием ряда молекулярных констант. Получено хорошее совпадение положения и интенсивности вращательно-колебательных переходов в предположении, что вращательная т-ра ионного пучка составляет 300 К. Отмечен вклад в наблюдаемый спектр процессов прямой фотодиссоциации молекулярных ионов из состояний $^1\Pi_g$ или $^4\Sigma_g^+$. Библ. 28.

Х. В.

М.П.

фр. 1983, 18,
N 1

O_2^+

1982

20 Б1015. Оценка энергий диссоциации [двухатомных] молекул на основе спектроскопических данных.
Estimation of dissociation energies of diatomic molecules using spectroscopic data. Ghodgaonkar A. M., Raman K. «Acta phys. pol.», 1982, A61, № 1-2, 151-154 (англ.)

С использованием аналитич. ф-лы Таккара для представления потенциальной энергии двухатомной молекулы выведено выражение, связывающее энергию диссоциации со спектроскопич. постоянными ω_e , B_e и a_e . На основе эксперим. данных для этих постоянных вычислены энергии диссоциации след. молекул и ионов: O_2^+ , HBr^+ , NO^+ , CH^+ , H_2 , CH , CO^+ , HI , $NaAg$, XeF , NH . При сопоставлении полученных результатов с независимыми эксперим. оценками отмечена эффективность данного подхода. С найденными энергиями диссоциации оценены также Пт ионизации молекул CH , HBr , O_2 , NO , CO , H_2 , HI , NH , к-рые хорошо согласуются с эксперим. величинами (за исключением HBr).

А. В. Немухин

⊗ (40)

X. 1984, 19, № 20

расчет D_0

O_2^+

Ommuck 14794

1982

97: 117807n Lifetimes and predissociation mechanisms of dioxygenyl ion $b^4\Sigma_g^-(v = 5-8)$. Hansen, J. C.; Moseley, J. T.; Roche, A. L.; Cosby, P. C. (Chem. Phys. Inst., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(3), 1206-13 (Eng). Predissocn. linewidths (lifetimes) of the $O_2^+ b^4\Sigma_g^-$ state were measured as a function of both rotational levels N and spin-orbit fine structure components F_1, F_2, F_3 , and F_4 for vibrational levels 5 through 8. The lifetime variation is inconsistent with predissocn. by either the $d^4\Sigma_g^+$ state or the $f^4\Pi_g$ state alone, but can be explained by assuming both states participate in the dissocn. Anal. of the linewidth variation, using an exptl. detd. $F^4\Pi_g$ potential curve, allows a sepn. of the effects of the $d^4\Sigma_g^+$ and $f^4\Pi_g$ states on the predissocn. The exptl. linewidths are compared with theor. calcn. and are a factor of 3 larger than calcd. Relative transition moments from the a state to the d and f states were estd. using a single CI calcn.

$(b^4\Sigma_g^-(v))$

C.A. 1982, 97, 114

O_2^+

Оттиск 14794

1982

3 БУ362. Времена жизни и механизмы преддиссоциации O_2^+ ($b^4\Sigma_g^-$, $v=5-8$). Lifetimes and predissociation mechanisms of O_2^+ $b^4\Sigma_g^-$ ($v=5-8$). Hansen J. C., Moseley J. T., Roche A. L., Cosby P. C. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 3, 1206—1213 (англ.)

Методом фотофрагментной спектроскопии измерены преддиссоциац. ширины линий (времена жизни относительно преддиссоциации) иона O_2^+ ($b^4\Sigma_g^-$) в колебательных состояниях от $v=5$ до $v=8$ в зависимости от вращательного квантового числа (вплоть до $N''=31$) и от квантового числа компонента спин-орбитальной тонкой структуры F_1-F_4 . Найденные зависимости не удается интерпретировать на основании моделей преддиссоциации через состояния $d^4\Sigma_g^+$ или $f^4\Pi_g$ в отдельности. Однако их можно объяснить, предположив, что в преддиссоциации участвуют оба эти состояния. На основании вариаций ширин линий с использованием экспериментально найденной потенц. кривой состояния $f^4\Pi_g$ выделены вклады $d^4\Sigma_g^+$ - и $f^4\Pi_g$ -состояний в преддиссоциацию.

В. Е. Скурат

спектр,
преддиссоциация

X. 1983, 19, № 3

O_2^+

1982

У12 Д623. Исследование молекулярных ионов методом двойного оптического резонанса. Optical—optical double resonance spectroscopy of molecular ions. Cosby P. C., Helm H. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4720—4724 (англ.)

Метод двойного оптич. резонанса применен для исследования высоковозбужденных состояний молекулярного иона O_2^+ . Ионы O_2^+ образовывались под действием пучка электронов с энергией 3520 эВ и отбирались перед попаданием в оптич. кювету с помощью масс-спектрометра. Для оптич. возбуждения ионов использовались два лазера на красителях, работавшие в многомодовом режиме. Первый, пробный, лазер настраивался на энергию конкретного резонанса в полосе поглощения $a^4\Pi_u(v'', J'') \rightarrow b^4\Sigma_g^-(v', J')$. Уменьшение концентрации фрагментов, образующихся в этом канале, служило критерием настройки второго лазера на тот же исходный уровень. Излучение второго, основного, лазера исполь-

Механика-
структура

Фр. 1982, 18, N 12

зовалось для возбуждения ионов O_2^+ в полосе $a^4\Pi_u-(v'', J'') \rightarrow f^4\Pi_g(v', J')$. Получена новая спектроскопич. информация о структуре состояния $f^4\Pi_g$. Отмечается, что метод двойного оптич. резонанса является мощным инструментом при исследовании электронной структуры молекулярных ионов. Библ. 17. М. Т.



O_2^+

1982

197: 14156v Optical-optical double resonance spectroscopy of molecular ions. Cosby, P. C.; Helm, H. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(10), 4720-4 (Eng). Three-level double resonance spectroscopy was used in a laser-ion coaxial beams photofragment spectrometer to study highly excited mol. ion states. A probe laser was used to label a bound mol. ion state in a single set of its quantum nos. (v'' , J'' , Ω'') by pumping from it into a discrete, predissociated state. The charged photofragments produced from this dissociated state are monitored as a measure of the population in the labeled level while a 2nd laser interacts with the mol. ion beam upstream from the probe laser. When this 2nd laser is tuned to transitions accessing either radiating or dissociating levels which originate from the labeled lower level, the resulting depletion of ions in this level is reflected by a decrease in the probe laser photofragment intensity. The technique is applied to the $O_2^+ b^4\Sigma_g^-(v' = 4) \leftarrow a^4\Pi_u(v'' = 5)$ and $f^4\Pi_g(v' = 1, 2, 3) \leftarrow a^4\Pi_u(v'' = 5)$ systems. Transitions into the $v' = 1$ level and the $\Omega = 1/2$ and $-1/2$ substates of the $f^4\Pi_g$ were obsd. for the 1st time. This technique promises wide application in mol. ion spectroscopy and in half-collision studies.

двойной
оптический
резонанс

C.A. 1982, 97, N2.

O_2^+

Ommuck 14473

1982

97: 205386e Spectroscopy of molecular ions: laser-induced predissociation of molecular oxygen($1+$). Frey, R.; Kakoschke, R.; Mueller-Dethlefs, K.; Schlag, E. W. (Inst. Phys. Theor. Chem., Tech. Univ. Muenchen, D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. A* 1982, 307(1), 25-9 (Eng). The technique of laser predissocn. and laser induced fluorescence was applied to study spectra of gas-phase mol. ions. The main feature of the expt. is a beam of mass selected mol. ions illuminated by a pulsed dye laser. Over an extended range of excitation energies spectroscopic information can be obtained about pos. and neg. ions including transient species. As a first result predissocn. spectra of O_2^+ , $b^4\Sigma_g^- - a^4\Pi_u$ $\Delta v = 3$ and $\Delta v = 2$ are presented which can well be simulated by calcd. spectra assuming a rotational ion temp. of 300 K.

предсочу-
аэиу

C.A. 1982, 97, ~24

O_2^+

Отмиск 14473

1982

24 Б159. Спектроскопия молекулярных ионов. Индуцированная лазером преддиссоциация O_2^+ . Frey R., Kakoschke R., ~~Müller-Bethlefs~~ K., Schlag E. W. Spectroscopy of molecular ions: laser induced predissociation of O_2^+ . «Z. Phys.», 1982, A307, № 1, 25—29 (англ.)

индуциров.
лазером
преддиссоц

Описан метод исследования молек. ионов в газовой фазе с использованием лазерной флуоресценции или преддиссоциации, индуцированной перестраиваемым импульсным лазером. Разделенный по массе и сфокусированный пучок ионов из источника облучается параллельным или перпендикулярным ему лазерным лучом. Регистрируется либо спектр флуоресценции, либо изменение содержания ионов в пучке в результате, напр.,

X. 1982, 19, N 24.

преддиссоциации. Метод может быть применен как к
 положит., так и к отриц. ионам. В кач-ве примера рас-
 смотрены спектры преддиссоциации O_2^+ , связанные с
 переходом $b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$, $\Delta v=3$ (493—500 нм) и $\Delta v=2$
 (518—526 нм). На основании сопоставления эксперим.
 и рассчитанных спектров оценена вращательная т-ра
 ионов ($T=300$ K) и, более грубо, колебательная т-ра
 ($T \sim 800$ K). Рассмотрена процедура построения мо-
 дельных спектров. Оценен относит. вклад полос в сек-
 венциях: 3—0, 4—1, 5—2, 6—3—6:1:0,25:0,1; 3—1,
 4—2, 5—3—2,8:0,3:0,1. В. М. Ковба

O_2^+

1982

1 Д120. Времена жизни и механизмы преддиссоциации для $O_2^+ b^4\Sigma_g^-$ ($v=5-8$). Lifetimes and predissociation mechanisms of $O_2^+ b^4\Sigma_g^-$ ($v=5-8$). Hansen J. C., Moseley J. T., Roche A. L., Cosby P. C. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 3, 1206—1213 (англ.)

С разрешением $0,003 \text{ см}^{-1}$ получены преддиссоциационные спектры для перехода $a^4\Pi_u \rightarrow b^4\Sigma_g^- (v, N)$. O_2^+ для $v=5-8$ и различных вращательных уровней $N=1-30$ тонкой структуры F_1, F_2, F_3, F_4 . Проведен анализ роли состояний $d^4\Sigma_g^+$ и $f^4\Pi_g$ в преддиссоциации по величинам ширины переходов и получено, что вклад последнего растет с ростом v , обеспечивая 8% уширения для $v=5$ и 82% — для $v=8$. Суммарная ширина линий имеет максимум при $v=7$, давая время жизни 0,01 нс. Рассмотрена роль вращательного механиз-

и
механизм
преддиссоци-
ции

ср. 1983, 18, № 1

ма предиссоциации и определено отношение вращательного и спин-орбитального матричных элементов перехода, равное $5,45 \cdot 10^{-2}$ для $v=5$. Проведено сравнение с расчетом, который в ~ 3 раза дает меньшие ширины перехода, чем экспериментально измеренные. Согласование его с экспериментом с привлечением известных кривых потенц. энергии требует существенного увеличения матричного элемента спин-орбитального взаимодействия, что кажется маловероятным. В рамках простого конфигурац. рассмотрения вычислено, что сила колебательного перехода $a \rightarrow f$ в 250 раз превосходит силу перехода $a \rightarrow d$.

А. П. Зуев

O_2^+

Оттиск 14928 1982

3 БЗЗ. Неэмпирический расчет методом КВ явлений преддиссоциации O_2^+ , вызванных спин-орбитальной связью. Ab initio CI calculation of O_2^+ predissociation phenomena induced by a spin-orbit coupling mechanism. Marian Christel M., Marian Ralf, Peyerimhoff Sigrid D., Hess Bernd A., Buenker Robert J., Seger Georg. «Mol. Phys.», 1982, 46, № 4, 779—810 (англ.).

расчет

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с построением всех одно- и двукратных возбуждений по отношению к выделенному набору исходных конфигураций с последующим отбором и экстраполяцией по энергии рассчитаны потенциальные кривые для след. состояний молек. иона O_2^+ : $2,4,6(\Sigma^+, \pi)_{g,u}$ от диссоциац. предела $O(^3P) + O(^4S)$, $4(\Sigma^-, \pi, \Delta)_{g,u}$ от предела $O(^1D) + O(^4S)$ и $2,4[\Sigma^+(2), \Sigma^-, \pi(3), \Delta(2), \Phi]_{g,u}$ от предела $O(^3P) + O(^2D)$. Использовано несколько базисных наборов сгруппированных орбиталей гауссо-

X: 1983, 19, 13

ва типа, в том числе двухэкспонентный набор с поляризац. АО. Полученные результаты для спектроскопич. постоянных основного состояния $X^2\Pi_g$ и для энергий возбуждения свидетельствуют о достаточно высокой точности приближения. Найденные положения точек пересечения потенциальных кривых состояний $b^4\Sigma_g^-$ и $^4\Sigma_g^+$, а также $b^4\Sigma_g^-$ и $f^4\Pi_g$ хорошо согласуются с эксперим. данными. С гамильтонианом Брейта — Паули рассчитаны матричные элементы спин-орбитального взаимодействия и отмечена их сильная зависимость от межъядерного расстояния. Вычисленные вероятности безызлучательных переходов и времена жизни для диссоциации состояния $b^4\Sigma_g^-$ (за счет взаимодействия $b^4\Sigma_g^- \rightarrow ^4\Sigma_g^+$ и $b^4\Sigma_g^- \rightarrow f^4\Pi_g$) почти количественно согласуются с эксперим. данными. Предложен механизм диссоциации состояния $B^2\Sigma_g^-$.

А. В. Немухин

O₂⁺

1982

3 Д119. Неэмпирический расчет явления преддиссоциации в O₂⁺, индуцированной механизмом со спин-орбитальной связью. Ab initio CI calculation of O₂⁺ predissociation phenomena induced by a spin-orbit coupling mechanism. Marian Christel M., Marian Ralf, Peyerimhoff Sigrid D. «Mol. Phys.», 1982, 46, № 4, 779—810 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны кривые потенц. энергии основного и ряда возбужденных состояний иона O₂⁺. Использовался базис двойных экспоненц. ф-ций, дополненный поляризационными ф-циями. Полученные энергетические и структурные характеристики хорошо согласуются с известными в литературе данными. Исследовалась преддиссоциация возбужденного b⁴Σ_g⁻-состояния, вызванная спин-орбитальным взаимодействием в области пересечений кривых потенц. энергии b⁴Σ_g⁻, ⁴Σ_g⁺ и f⁴Π_g-состояний. Пересечение b⁴Σ_g⁻ и ⁴Σ_g⁺-термов происходит в области меж-

М.П., пред-
диссоциация

ор. 1983, 18, № 3

ду колебательными уровнями $b^4\Sigma_g^-$ -состояния с $v=4$ и 5. Пересечение $b^4\Sigma_g^-$ - и $f^4\Pi_g$ -термов локализовано в интервале $v=6-7$. Для определения спин-орбитального взаимодействия разработана программа расчета матричных элементов одно- и двухэлектронных членов брейт-вигнеровского оператора в базисе КВ-ф-ций. Рассчитанная постоянная спин-орбитальной связи для $X^2\Pi_g$ -состояния оказалась в пределах 5% от эксперим. значения. Почти количеств. согласие теории и эксперимента было обнаружено и для вероятностей безызлучательных $b^4\Sigma_g^- \rightarrow ^4\Sigma_g^+$ - и $b^4\Sigma_g^- \rightarrow f^4\Pi_g$ -переходов.

А. А. Земсков.



O_2^+

[Ommuck 14928] 1982

ab initio
pacrim

97: 169267f Ab initio CI calculation of dioxygen(1+) predissociation phenomena induced by a spin-orbit coupling mechanism. Marian, Christel M.; Marian, Ralf; Peyerimhoff, Sigrid D.; Hess, Bernd A.; Buenker, Robert J.; Seger, Georg (Lehrstuhl Theor. Chem., Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Mol. Phys.* 1982, 46(4), 779-810 (Eng). Potential curves were calcd. for ground and excited states of O_2^+ by MRD CI calcs. using AO basis sets. Spin-orbit coupling matrix elements for 1- and 2-electron interactions were calcd. using large scale CI wave functions. Dipole transition strengths are described accurately by the calcs. A mechanism is proposed for the predissocn. of the $B^2\Sigma_g^-$ state for the sep. process which onsets at $v = 0, 3$.

C. A. 1982, 97, N 20.

O_2^+

1982

2 Д274. Парциальные колебательные сечения фотоионизации, связанные с испусканием $3\sigma_g$ электрона молекулы O_2 . Vibronic partial photoionization cross sections associated with the ejection of a $3\sigma_g$ electron in the O_2 molecule. Morin P., Nenper I., Guyon P. M., Ferreira L. F. A., Ito K. «Chem. Phys. Lett.», 1982. 92, № 1, 103—108 (англ.)

 $b^4\Sigma_g^-, B^2\Sigma_g^-$

С использованием синхротронного излучения и времяпролетного анализатора измерены парциальные сечения фотоионизации кислорода на различные колебательные уровни $b^4\Sigma_g^-$ и $B^2\Sigma_g^-$ электронных состояний O_2^+ . Анализируется структура сечений. Резонанс в колебательных сечениях b -состояния в области 19 эВ характеризуется как резонанс формы, предсказанный ранее теоретич. расчетами в рамках одноэлектронного приближения. Сечения B -состояния возмущаются примесью

фр. 1983, 18, № 2

автоионизационных ридберговых состояний, сходящихся к пределу $O_2^+ C^4\Sigma_u^-$. Рассчитаны коэф. ветвления для колебательных состояний. Отличие этих величин от соответствующих значений коэф. Франка—Кондона указывает на то, что механизм фотоионизации в исследованной области не может быть отождествлен с прямой ионизацией.

Е. П. Смирнов

O_2^+

Ommuck 15660

1982

6

Siegel M. W.,
Int. J. Mass. Spectrom.
and Ion. Phys., 1982,
44, N 1-2, 19-36.

O₂⁺

1982

6 Д203. Исследования потерь энергии электронов молекулярного кислорода в области 14,8÷20,3 эВ с использованием многодетекторного электронного спектрометра. Electron energy-loss studies of molecular oxygen in the region 14,8—20,3 eV using a multidetector electron spectrometer. York Trevor A., Comer John. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 24, 4629—4635 (англ.)

спектр;

С помощью нового, дифференциально откачиваемого многодетекторного электронного спектрометра исследован спектр потерь энергии электронов молекулярного кислорода в области энергии 14,8÷20,3 эВ. В эксперименте моноэнергетич. пучок электронов пересекал под углом 90° пучок O₂ и производился анализ и детектирование электронов, рассеянных на углы 0°÷90°. В указанном диапазоне энергий наблюдались ридберговские серии, относящиеся к возбуждению $\sigma_g 2p$ -электрона.

ⓧ
(4)

ор. 1983, 18, № 6

O₂ (вс, спектр)

и сходящиеся к $b^4\bar{\Sigma}_g^-$ и $B^2\bar{\Sigma}_g^-$ -состояниям положит.
 иона при энергиях 18,170 и 20,296 эВ соответственно.
 Четыре из этих серий: $(\sigma_g 2p^2, ^4\bar{\Sigma}_g^-(ns\sigma_g)^3\bar{\Sigma}_g^-$ и
 $(\sigma_g 2p)^2, ^4\bar{\Sigma}_g^-(nd\sigma_g)^3\bar{\Sigma}_g^-)$ впервые идентифицированы в
 настоящей работе. Табулированы энергии колебат.
 уровней этих серий. И. Флакс

