

MgO

Summich 10680

1980

Кв. мех;  
факет  
Мизрук  
Ин. соет.

93: 192477a. An SCF and MCSCF description of the low-lying states of magnesium oxide. Bauschlicher, C. W., Jr.; Silver, D. M.; Yarkony, D. R. (Langley Res. Cent., NASA, Hampton, VA 23665 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(6), 2867-70 (Eng). SCF and MC-SCF wave functions for the low-lying  $3^1\Sigma^+$  and  $3^1\Pi$  states of MgO are presented and discussed. A viable description of these states is possible if the  $3^3\Sigma^+$  and  $3^1\Pi$  states are treated at the SCF level, and if the  $1^1\Sigma^+$  and  $2^1\Sigma^+$  states are treated with a limited MC-SCF expansion.

C. A. 1980, 93 N20

MgO

~~Оттиск № 10680~~

1980

Оттиск 10680

4 Д100. Описание методами ССП и МК ССП низколежащих состояний MgO. An SCF and MCSCF description of the low-lying states of MgO. Bauschlicher C. W., Jr., Silver D. M., Yarkony D. R. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2867—2870 (англ.)

М.п.,  $\gamma e^-$

Методом ССП и многоконфигурац. методом ССП (МК ССП) рассчитаны потенц. кривые низколежащих электронных состояний  $1^3\Sigma^+$  и  $1^3\Pi$  для молекулы MgO. Базис состоял из двухэкспонентного набора слэтеровских АО с добавлением поляризационных ф-ций. Методом МК ССП использован для расчета состояний  $1^1\Sigma^+$  и  $3^1\Sigma^+$ , для которых имеется сильное взаимодействие нескольких конфигураций. Полученные значения энергий термов и равновесные межъядерные расстояния состояний  $X^1\Sigma^+$ ,  $1^3\Pi$  и  $2^1\Sigma^+$  хорошо согласуются с экспериментальными. Для состояния  $3^3\Sigma^+$  спектроскопич. постоянные получены впервые.

А. Дементьев

Ф. 1981 N 42

MgO

BeO

Е.И.; М.И.

(41)

Х. 1981 № 8

8 Б33. Описание низколежащих состояний MgO в рамках методов ССП и МК ССП. Bau-schlicher C. W., Jr., Silver D. M., Yarko-ny D. R. An SCF and MCSCF description of the low-lying states of MgO. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2867—2870 (англ.)

В области межъядерных расстояний от 3 до 3,9 ат. ед. рассчитаны энергии состояний  $1^3\Sigma^+$  и  $1^3\Pi$  молекулы MgO. Вычисления выполнены многоконфигурац. методом ССП (МК ССП) для состояний  $1^1\Sigma^+$  и методом ССП для состояний  $3^1\Sigma^+$ ,  $1^3\Pi$ . Использование одноконфигурац. подхода для состояний  $3^1\Sigma^+$  и  $1^3\Pi$  аргументировано тем, что потенциальные кривые низших состояний внутри каждого блока симметрии энергетически хорошо отделены от кривых возбужденных состояний. Базис составлен из двухэкспонентного набора слейтеровских орбиталей с добавлением поляризац. ф-ций. Отмечено, однако, что для колич. описания потенциальных кривых в базис необходимо добавить диффузные  $d$ -орбитали на Mg. Проведены оценки спектроскопич. постоянных для связанных состояний MgO и дана сравнительная интерпретация МО молекул MgO и BeO (расчеты BeO выполнены ранее с помощью той же методики).

А. В. Немухин

1980  
1981  
С.И.И.  
1981  
С.И.И.

1980

MgO

Mg(OH)

CaO

SrO

(70)

(73) M

X. 1980 №23

23 Б1048. Исследование равновесия в пламенах как метод определения энергий диссоциации кислородсодержащих соединений щелочно-земельных металлов. Беляев В. Н., Лебедева Н. Л., Краснов К. С., Гурвич Л. В., Старовойтов Е. М. «3-я Всес. школа. Применение мат. методов для описания и изуч. физ.-хим. равновесий, Новосибирск, 1980. Тез. докл. Ч. 2». Новосибирск, 1980, 180—184

На основании сравнения вычисл. равновесных значений парц. давл. атомов H ( $p$ ) и  $p$ , измеренных методом Li/LiOH изучены равновесия в продуктах горения  $\text{CH}_4$ . Определены энергии диссоциации  $D$  кислородсодержащих соединений щел.-зем. металлов. Используемые для определения  $D$  тепловые эффекты р-ций  $\text{M} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{MO} + \text{O}$ ,  $\text{M} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{M}(\text{OH})_2 + 2\text{H}$  и  $\text{M} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{MO} + \text{H}_2$  определены из т-рной зависимости констант равновесия. Получено,  $D(\text{MgO}) = 87 \pm 4$ ,  $D[\text{Mg}(\text{OH})] = 184 \pm 7$ ,  $D(\text{CaO}) = 90 \pm 4$  и  $D(\text{SrO}) = 99 \pm 4$  ккал/моль. В. Ф. Мартынюк

МГО

Оттиси 9891 | 1980

Храмова О. Д. и др.

Д. Колеб.-

-вращат.

спектр

Вестн. МГУ, Физмат,

1980, 21 (4), 321-23.

уменьшен.

Франц. язык

MgO

1980.

4 Д204. Силы электронных переходов молекулы MgO. Святкин И. А., Кузнецова Л. А., Кузнецов Ю. Я., Лейко И. П. «Оптика и спектроскопия», 1980, 48, № 1, 26—29

На установке ударная труба определены силы электронных переходов ( $S_e$ ) для трех систем и оценена верхняя граница для одной системы молекулы окиси магния. Значения  $S_e$  в атомных единицах имеют следующую величину:  $B^1\Sigma - X^1\Sigma$   $0,050 \pm 0,008$ ,  $C^1\Sigma - A^1\Pi$   $0,056 \pm 0,012$ ,  $D^1\Delta - A^1\Pi$   $0,065 \pm 0,014$ ,  $B^1\Sigma - A^1\Pi < 0,30$ .

Резюме

силы  
электр.  
переходов

Ф. 1980 № 4

1980

MgO

 $(Re)^2$ 

92: 138693p Strengths of electron transitions of a magnesium oxide molecule. Svyatkin, I. A.; Kuznetsova, L. A.; Kuzyakov, Yu. Ya.; Leiko, I. P. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1980, 48(1), 26-9 (Russ). With a shock tube arrangement the electron transition strengths ( $S_e$ ) were detd. for 3 systems and the upper limit evaluated for 1 system of MgO. Mg was introduced in the shock tube in the form of metal powder or oxide along with O<sub>2</sub> or mixts. with Ar in ratios of 1:1, 1:3, 1:9 at 30 and 100 torr. Values of  $S_e$  in at. units were:  $B^1\Sigma-X^1\Sigma$   $0.050 \pm 0.008$ ,  $C^1\Sigma-A^1\Pi$   $0.056 \pm 0.012$ ,  $D^1\Delta-A^1\Pi$   $0.065 \pm 0.014$ ,  $B^1\Sigma-A^1\Pi < \sim 30$ .



C.A. 1980.92, N16

MgO

Оптический 11603 1981

10 Д53. О низколежащих состояниях MgO. Ч. II.  
On the low-lying states of MgO. II. Bauschlicher  
Charles W., Jr., Lengsfeld Byron H., III,  
Silver David M., Yarkony David R. «J. Chem.  
Phys.», 1981, 74, № 4, 2379—2383 (англ.)

В многоконфигурационном приближении ССП (МК  
ССП)+КВ рассчитаны потенц. кривые и спектроскопич.  
параметры десяти низших синглетных и триплетных со-  
стояний молекулы MgO. На первом этапе производился  
расчет в полном валентном приближении МК ССП, пос-  
ле чего отбирались конфигурации, дающие наибольший  
вклад в волн. ф-цию. В базе этих конфигураций про-  
изводился расчет методом МК ССП+КВ. Такой подход  
обеспечивает одинаковое качество расчета для всех  
электронных состояний. Результаты расчетов находятся  
в хорошем согласии с экспериментом. Установлено на-  
личие ранее экспериментально не наблюдавшегося сос-  
тояния  $b^2\Sigma^+$  ( $T_e=8272 \text{ см}^{-1}$ ,  $R_e=1,791 \text{ \AA}$ ). Ч. I. см.  
Bauschlicher C. W. et al. «J. Chem. Phys.», 1980, 73,  
2867. В. И. Барановский

М. П.

Ф. 10. 1981



MgO

світлик 11603

1981

20 Б16. О низколежащих состояниях MgO. II. Bauschlicher Jr. Charles W., Lengsfeld III, Byron H., Silver David M., Yarkony David R. On the low-lying states of MgO. II. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2379—2383 (англ.)

Ранее проведенное исследование MgO (сообщ. I см. РЖХим, 1981, 8Б33) расширено введением при расчете 10 низших состояний многоконфигурац. метода ССП (МК ССП). Использован двухэкспонентный базис орбиталей слейтеровского типа с дополнительными поляризац. ф-циями (базис МакЛина и Йошимины без 4f-ф-ций и с добавочной 3s-ф-цией на Mg). При отдельных межъядерных расстояниях R проведены расчеты в рамках метода МК ССП с полным учетом валентных орбиталей, что позволило провести далее отбор исходных конфигураций (Кф) для послед. расчета методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех одно- и двукратно возбужденных Кф (с замороженным остовом). Приведены Кф, использованные для расчета состояний каждого типа симметрии ( $1,3\Sigma^{\pm}$ ,  $1,3\Pi$ )

M, N; E<sub>i</sub>

X.20.1981

и  $1,3\Delta$ ), вычисл. энергетич. точки на потенциальной кривой для каждого состояния ( $3,2 \leq R \leq 4,0$  ат. ед.), величины  $T_e$ ,  $R_e$ ,  $\omega_e$  и  $B_e$ , определенные в рамках процедуры Данхэма. Величины  $R_e$  согласуются с имеющимися эксперим. данными в пределах 0,03 А, а величины  $T_e$  (метод конфигурац. взаимодействия) — в пределах  $800 \text{ см}^{-1}$  (максим. ошибка — для  $A^1\Sigma^+$ -состояния). Особо отмечен многоконфигурац. характер двух низших состояний типа  $1\Sigma^+$ . Для экспериментально неисследованного состояния  $b^3\Sigma^+$  предсказано  $T_e = 8300 \text{ см}^{-1}$  и  $R_e = 1,79 \text{ А}$ . Обсуждены основные источники ошибок полученных спектроскопич. постоянных. Н. Ф. Степанов

number 11603

1981

MgO

94:127723j On the low-lying states of magnesium oxide.  
 II. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Lengsfeld, Byron H., III;  
 Silver, David M.; Yarkony, David R. (ICASE, Hampton, VA  
 23665 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(4), 2379-83 (Eng).  
 By using a double-zeta plus polarization basis set of Slater  
 orbitals, full valence MSCCF (FVMSCCF) calcs. were done for  
 the low-lying electronic states of MgO. The  $b^3\Sigma^+$  state should  
 have a  $T_e$  of  $\sim 8300$   $\text{cm}^{-1}$  and a bond length of 1.79 Å. A  
 spectroscopic anal. of the potential curves indicated that their  
 shapes are in reasonable agreement with the range of exptl.  
 results.

kb. rec.  
papers

C.A. 1981.94, N46

UgO

1981

Bauschlicher Ch. W. Jr.,  
Yengsfield B. H., et al.

Lawrence Berkeley Lab.,  
[Rep] LBL 1981, LBL-12157,

Proc. Workshop Recent Dev.  
Appl. Multi-configuration  
tree-Fock Methods, 151-153.  
(see CaO; III)

теорет.  
расчет  
воздуш.  
соедин.

MgO

1981

5 Д113. Многоконфигурационная волновая функция самосогласованного поля для возбужденных состояний! Multiconfiguration self-consistent-field wavefunction for excited states. Bauschlicher C. W., Jr., Silver D. M., Yarkony D. R. «Lect. Notes Chem.», 1981, 22: Unitary Group Eval. Electron. Energy Matrix Elem.: Unitary Group Workshop, 1979, 136—142 (англ.)

М.П.;

Предложена многоконфигурац. процедура самосогласованного поля (МКССП), вытекающая из вариационного принципа, выраженного через обобщенную теорему Бриллюэна для волн. ф-ции МКССП. Алгоритм использован для изучения электронной структуры трех низших  $^1\Sigma^+$ -состояний молекулы MgO, которая не находит адекватной трактовки на уровне метода ССП.

В. В. Росихин

99. 1983, 18, 25 ●

MgO

1981

Спектры

13 Б1289. Изучение хемилюминесценции реакции  $N_2O$  с  $Mg(^1S)$  и  $Mg(^3P)$ . Bourguignon B., Ros-tas J., Taieb G. Study of the chemiluminescence of the  $Mg(^1S)$  and  $Mg(^3P)+N_2O$  reaction. «Ber. Hahn—Meitner—Inst. Kernforsch. Berlin», 1981, № 362, 72 (англ.)

Реакция метастабильных атомов  $Mg\ ^3P$  с  $N_2O$  приводит к интенсивной хемилюминесценции  $MgO$  (переходы  $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ ,  $B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$  и  $d^3\Delta \rightarrow a_3\Pi$ ); по-видимому, именно примеси  $Mg\ ^3P$  ответственны за испускание  $MgO$  в пламенах  $Mg+N_2O$ . Р. В.

х. 1982, 19, № 13.

MgO

1981

97: 171457m Theoretical studies of metal oxides. Delgarno, Alex (Harvard Coll. Obs., Cambridge, MA USA). Report 1981, AFOSR-TR-82-0159; Order No. AD-A112402, 15 pp. (Engl). Avail. NTIS. From *Gov. Rep. Announce. Index (U. S.)* 1982, 82(15), 2982. Detailed calcs. were carried out of the potential energy curves of the low-lying singlet and triplet states of MgO, and the elec. dipole transition moments between the states were obtained. By using the results, a comprehensive anal. of spectral line data is possible and the mechanisms by which MgO is dissocd. by photons can be identified. Preliminary ests. suggest a radiative lifetime of  $2.1 \times 10^{-8}$  for the  $B^1\Sigma^+$  state and of  $2.8 \times 10^{-4}$  s for the  $A^1\Pi$  state. Some calcs. on  $MgO^+$  were made. An ionization potential for MgO of 7.9 eV is predicted.

теорет.  
расчет

возраст.  
состоян.,  
и.п.,  $\gamma$

C.A. 1982, 97, N20.

MgO

1981

21 Б162 Деп. Определение оптических диаметров соударения молекулы MgO. Храмова О. Д. «Материалы Конф. молод. ученых, посвящ. 225-летию МГУ. Ч. 1». М., 1981, 121—125, библиогр. 4 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 26 июня 1981 г., № 3167—81 Деп.)

Определены оптич. диаметры соударения молекулы MgO по электронно-колебательному спектру (переход  $V'\Sigma - X'\Sigma$ )  $\sigma_{MgO-O}$ ,  $\sigma_{MgO-O}$ ,  $\sigma_{MgO-Ar}$ , значения к-рых равны, соотв.:  $10,1 \pm 0,5$ ,  $13,6 \pm 0,5$ ,  $13,0 \pm 0,5$  (А). Для определения ширины спектральных линий использована программа расчета параметров спектра на основе экспериментально измеренных значений интенсивности.

Автореферат

Спектр,  
расчет.

X. 21. 1981



МГО

Краснова О.Д.

1981

Автореферат диссертации  
Э.Секір на соискание учёной сте-  
пени канд. техн. наук.

Автоматизированная обработ-  
ка энергетических измерений  
в электронных спектрах двуэ-  
лементарных молекул.

Москва: МГУ. 1981

Oenmuck 12838

1981

MgO<sup>+</sup>

95: 86415k Oxidation of transition-metal cations in the gas phase. Oxygen bond dissociation energies and formation of an excited-state product. Kappes, Manfred M.; Staley, Ralph H. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Phys. Chem.* 1981, 85(8), 942-4 (Eng). Gas-phase studies are reported of O atom transfer from various oxidants to transition metal cations by ICR spectroscopy. Observation of these reactions is used to establish upper and lower limits for metal oxide-cation bond dissocn. energies,  $D(M^+-O)$ . For MgO<sup>+</sup>, AlO<sup>+</sup>, MnO<sup>+</sup>, CoO<sup>+</sup>, NiO<sup>+</sup>, CuO<sup>+</sup>, and ZnO<sup>+</sup> the results bracket  $D(M^+-O)$  between 25.5 and 40.0 kcal/mol. For V<sup>+</sup> and Fe<sup>+</sup> the results also bracket the bond energy in relatively narrow ranges:  $D(V^+-O) = 135 \pm 16$  kcal/mol and  $D(Fe^+-O) = 101 \pm 18$  kcal/mol. New upper and/or lower limits are established for some of the other metal cations studied. The VO<sup>+</sup> produced by reaction of V<sup>+</sup> with N<sub>2</sub>O reacts with H<sub>2</sub> or CH<sub>4</sub> to give VOH<sup>+</sup>. However, when VO<sup>+</sup> is produced by reaction of V<sup>+</sup> with O<sub>2</sub>,  $D(O-O) = 119.2$  kcal/mol., the reaction to give VOH<sup>+</sup> does not occur. These results suggest that the VO<sup>+</sup> product of the reaction of V<sup>+</sup> and N<sub>2</sub>O is an excited-state species with a lifetime at least as long as the reaction time which is as long as about 150 ms in these expts. Similar behavior is seen with TiO<sup>+</sup>.

D<sub>0</sub>(M<sup>+</sup>-O)

C.A. 1981, 95, N10.

MgO

Omonuck 12769

1981

кв. мех.  
расчет

Kurtz H., Jordan K.D.,

J. Chem. Phys. 1981, 75(4),  
1876-1887.



(Cu. Lit. III)

MgO

[commenced 1945] 1981.

MacLagan R.G. & R.

Q.S. City.

papers

Chem. Phys. Lett;

1981, 82(3), 501-504.

Valence-bond studies of ...

MgO

Оттиск 11273

1981

9 Д112. Энергия диссоциации двухатомных молекул.  
Dissociation energy of diatomic molecules. Rama-  
krishna Rao T. V., Ramakrishna Reddy R.  
«J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 25,  
№ 3, 295—298 (англ.)

С использованием потенц. ф-ции Szoke S. et al Can.  
«J. Phys.», 1968, 46, 2563) из литературных данных по  
спектральным параметрам и электроотрицательности  
атомов вычислены энергии диссоциации для молекул  
MgO, CaO, SrO, N<sub>2</sub><sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub><sup>+</sup>, J<sub>2</sub><sup>+</sup>.

(50)

(46)



Ф. 1981 N 9

MgO

01111. 13048

1981

196: 58112m On the correlation between electronegativity and molecular parameters. Rao, T. V. Ramakrishna; Naidu, G. T.; Reddy, R. Ramakrishna (Dep. Phys., Sri Venkateswara Univ., Anantapur, 515003 India). *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* 1981, 108(1), 25-30 (Eng). The mean electronegativities which are satisfactory approxns. for the equalized ones can be brought into a close correlation with the simplest mol. parameters. The force const. of diat. mols. MgO, CaO, SrO, SiO, SiS, TeO, NO, NO+,

Chem. docum.

P<sub>2</sub>, SO, SeO and TeO or of simple isolated bonds can be expressed by means of the equalized electronegativities, bond orders, bond strengths and interat. distances. The performance of the Lennard-Jones parameters was tested with the potential function proposed by S. Szoke (1980) in calcg.  $\omega_{\alpha}$  and  $\alpha_{\alpha}$ , and found to be excellent. The role of the electronegativity in constructing the potential energy functions proves the validity of the assumption that there is a close connection between electronegativity and the energy relations of the mols.

M.A.

410

C.A. 1982, 96, 18

$MgO^+$

1981

Do;

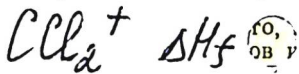
72 

5 Б1108. Исследования газофазной химии иона магния методом послесвечения в потоке. Rowe B. R., Fahy D. W., Ferguson E. E., Fehsenfeld F. C. Flowing afterflow studies of gas phase magnesium ion chemistry. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 7, 3325—3328 (англ.)

Методом послесвечения в потоке исследована кинетика реакций ионов  $Mg^+$ ,  $MgO^+$ ,  $MgOH^+$ ,  $MgOD^+$ , и  $MgCl^+$  с нейтральными молекулами при  $T \approx 300$  К. Использовались два метода получения ионов. В 1-м ионы  $Mg^+$  и  $MgO^+$  образовывались из перв. ионов  $Mg^{2+}$  при реакциях с  $O_2$ :  $Mg^{2+} + O_2 \rightarrow Mg^+ + O_2^+$  и  $Mg \rightarrow MgO^+ + O$ . Этим методом изучена кинетика и измерены константы скорости ( $k$  в  $см^3/с$ ) реакций  $MgO^+$  с  $CO$  ( $3,2 \cdot 10^{-10}$ ),  $NO$  ( $4,3 \cdot 10^{-10}$ ),  $O_3$  ( $8 \cdot 10^{-10}$ ),  $N_2$  ( $< 1 \cdot 10^{-12}$ ),  $D_2O$  ( $1,3 \cdot 10^{-9}$ ). Во втором методе ионы  $Mg^+$  получали с помощью селективной ионной струевой трубы. Были изу-

X. 1982, 19, N 5. На обороте

чены р-ции  $Mg^{+}$  с  $O_3$  ( $k=7 \cdot 10^{-10}$ ),  $N_2O$  ( $<5 \cdot 10^{-10}$ ),  
 $HNO_3$  ( $5,8 \cdot 10^{-10}$ ),  $H_2O_2$  ( $1,3 \cdot 10^{-9}$ ),  $Cl_2$  ( $4,4 \cdot 10^{-10}$ ),  $CCl_4$   
 ( $8,7 \cdot 10^{-10}$ ), и  $Br_2$  ( $2,5 \cdot 10^{-10}$ ). Исследованы также р-ции  
 $MgOH^{+}$  с  $HNO_3$  ( $k=4,4 \cdot 10^{-10}$ ),  $MgOH^{+} \cdot 4H_2O$  с  $HNO_3$   
 ( $2,8 \cdot 10^{-10}$ ) и  $MgCl^{+}$  с  $CCl_4$  ( $4,9 \cdot 10^{-10}$ ) и  $HNO_3$  ( $5,8 \cdot$   
 $10^{-10}$ ). Установлено, что энергия диссоциации  $MgO^{+}$ :  
 $1,1 < D(MgO^{+}) < 3,1$  эВ, потенциал ионизации  $Mg-$   
 $(OH)_2 < 10,2 \pm 0,6$  эВ, а энтальпия образования  $CCl_2^{+}$ :  
 $\Delta H_f < 284$  ккал/моль. С. Г. Ческис





МгО

1981

Святкин И. А.

спектр  
поглащ.

Физ

Автореферат диссертации  
на соискание ученой степени  
к.к.н. М.: МГУ, 1981.

MgO

1981

97: 115493h Determination of oscillator strength of electron transitions of a series of molecules of slightly volatile compounds formed behind a shock wave front. Svyatkin, I. A. (Fac. Chem., Moscow State Univ., Moscow, USSR). *Deposited Doc.* 1981, VINITI 3167-81, 110-12 (Russ). Avail. VINITI. The oscillator strengths for various energy level transitions of slightly volatile compds. (MgO, CaO, MgH) were detd. by spectrophotometric measurement of their concn. in gas phase behind a shock wave front.

(f<sub>mn</sub>) JB

(+2)

C.A. 1982, 97, N 14

1981

MgO

94: 165074f Laser induced fluorescence of magnesium oxide. Taieb, G. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Phys. (Orsay, Fr.)* 1981, 42(4), 537-40 (Eng). The reaction of Mg in its  $3^3P$  metastable state with  $N_2O$  was studied by laser induced fluorescence (LIF) using an  $Ar^+$  laser. The  $a^3\Pi$  state was detected, and a chemiluminescence due to  $d^3\Delta \rightarrow c^3\Pi$   $B^1\Sigma \rightarrow X^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$  transitions obsd. A strong continuum is emitted in the visible when some  $Ar^+$  laser lines are used, together with discrete emissions.

Снекмп

С. Снекмп



C.A. 1981, 94, N26

MgO

1981

Walvekar A.P., et al.

сметог  
расчета,  
Do.

Indian J. Pure and  
Appl. Phys., 1981, 19, N3,  
278-279.

●  
(сер. C<sub>2</sub>; III)

1982

МГО

Абелецкая Ю. Г.,

потенци.  
кривые,  
кв. мех.  
расчет  
и.п.

Развитие методов медлен-  
реческих расчетов и теорети-  
ческое изучение ряда кинемо-  
родосодержащих соединений.  
Автореферат диссертации на  
соискание уч. степеней к. ф.-м.  
Наук, 1982, Москва.

MgO

1982

6 Б13. Энергия диссоциации MgO. The dissociation energy of MgO. Bauschlicher Charles W., Jr., Lengsfeld Byron H., III, Liu Bowen. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 8, 4084—4087 (англ.)

Методами ССП МО ЛКАО и конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитана энергия диссоциации (ЭД) молекулы MgO в состоянии  $a^3\Pi$ . Использованы базисы слейтеровских и сгруппированных гауссовых ф-ций с учетом различных комбинаций поляризац.  $3d$ - и  $4f$ -ф-ций на атомах Mg и O. При построении конфигурац. базиса учтены все одно- и двухэлектронные возбуждения в пространстве валентных МО, полученных методом ССП МО ЛКАО. Вклад четырехэлектронных возбуждений в полные энергии молекул, атомов и ионов оценивался по ф-ле Давидсона. Значение ЭД вычислено как по разности энергий атомов и молекулы при равновесном межъядерном расстоянии  $R_e$ :  $D_e(a^3\Pi) = E(\text{Mg}) + E(\text{O}) - E(\text{MgO}, R_e)$ , так и по разности пол-

М.П., Яо;

X.1983, 19, № 6.

ных энергий ионов с учетом известных величин потен-  
 циала ионизации (ПИ) атома Mg и сродства к элект-  
 рону (СЭ) атома O:  $D_e(a^3\Pi) = E(\text{Mg}^+) + E(\text{O}^-) -$   
 $E(\text{MgO}, R_e) - \text{ПИ}(\text{Mg}) + \text{СЭ}(\text{O})$ . С учетом полученного  
 значения  $D_e(a^3\Pi)$  определена величина ЭД молекулы  
 MgO в основном состоянии  $X^1\Sigma^+$ . Наиболее точное  
 значение  $D_e(^1\Sigma^+)$  составило  $2,65 \pm 0,16$  эВ, что указы-  
 вает на существенное завышение величины ЭД, опреде-  
 ленной экспериментально ( $\approx 3,5 - 4,3$  эВ). И. А. Тополь,



MgO

1982

3 Д122. Энергия диссоциации MgO. The dissociation energy of MgO. Bauschlicher Charles W. Jr., Lengsfeld Byron H., III, Liu Bowen. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 8, 4084—4087 (англ.)

Ограниченным методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех однократных и двукратных возбуждений с валентных МО рассчитана полная энергия молекулы MgO в электронном состоянии  $a^3\Pi$ , а также энергии атомных ионов  $Mg^+$  и  $O^-$ . На основе полученных энергий и эксперим. энергии перехода  $X^1\Sigma^+ - a^3\Pi$  найдена энергия диссоциации MgO в основном электронном состоянии, составившая  $2,65 \pm 0,16$  эВ (эксперим. значение 3,5—4,3 эВ). Набор МО генерировался на стадии расчетов ССП в базисах слэтеровских орбиталей ( $8s6p-3d1f$ ) на Mg и ( $7s5p3d1f$ ) на O и гауссовых ф-ций ( $12s9p12d6f/8s6p4d2f$ ) - на Mg и ( $11s7p9d3f/6s4p3d1f$ ) на O. Результаты, полученные в слэтеровском и гауссо-

Do;

ор. 1983, 18, №3



вом базисах, практически совпадают. При расчетах корреляционной энергии использовалась поправка Давидсона для учета вклада четырехкратно возбужденных конфигураций.

А. И. Дементьев



MgO

OMMULCK 15464  
OMMULCK 15588

1982

Do;

97: 188471j The dissociation energy of magnesium oxide. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Lengsfeld, Byron H., III; Liu, Bowen (Plyatomics Res., Mountain View, CA 94043 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(8), 4084-7 (Eng). Ab initio CI calcs. on MgO( $a^3\Pi$ ) yield a best est. for the dissoen. energy of MgO ( $X^1\Sigma^+$ ) of  $2.65 \pm 0.16$  eV, indicating all available exptl. values (3.5-4.3 eV) are too high. The CI calcs., including all single and double replacements from the RHF wave functions, were performed using large STO and contracted GTO basis sets with at least four sets of polarization functions. The best value of the dissoen. energy was computed with respect to  $Mg^+ + O^-$  and then cor. by the exptl. electron affinity and ionization potential.

C.A. 1982, 97, N22

MgO

1982

22 Б1223. Изучение хемилюминесценции реакции  $Mg(^1S)$  и  $Mg(^3P) + N_2O$ . Bourguignon B., Rostas J., Taieb G. Study of the chemiluminescence of the  $Mg(^1S)$  and  $Mg(^3P) + N_2O$  reaction. «Ber. Bunsenges. Phys. Chem.», 1982, 86, № 5, 481 (англ.)

Измерены спектры хемилюминесценции, возникающей при взаимодействии нагретых паров магния с  $N_2O$  в струе. Хемилюминесценция связана с переходами  $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ ,  $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$  и  $d^3\Delta - a^3\Pi$  молекулы  $MgO$ . Показано, что электронновозбужденные молекулы  ~~$MgO$~~  образуются при р-ции метастабильных атомов  $Mg(^3P)$  с  $N_2O$ . Оценочные значения вращательной и колебательной т-р для состояния  $B^1\Sigma^+$ , полученные путем сравнения эксперим. и модельного спектров, равны соотв. 1500 и 5000 К.

В. М. Ковба

Хемилю-  
минесц.

X. 1982, 19, N 22.

UgO

1982

Cox J.W., Dagdigan  
Paul J.

сечение

хемиско-

меморандум

J. Phys. Chem., 1982,  
86, N19, 3738-3745.

(ср. SrO; III)

MgO

Ommuck 14453

1982

! 97: 30743q Laser fluorescence study of magnesium oxide formed from atomic magnesium( $3s3p^3P^0$ ) + diatomic oxygen and nitrous oxide under single-collision conditions. Dagdigan, Paul J. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(11), 5375-84 (Eng). The reactions of metastable  $Mg(3s3p^3P^0)$  atoms with  $O_2$  and  $N_2O$  were investigated under single-collision conditions by the laser-fluorescence technique. The MgO reaction product was detected in the ground  $X^1\Sigma^+$  and low-lying  $a^3\Pi$  and  $A^1\Pi$  electronic states. The relative populations in the 1st 6 vibrational levels of  $X^1\Sigma^+$  and a rotational temp. characterizing the rotational distribution in  $v = 0$  were detd. from  $B-X$  excitation spectra. The relative rates of formation for the  $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$ , and  $A^1\Pi$  states were obtained by comparison of integrated fluorescence intensities in the  $B-X$ ,  $d-a$ , and  $D-A$  band systems. For both reactions, little of the reaction exoergicity is channeled into MgO electronic or vibrational-rotational energy. The dynamics of these reactions are discussed and are contrasted with those of the homologous Ca and Sr reactions.

чекер  
флюорес.

C.A. 1982, 97, NY

MgO

1982

8 Д139. Использование процедуры усреднения по состояниям в методе МК ССП. Применение для расчета излучательных переходов в MgO. Use of the state-averaged MCSCF procedure. Application to radiative transitions in MgO. Diffenderfer Randall N., Yarkony David R. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 26, 5098—5105 (англ.)

М.П., И, До;

Процедура усреднения МО по нескольким электронным состояниям использована в расчетах многоконфигурац. методом ССП (МК ССП) потенциальных кривых, спектроскопич. постоянных, дипольных моментов электронных состояний  $X^1\Sigma^+(1^1\Sigma^+)$  и  $2^1\Sigma^+$  молекулы MgO, а также для расчета вероятностей переходов между ними. Базис включал наборы слэтеровских орбиталей —  $(7s5p2d)$  на атоме Mg и  $(5s5p2d)$  на атоме O. Расчеты проводились для межъядерного расстояния, менявшегося в районе от 3,0 до 3,7 ат. ед. с шагом 0,1 ат. ед. Вероятности переходов рассчитывались

Фр. 1983, 18, № 8

на волн. ф-циях, полученных методом конфигурац. взаимодействия в базисе МО, сгенерированных на стадии МК ССП. Проведенные исследования сходимости итераций МК ССП, показали, что в случае усреднения МО по состояниям  $1^1\Sigma^+$  и  $2^1\Sigma^+$  молекулы MgO итерации сходятся лишь при условии одновременного варьирования всех параметров функционала энергии.

А. И. Дементьев

MgO

от 14453

1982

4 Б1027. Исследование методом лазерной флуоресценции  $MgO$ , образующегося в условиях единичных столкновений в реакциях  $Mg(3s3p^3P^0) + O_2$  и  $N_2O$ . Laser fluorescence study of  $MgO$  formed from  $Mg(3s3p^3P^0) + O_2$  and  $N_2O$  under single-collision conditions. Dagdigan Paul J. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5375—5384 (англ.)

спектр

Энергетика и динамика реакций метастабильных атомов  $Mg(3s3p^3P^0)$  с  $O_2$  и  $N_2O$  исследуются по спектрам лазерно-индуцированной флуоресценции молекул  $MgO$ , образующихся в указанных р-циях в режиме единичных столкновений при рассеянии атомного пучка на мишени молек. газа. В кач-ве источника пучка метастабильных атомов использовалась нагреваемая, эффузионная печь с возбуждением атомов прамоточным разрядом низкого напряжения. Относительные скорости образования  $MgO$  в электронных состояниях  $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$  и  $A^1\Pi$  определены по интегральным интенсивностям флуоресценции для систем  $B-X$ ,  $d-a$  и  $D-A$ . Спектры флуоресценции в системе  $B-X$  использо-

X. 1983, 19, N 4



вались для определения относит. заселенностей первых шести колебательных уровней  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$  и т-ры вращательного распределения для основного вибронного состояния. Для обеих рассмотренных экзотермич. р-ций показано, что степень электронного, колебательного и вращательного возбуждения  $\text{MgO}$  значительно ниже предсказываемой в рамках статистич. теории. Низкая эффективность образования  $\text{MgO}(a^3\Pi)$ , отличающая рассматриваемые р-ции от аналогичных р-ций  $\text{Ca}$ , интерпретируется как результат неадиабатич. переходов между Пв потенциальной энергии системы.

А. И. Маергойз

бная  
рцст

MgO

Оттиск 14453

1982

12 Д893. Исследование лазерной флуоресценции MgO, образованной в условиях однократных столкновений  $Mg(3s3p^3P^0) + O_2$  и  $N_2O$ . Laser fluorescence study of MgO formed from  $Mg(3s3p^3P^0) + O_2$  and  $N_2O$  under single-collision conditions. Dagdigan Paul J. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5375—5384 (англ.)

Методом лазерной флуоресценции исследованы реакции взаимодействия метастабильных атомов Mg с  $O_2$  и  $N_2O$ :  $Mg(3s3p^3P^0) + O_2, N_2O \rightarrow MgO + O, N_2$  при давлениях  $P(O_2) = 1,5 \cdot 10^3$  мм рт. ст. и  $P(N_2O) = 4,5 \cdot 10^{-3}$  мм рт. ст. Молекулы MgO регистрировались в основном состоянии  $X^1\Sigma^+$  и нижних электронных состояниях  $a^3\Pi$  и  $A^1\Pi$ . По спектрам возбуждения перехода  $B-X$  измерена заселенность первых шести колебательных уровней  $X^1\Sigma^+$  и вращательная т-ра для уровня с  $v=0$ . По интегр. интенсивностям спектра флуоресценции переходов  $B-X, d-a$  и  $D-A$  получены относит. скорости образования состояний  $X^1\Sigma, a^3\Pi$  и  $A^1\Pi$ . Обсуждаются свойства динамики обеих реакций в сравнении с аналогичными данными, полученными для Ca и Sr. Библ. 62.  
В. П. Шевелько

спектр,  
цветная пл.

ор. 1982, 18,  
N/2

MgO

От 16884

1982

14 Б18. Использование усредненного по состояниям метода МК ССП: применение к излучательным переходам MgO. Use of the state-averaged MCSCF procedure: application to radiative transitions in MgO. Diefenderfer Randall N., Yarkony David R. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 26, 5098—5105 (англ.)

Рассмотрено использование усредненного по состояниям многоконфигурац. метода ССП (МК ССП) для расчета состояний  $1^1\Sigma^+(X)$  и  $2^1\Sigma^+(B)$  молекулы MgO. Методом МК ССП с учетом небольшого числа конфигураций и с различными по весовым множителям усреднением по рассматриваемым состояниям получены МО, к-рые затем использованы в расчете методом конфигурац. взаимодействия с учетом всех конфигураций, однократно и двукратно возбужденных по отношению к функции МК ССП. В интервале межъядерных расстояний от 3,0 до 3,7 ат. ед. получены потенциальные кривые и кривые дипольных моментов состояний

расчет  
м.п.

Х. 1983, 19, N 14.

$X$  и  $B$ . Определены равновесные расстояния и основные частоты колебаний. Впервые рассчитаны момент перехода между этими состояниями как ф-ция межъядерного расстояния и дана оценка времени жизни низшего колебательного  $B$ -состояния. Предложено использовать зависимость результатов от весовых множителей, с к-рыми производилось усреднение по состояниям, для оценки надежности получаемых значений моментов перехода. Исследована сходимость метода МК ССП. Показано, что при усреднении более чем по двум состояниям необходимо использовать процедуру, учитывающую вторые пр-ные как по параметрам орбиталей, так и по коэф. перед конфигурациями.

А. А. Сафонов



MgO

1982

Ohwada Ken.

рабрити J. Chem. Phys., 1982,

Сел. носел. 77, N1, 424-428.

и E.

(Сел. BeB; III)

MgO

[Osmuck 13987]

1982

Okwada K.,

Кв. цех.  
раевин

J. Chem. Phys., 1982,  
76, NS, 2565-2568.



AlgO

Ommuck 13170

1982

Ramakrishna Reddy R,  
Sambasiva Rao P., et al.

факторы

фрагмента-

Колонна

J. Quant. Spectrosc. and  
Radiat. Transfer, 1982, 27,  
N1, 103 - ● 105.

MgO(2)

[Om. 16422]

1983

Электрон-  
структура,  
связь  
(теорет.  
расчет)

Boyer L. L.,

Phys. Rev. B: Condens.  
Matter, 1983, 27, N2,  
1271-● 1275.



MgO

1983

10 Д706. Первичное распределение колебательных и вращательных состояний молекул  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$ , образующихся в реакции атомов  $\text{Mg}(3s3p^1P_1)$  с молекулами  $\text{CO}_2$ . Initial distribution of vibrational and rotational quantum states of  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$  produced in the reaction of  $\text{Mg}(3s3p^1P_1)$  with  $\text{CO}_2$ . Breckenridge W. H., Umemoto H. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 3, 476—479 (англ.)

спектр

Методом возбуждаемой лазером флуоресценции измерено распределение колебательных и вращательных состояний молекул  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$ , образующихся в реакции фотовозбужденных атомов  $\text{Mg}(3s3p^1P_1)$  с молекулами  $\text{CO}_2$ . Показано, что кол-во молекул  $\text{MgO}$ , образующихся в состояниях  $A^1\Pi$ , составляет не более 15%, а моле-

ср. 1983, 18, N10

кулы  $MgO(B^1\Sigma^+)$  в исследованной реакции не образуются. Первичное распределение молекул  $MgO(X^1\Sigma^+)$  по колебательным и вращательным состояниям является более «холодным» по сравнению с предсказаниями статистич. модели. Обсуждена природа потенц. поверхностей состояний, участвующих в исследованной реакции.

Библ. 24.

В. А. Е.

MgO

[Am. 16998]

1983

хемико-  
мисець.

Breckenridge W.H.,  
Umemoto H.,

J. Phys. Chem., 1983,  
87, N10, 1804-1808.

MgO

(Dmmuck 16612) 1983

98: 169479x Radiative lifetimes and transition moments in magnesium oxide. Diffenderfer, R. N.; Yarkony, D. R.; Dagdigan, P. J. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1983, 29(4), 329-31 (Eng). An exptl. and theor. study of several transitions in the MgO mol. is reported. The radiative lifetime of the MgO  $B^1\Sigma^+ v' = 0$  level was  $32.7 \pm 1.7$  ns, while that of the electronic state(s) excited by 372-nm radiation ( $d^3\Delta$  and/or  $f^3\Pi$ ) is  $11.8 \pm 0.5$  ns. The B-X and A-X transition moments were calcd. by using state averaged multiconfiguration SCF and CI methods. With an est. of the B-A transition moment derived from an earlier calcn., the radiative lifetime of the  $B^1\Sigma^+ v' = 0$  level was 24 ns. A value of 0.23 ns was calcd. for the lifetime of  $A^1\Pi v' = 0$ .

мон. ж. н.  
реша,

т.

C. A. 1983, 98, N 20.

MgO

Дм-16612

1983

10 Д275. Радиационные времена жизни и моменты переходов в MgO. Radiative lifetimes and transition moments in MgO. Diffenderfer R. N., Yarkony D. R., Dagdigan P. J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1983, 29, № 4, 329—331 (англ.)

Времена жизни (ВЖ) некоторых возбужденных электронно-колебательных состояний молекулы MgO определены экспериментально и теоретически. Путем регистрации флуоресценции молекул MgO, возбуждаемых перестраиваемым лазером на красителях, найдены ВЖ состояний  $B^1\Sigma^+(v'=0)$  ( $32,7 \pm 1,7$  нс) и  $d^3\Delta$  (возможно также отнесение к  $f^3\Pi$ ) ( $11,8 \pm 0,5$  нс). Теоретические радиационные ВЖ состояний  $B^1\Sigma^+$  и  $A^1\Pi$  получены при помощи расчета ф-ций дипольных моментов переходов  $B-A$ ,  $B-X$  и  $A-X$  неэмпирич. методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений ссылочного детерминанта; для уровней  $v'=0$  эти ВЖ составили 24 и 230 нс соответственно.

А. В. Зайцевский

Вероятность  
переходов

ср. 1983, 18, N 10

MgO

1983

24 B1130. Реакции  $Mg(^1S_0)$ ,  $Mg(^3P_J)$  и  $Mg(^1P_1)$  с двухатомными и трехатомными молекулами окислителей. Reactions of  $Mg(^1S_0)$ ,  $Mg(^3P_J)$ , and  $Mg(^1P_1)$  with diatomic and triatomic oxidants. Breckenridge W. H., Umemoto H. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 10, 1804—1808 (англ.)

спектр

Лазерные методы используются для исследования р-ций атомов Mg в основном состоянии  $3s3s^1S_0$  и возбужденных состояниях  $3s3p^3P_J$  и  $3s3p^1P_2$  с молекулами окислителей  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N_2O$ ,  $CO_2$  и  $SO_2$  в условиях газового потока He. Возбуждение атомов Mg осуществлялось импульсами длительностью 6 нс излучения лазера на красителе. Т-ра в зоне взаимодействия с лазерным излучением равнялась 425 и 520 К в экспериментах с синглетными и триплетными возбужденными состояниями Mg соотв. В интервале времени 40—90 нс после импульса возбуждающего лазерного излучения осу-

ы (с  
аяг

Х. 1983, 19, № 24

ществлялась регистрация и спектральный анализ с разрешением  $60 \text{ \AA}$  хемиллюминесцентного излучения из зоны р-ции. С задержкой в несколько нс по отношению к импульсу излучения, возбуждающего атомы Mg, с помощью 2-го перестраиваемого лазера на красителе осуществлялось сканирование спектрального диапазона, в котором возможна регистрация продуктов методом лазерно индуцированной флуоресценции. С помощью указанного метода образование  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$  зарегистрировано в р-ции невозбужденных атомов с единственным из рассмотренных окислителей, (с.  $\text{N}_2\text{O}$ ). Вращательное распределение  $\text{MgO}$ , образующегося в указанной р-ции, оказалось к моменту регистрации равновесным. В то же время обнаружен значительный избыток колебательной энергии. Методом лазерно индуцированной флуоресценции зарегистрировано образование  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$  в р-циях  $\text{Mg}(^1P_1)$  с  $\text{CO}_2$  и  $\text{SO}_2$ . Соотв-щих р-ций для  $\text{O}_2$  и  $\text{NO}$  не наблюдалось. Сильная хемиллюминесценция в спектральной области  $4950\text{--}5050 \text{ \AA}$  при возбуждении Mg в состояние  $^1P_1$  в присутствии  $\text{N}_2\text{O}$  приписывается переходу  $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$  в образующейся электронно-возбужденной молекуле  $\text{MgO}$ . В этом случае зарегистрирована также хемиллюминесценция в окрестности  $3800 \text{ \AA}$ . Методом лазерно индуцированной флуоресценции из состояния  $^3S_1$  исследовалось тушение  $\text{Mg}(^1P_1 \rightarrow ^3P_J)$  молекулами  $\text{O}_2$  и  $\text{NO}$ , а также зарегистрировано образование  $\text{MgO}(X^1\Sigma^+)$  в р-ции  $\text{Mg}(^3P_J)$  (статистически заселенный мультиплет) с  $\text{O}_2$ . Моделирование различных колебательных полос спектра лазерно-индуцированной флуоресценции в этом случае показало наличие единого бoльцмановского распределения по вращательным уровням с эффективной т-рой  $1400 \text{ K}$ . Отмечается, что различные варианты статистич. моделей дают для этого случая завышенные значения запасенной вращательной и колебательной энергии образующейся молекулы  $\text{MgO}$ .

А. И. Маергойз

MgO

Dom. 18041

1983

Sharma B. S., Tripathi

A. N., et al.

J. Chem. Phys., 1983, 79,

NG, 3164 - 3165.



meop-  
pariam



MgO

1983

22 Б1055. К вопросу о реакции  $Mg+N_2O \rightarrow MgO+N_2$ . On the reaction  $Mg+N_2O \rightarrow MgO+N_2$ . Yarkony David R. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6763—6772 (англ.)

Спектр

Теоретически исследованы низколежащие Пв потенциальной энергии [синглетная ( $^1A'$ ) и триплетная ( $^3A'$ )] р-ции  $Mg+N_2O(^1\Sigma^+) \rightarrow MgO+N_2(^1\Sigma_g^+)$  с использованием методов полусогласованного поля, многоконфигурац. полусогласованного поля и конфигурац. взаимодействия. Сделана попытка объяснения различия в реакционной способности  $Mg(^1S)$  и  $Mg(^3P)$ . Для этого на Пв пс

X, 1983, 19, N 22.

тенциальной энергии симметрии  $C_s$ , соотв-щих  $Mg(^1S)$  [ $1^1A'$ ] и  $Mg(^3P)$  [ $1^3A'$ ], качественно выделены три смежные области, характеризующиеся определенными величинами координаты р-ции ( $\xi$ ): область реагентов, где  $\xi = \xi_1 \simeq R(Mg-O)$ ; область изгиба, где  $\xi = \xi_2 = \sphericalangle NNO$ ; область продуктов, где  $\xi = \xi_3 \simeq R(N-O)$ . Показано, что для перехода в 3-ю область необходим перенос заряда от Mg на  $N_2O$ :  $Mg^0 + N_2O^0 \rightarrow (N_2O^- - Mg^+)$ . Перенос заряда приводит к искривлению  $N_2O^-$  и переходу от симметрии  $C_{\infty v}$  к изогнутой структуре. На Пв  $^3A'$ , соотв-щей  $MgO(a^3\Pi)$ , этот процесс протекает на склоне в долину продуктов и вызывает орбитальную перестройку  $N_2O$ . На Пв  $^1A'$ , к-рая соотв.  $MgO(X^1\Sigma^+)$  процесс протекает в области реагентов  $\xi = \xi_1$ . Предложены возможные объяснения глубоких различий в р-ционной способности Ca и Mg по отношению к  $N_2O$ .

Л. Б. Сорока

Algo

(Om. 19554) 1984

Adamowicz Z., McCullough E.A., Jr.

M. R.,

Chem. Phys. Lett., 1984,

Do;

107, N1, 72-76.

(see  $\text{LiM}$ ; III)

Mgd (2)

[Om. 19554]

1984

Adamovitz L.,  
McCullough E.A., Jr.,

de-n.

Chem. Phys. Lett.,  
1984, 107, N1, 72-76.



MgO

От. 20416

1984

4 Л468. Изучение системы  $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  окиси магния методами возбуждаемой лазером флуоресценции и двойного микроволновооптического резонанса. Laser-induced fluorescence and microwave-optical double-resonance study of the  $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  system of magnesium monoxide. Azuma Yoshiro, Dyke Thomas R., Gerke Gretchen K., Steimle Timothy C. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 108, № 1, 137—142 (англ.)

С помощью лазера с перестраиваемой длиной волны получен спектр возбуждения флуоресценции  $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  MgO. Газообразную окись магния получали реакцией паров Mg с  $N_2O$  при высоких т-рах. Проведено отнесение структуры и измерены частоты вращательных линий переходов  $v' = 0 \leftarrow v'' = 0$  и  $v' = 1 \leftarrow v'' = 1$  системы  $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ . На основании этих данных, а также измеренных ранее авторами методом двойного микроволново-оптич. резонанса частот вращательных переходов основного состояния, вычислены спектроскопич. постоянные состояний  $B^1\Sigma^+$  и  $X^1\Sigma^+$  MgO. Библ. 21.

Е. Н. Т.

спектр,  
М.А.

Ф. 1985, 18, 24

MgO

(Om. 20416)

1984

101: 200696x Laser-induced fluorescence and microwave-optical double-resonance study of the  $B^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  system of magnesium monoxide. Azuma, Yoshiro; Dyke, Thomas R.; Gerke, Gretchen K.; Steimle, Timothy C. (Chem. Phys. Inst., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 108(1), 137-42 (Eng). Doppler-limited, laser-induced fluorescence spectra on the  $B^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  ( $v' = v'' = 0$  and 1) system of MgO were obtained. The results of the optical anal. were merged with microwave-ODR measurements to produce the following set of spectroscopic parameters for the  $B$  and  $X$  states, where the units are in  $\text{cm}^{-1}$ , and the uncertainties represent 95% confidence limits:  $T_{0,0} = 20,003.594(2)$ ;  $B'_0 = 0.58004(3)$ ;  $D'_0 = 1.13(2) \times 10^{-6}$ ;  $B''_0 = 0.57198(3)$ ;  $D''_0 = 1.20(2) \times 10^{-6}$ ;  $T_{1,1} = 20,043.423(2)$ ;  $B'_1 = 0.57528(4)$ ;  $D'_1 = 1.14(11) \times 10^{-6}$ ;  $B''_1 = 0.56674(4)$ ;  $D''_1 = 1.22(10) \times 10^{-6}$ .

лазерный  
ФНЧФ,

М.Н.

C.A. 1984, 101, N 22

MgO

от. 19769

1984

3 Л1505. Исследование ряда реакций окисления  $Mg(^1S, ^3P^0)$  методами спектроскопии хемилюминесценции и лазерного возбуждения флуоресценции. Энергия диссоциации MgO. Chemiluminescence and laser fluorescence study of several  $Mg(^1S, ^3P^0)$  oxidation reactions. On the MgO dissociation energy. Cox John W., Dagdigan Paul J. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 12, 2455—2459 (англ.)

$Do^0$ ;

Методами спектроскопии хемилюминесценции и лазерного возбуждения флуоресценции исследованы реакции  $Mg(^1S, ^3P^0)$  с  $N_2O$ ,  $NO_2$ ,  $O_3$ ,  $CO_2$  и  $SO_2$ , проводимые способом взаимодействия атомарного пучка с газом низкого давления. Хемилюминесценция наблюдалась в реакциях  $Mg(^3P^0)$  с  $NO_2$  и  $O_3$ ; в остальных реакциях регистрировалось основное состояние  $MgO(X^1\Sigma^+)$ . По данным, полученным для реакций с

ср. 1985, 18, №3

$O_3$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$  и  $NO_2$ , оценены нижние границы энергии диссоциации  $MgO$ : 1,8; 2,53; 2,64 и 3,1 эВ соответственно. За исключением последнего значения, эти результаты хорошо согласуются с рассчитанным теоретически значением  $D_0^0(MgO) = (2,65 \pm 0,16)$  эВ. Предположено, что высокое значение  $D_0^0(MgO)$ , полученное по результатам реакции  $Mg(^1S) + NO_2$ , обусловлено существованием для этой реакции энергетич. барьера, величина которого оценена  $\sim 0,5$  эВ. Библ. 60.

С. В. Литке



MgO

От 19769

1984

24 Б4483. Изучение некоторых реакций окисления  $Mg(S^1, ^3P^0)$  при помощи хемилюминесценции и лазерной флуоресценции: об энергии диссоциации  $MgO$ . Chemiluminescence and laser fluorescence study of several  $Mg(^1S, ^3P^0)$  oxidation reactions: on the  $MgO$  dissociation energy. Cox John W., Dagdikian Paul J. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 12, 2455—2459 (англ.)

При помощи Хл и лазерной Фл (ЛФ) изучены р-ции  $Mg(^1S, ^3P^0)$  с  $NO_2$ ,  $O_3$ ,  $CO_2$  и  $SO_2$ . Использована методика «пучок — рассеивающий газ». Для получения метастабильных атомов применялся электрич. разряд. В р-ции  $Mg(^3P^0) + NO_2$  (давл.  $\sim 0,8$  мТорр) непрерывный спектр Хл отнесен к переходам  $NO_2 A^2B_2 \rightarrow X^2A_1$ , возбуждаемым при резонансном переносе энергий от  $Mg(^3P^0)$ ; сечение переноса  $\sim 1,4$  А<sup>2</sup>. В р-ции  $Mg(^3P^0) + O_3$  зарегистрированы спектры Хл на переходах  $MgO B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ ,  $\lambda = 496$  нм и  $d^3\Delta \rightarrow a^3\Pi$ ,  $\lambda = 373$  нм. Полное сечение р-ции  $\sigma = 254 \pm 75$  А<sup>2</sup>, выход фотонов  $\sim 0,003\%$ . Продукты в основном состоянии  $MgO (X)$

спектр, До;

Х. 1984, 19, №24.

зарегистрированы при помощи ЛФ в р-циях  $\text{Mg}(^3P^0)\text{SO}_2$  и  $\text{CO}_2$  и  $\text{Mg}(^1S)$  с  $\text{NO}_2$  и  $\text{N}_2\text{O}$ . Эти р-ции использованы для определения нижней границы энергии диссоциации  $\text{MgO}$ . Наибольшее значение  $D_0^0(\text{MgO}) \geq 3,1$  эВ получено для р-ции  $\text{Mg}(^1S) + \text{NO}_2$ . Этот результат соответствует расчетному значению  $D_0^0(\text{MgO}) = 2,65 \pm 0,16$  эВ, если только эта р-ция имеет энергетич. барьер  $\sim 0,5$  эВ. В условиях эксперимента только  $\sim 1\%$  столкновений соответствует избыточной энергии 0,5 эВ, чем, по-видимому, и объясняется низкая интенсивность. ЛФ  $\text{MgO}$ .

Л. Ю. Мельников

MgO

OM. 19769

1984

$D_0^0$ ;

100: 218309n Chemiluminescence and laser fluorescence study of several magnesium( $^1S, ^3P^0$ ) oxidation reactions: on the magnesium oxide dissociation energy. Cox, John W.; Dngdigian, Paul J. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Phys. Chem.* 1984, 88(12), 2455-9 (Eng). Chemiluminescence and laser fluorescence studies were carried out on the reactions of Mg( $^1S, ^3P^0$ ) with  $NO_2$ ,  $O_3$ ,  $CO_2$ , and  $SO_2$ . For Mg( $^3P^0$ ) +  $NO_2$ , a continuum was obsd. and ascribed to an  $E \rightarrow E$  energy transfer forming excited  $NO_2(A^2P_2)$ . Weak MgO chemiluminescence in the arc bands and  $B-X$  system was seen in Mg( $^3P^0$ ) +  $O_3$ ; the photon yield was detd. to be  $\sim 0.003\%$ . Ground-state MgO( $X^1\Sigma^+$ ) product was detected by laser fluorescence in the Mg( $^3P^0$ ) +  $CO_2$  and  $SO_2$  reactions and in Mg( $^1S$ ) +  $NO_2$  and  $N_2O$ . These reactions were used to set lower bounds to the MgO dissociation energy, for which there is a disagreement between theor. and exptl. detns. The highest lower bound of  $D_0^0$  (MgO)  $\geq 3.1$  eV was obtained from the Mg( $^1S$ ) +  $NO_2$  reaction. This result is consistent with a recent ab initio value of  $D_0^0$ (MgO) =  $2.65 \pm 0.16$  eV if this reaction has a translational energy barrier. Such a barrier is likely in view of the small MgO signals seen in the present expts.

C.A. 1984, 100, N 26

MgO

1984

19 Б4005. Сечения столкновительного переноса энергии между низколежащими электронными состояниями  $MgO(X^1\Sigma^+, a^3\Pi, A^1\Pi)$  в соударениях с  $N_2O$ . Cross sections for collisional energy transfer between low-lying electronic states of  $MgO(X^1\Sigma^+, a^3\Pi, A^1\Pi)$  in collisions with  $N_2O$ . Pouilly Brigitte, Robbe Jean-Michel, Alexander Millard H. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 1, 140—148 (англ.)

Дипольная модель (Alexander M. H., «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 429) для индуцированных столкновениями переходов между близлежащими вращат. уровнями различных электронных состояний расширена для описания неупругих соударений  $MgO$  с  $N_2O$ , сопровождающихся переходами между вращат. уровнями состояний  $X^1\Sigma^+, A^1\Pi, a^3\Pi$  молекулы  $MgO$ . Матричные элементы эл. дипольного оператора рассчитывались методом ССП с конфигурац. взаимодействием с учетом смешивания волновых ф-ций  $A^1\Pi$  и  $X^1\Sigma^+$  приближения Борна —

спектр,  
расчет М.А.

X.1984, 19, N 19

Оппенгеймера. Неупругие сечения переходов ( $J \rightarrow J, J+1$ ) рассчитаны в рамках 1-го борновского приближения для отдельных колебат. уровней. Найдено, что если в молекуле возможно квазипересечение вращат.-колебат. уровней различных борн-оппенгеймеровских состояний, то возможны большие сечения (порядка  $10-20 \text{ \AA}^2$ ); при этом макс. величина сечения уменьшается с ростом вращат. квантового числа  $J$ . Н. И. Бутковская

MgO

1984

9 Д235. Сечения столкновительного переноса энергии между низколежащими электронными состояниями MgO ( $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$ ,  $A^1\Pi$ ) в столкновениях с  $N_2O$ . Cross sections for collisional energy transfer between low-lying electronic states of MgO ( $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$ ,  $A^1\Pi$ ) in collisions with  $N_2O$ . Pouilly Brigitte, Robbe

Jean-Michel, Alexander Millard H. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 1, 140—148 (англ.)

Дипольная модель, предложенная Александром (Alexander M. H. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 429) для индуцированного столкновениями переноса энергии между тесно расположенными вращательными уровнями различных электронных состояний, применена для основного  $X^1\Sigma^+$  и низколежащих  $A^1\Pi$  и  $a^3\Pi_0$  со-

спектр

ср. 1984, 18, № 9

стояний молекулы  $MgO$  при столкновениях с молекулой  $N_2O$ . Спин-орбитальное или спин-вращательное смешивание двух борн-оппенгеймеровских состояний приводит к значительным дипольным моментам между состояниями полного молекулярного гамильтониана. Эти дипольные моменты и их фазы относительно фаз матричных элементов возмущения определены методом ССП КВ. Столкновительная связь переходных диполей между различными состояниями  $MgO$  с постоянными диполями молекулы  $N_2O$  рассмотрена в рамках первого приближения Борна. Получены сечения переходов между вращательными состояниями отдельных почти резонансных колебат. уровней для состояний  $X^1\Sigma^+$ ,  $A^1\Pi_{e,f}$  и  $a^3\Pi_{0e}$  молекулы  $MgO$ . Сечения довольно велики (хотя и не настолько, как для  $CaO$ ) в окрестности пересечений между различными вращательными состояниями. Резюме

MgO

1984

100: 111351t Laboratory measurements of the millimeter-wave spectrum of magnesium monoxide. Steimle, T. C.; Azuma, Y.; Carrick, P. G. (Chem. Phys. Inst., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *Astrophys. J.* 1984, 277(1, Pt. 2), L21-L22 (Eng). Lab.-measured frequencies for the lowest rotational transitions of the  $v = 0$  and  $v = 1$ ,  $X^1\Sigma^+$  state of MgO are reported. Microwave optical double resonance techniques were used in obtaining these measurements.

den check

C.A. 1984, 100, N 14



MgO

1985

7 Л178. Лазерные спектры возбуждения окиси магния в области 353—383 нм. Laser excitation spectra of magnesium oxide in the 353—383 nm region. Bourguignon B., McCombie J., Rostas J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 113, № 4, 323—329 (англ.)

С использованием лазера на красителе, перестраиваемого в области 353—383 нм, с разрешением 0,2 см<sup>-1</sup> получены спектры возбуждения молекул MgO, образуемых в высокотемпературном газовом разряде. Часть спектра, состоящего из ~50 интенсивных и 50 слабых максимумов, интерпретирована как синглет-синглетные  $D^1\Delta \cdot O^1\Sigma - A^1\Pi$ , триплет-триплетные  $d^3\Delta - a^3\Pi$  и интеркомбинационные  $D^1\Delta, C^1\Sigma - a^3\Pi$ -переходы. Получено подтверждение интерпретации динамики фотореакции системы Mg+O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O (Dagdigian P. J. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 5375) и определены параметры колебаний в состоянии <sup>3</sup>Π. Показано, что для идентификации остальных частей спектра необходимо изучение селективно возбуждаемой флуоресценции. Библ. 29.

спектр, И.Н.

И. Н. А.

ср. 1985, 18, № 7

MgO

От. 20948 1985

12 Б1154. Спектр лазерного возбуждения оксида магния в области 353—383 нм. Laser excitation spectra of magnesium oxide in the 353—383 nm region. Bourguignon B., McCombie J., Rostas J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 113, № 4, 323—329 (англ.)

Измерены спектр лазерного возбуждения флуоресценции (Фл) и спектры Фл молекул MgO, получающихся при взаимодействии паров металла с N<sub>2</sub>O. Спектры возбуждались импульсным перестраиваемым (353—383 нм) лазером на красителе (ширина полосы возбуждения 0,2 см<sup>-1</sup>). В спектре возбуждения наблюдалось около 50 интенсивных и 50 слабых пиков с различной структурой. Сравнительно низкое разрешение не позволило провести анализ вращательной структуры полос. Предварительно интерпретированы ~20 пиков, относящихся к синглет-синглетным, интеркомбинац. и триплетным системам. В 1-й группе выделено по 4 полосы секвенций  $\Delta v = 0$  ( $v = 0-3$ ) переходов  $C^1\Sigma^- - A^1\Pi$  (~377—379 нм) и  $D^1\Delta - A^1\Pi$  (380—383 нм). Во 2-й

М.П.

Х. 1985, 19, N 12

группе наблюдались полосы 0—0-, 1—1- и 2—2-перехода  $D^1\Delta - a^3\Pi_1$  (367—368 нм) и полосы, предварительно отнесенные к переходу  $C^1\Sigma^- - a^3\Pi$  (0—0, 1—1, 2—2, 364—365 нм). Третья группа полос отнесена к переходу  $d^3\Delta - a^3\Pi$  ( $\Delta v = 0$ ;  $v = 0, 1$ ; 372—373 нм). Идентификация проведена на основании сопоставления с экспериментом факторов Франка—Кондона и модельных спектров, вычисленных по известным мол. постоянным. Получены след. новые данные: состояние  $a^3\Pi_1 - \omega_e = 648,3$ ,  $\omega_e x_e = 3,9$   $\text{см}^{-1}$ ; состояние  $d^3\Delta$ , значения  $A$  (пост. спин-орбитального расщепления),  $B$ ,  $e$  (параметр асимметрии),  $v\Delta_{v=0(d-a)}$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) — 22,5; 0,5050; 5,8; 26 844 ( $v_d = 0$ ); — 21,5; 0,5000; 7,0; 26847,0 ( $v_d = 1$ ).

В. М. Ковба

Alg<sup>o</sup>

Langhoff S.R.,

1985

Bauschlicher Ch.W., et al.

Comp. Ab Initio Quant.

Chem. Exp. Small Mol. State

et. n. Art. Proc. Symp., Philadelphia,

Pa, 27-29 Aug., 1984. Dor-

recht e. a. 1985, 357-

-407. (es. LiF; III)

МЛО [22909] [Ом. 21025] 1985

Соломонову В. Г.,

Озерова В. М. и др.

расчёт  $V_i$ ,  
смы. по сдв.,  
голланд.

Ж. физ. химии,  
1985, 59, № 2, 371-  
376.

(св. На Ф; III)

MgO

1986

19 Б4378. Распределение внутренней энергии в  $\text{MgO}(a^3\Pi)$ , образованном в реакциях  $\text{Mg}(^3P) + \text{O}_2$  и  $\text{N}_2\text{O}$ . Случай инверсии заселенностей. Internal energy distribution in  $\text{MgO}(a^3\Pi)$  formed from  $\text{Mg}(^3P) + \text{O}_2$  and  $\text{N}_2\text{O}$ : a case of population inversion. Bourguignon Bernard, Rostas Joelle, Taleb Guy, Gargoura Mohammed-ali, McCombie June. «Laser Chem.», 1986, 6, № 1, 15—35 (англ.)

На основе анализа спектров лазерной Фл продуктов р-ций метастабильных атомов  $\text{Mg}(3s3p^2P^o)$  с  $\text{O}_2$  и  $\text{N}_2\text{O}$ , полученных в работе (Dagdigian P. J., «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 5375) в условиях однократных соударений вычислены относит. заселенности различных уровней продукта р-ций  $\text{MgO}(a^3\Pi)$ . Показано, что  $\text{MgO}(a^3\Pi)$ , образованный в р-ции  $\text{Mg} + \text{O}_2$ , обнаруживает очень низкое колебат.-вращат. возбуждение, что согласуется с механизмом его образования через долгоживущий промежут. комплекс  $\text{MgO}_2$ . В то же время образование  $\text{MgO}(a^3\Pi)$  в р-ции  $\text{Mg}(^3P) + \text{N}_2\text{O}$  характери-

( $a^3\Pi$ )  
( $\chi^1\Sigma^+$ )

X. 1986, 19, N 19

зуется след. особенностями: 1) инверсией заселенностей колебат. уровней (максимум приходится на уровни  $v=2-3$ ); 2) заселением высоких вращат. уровней  $J$ ; 3) селективным заселением уровней ТС (образование компонента  $a^3\Pi_2$  сильно снижено). В то же время состояние  $MgO(X^1\Sigma^+)$ , образующееся в этой же р-ции, характеризуется плавным распределением заселенностей колебат. уровней  $v=0-5$  и низкой вращат. т-рой  $\sim 700$  К. Это различие объяснено разными путями об-

разования этих состояний  $MgO$ . Высокое вращат. возбуждение  $MgO(a^3\Pi)$  связано с его образованием из изогнутого переходного состояния  $Mg^+N_2O^-$ , тогда как  $MgO(X^1\Sigma^+)$  может возникать по сходному механизму после перехода с потенц. Пв  $^3A'$  на Пв типа  $^1A'$ .

В. Е. Скурат



MgO

1986

105: 123415h Laser spectroscopy of magnesia: the  $d^3\Delta$  and  $e^3\Sigma^+$  states. Application to the magnesium( $^3P, ^1P$ ) + nitrous oxide reaction kinetics. Bourguignon, Bernard; Rostas, Joelle (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *NBS Spec. Publ. (U. S.)* 1986, 716, 83-101 (Eng). The anal. is reported of the 363-365 nm laser induced fluorescence and excitation spectra of MgO produced by the reaction between Mg( $^1P, ^3P$ ) and N<sub>2</sub>O in a Broida oven. Features at 363.39, 363.80, 363.82 and 363.87 nm are, resp., the Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub>, Q<sub>3</sub>, and Q<sub>4</sub> heads of the  $d^3\Delta - a^3\Pi(1-0)$  band. Partial anal. of the (0-0) and (1-0) bands of this transition provided improved mol. parameters for the  $d^3\Delta$  state. A band at  $\sim 364.0$  nm was assigned to the forbidden  $e^3\Sigma^+ - A^1\Pi(3-0)$  band. This assignment is substantiated by partial rotational anal., ab initio calens., and earlier spectroscopic work. The  $e^3\Sigma^+$  state arising from the same configuration  $\dots\pi^3\pi$ , as the  $d^3\Delta, D^1\Delta, C^1\Sigma^-,$  and  $E^1\Sigma^+$  states, was characterized. This new spectroscopic data on MgO provides a tool to understand the Mg( $^3P, ^1P$ ) + N<sub>2</sub>O + He kinetics at room temp. The Mg( $^3P$ ) + N<sub>2</sub>O reaction produces directly both the  $A^1\Pi$  and  $a^3\Pi$  states. The  $A^1\Pi$  is efficiently depleted by reaction with Mg( $^1P$ ) producing chemiluminescent MgO states. There is no efficient secondary reaction involving the  $a^3\Pi$  state.

( $d^3\Pi - a^3\Pi$ )

$e^3\Sigma^+ - A^1\Pi$

u.n.

e.A. 1986, 105, N 14



MgO

1986

24 Б1260. Спектры и кинетика лазерной флуоресценции монооксидов магния, кальция и стронция. Добряков В. В., Молякин А. П., Кузяков Ю. Я. «Исслед. структуры и энерг. молекул». Иваново, 1986, 154—162

спектр

Описана установка, созданная для определения времен жизни возбужденных состояний двухатомных молекул, методом лазерной флуоресценции, но позволяющая проводить и целый ряд др. измерений. Рассмотрены результаты исследования на этой установке молекул MgO, CaO, SrO.  
Из резюме

x. 1986, 19, N 24

(+2)



MgO

1986

20 Б4362. Кинетическое исследование столкновительного тушения  $Mg(3^3P_J)$  молекулами  $N_2O$  в диапазоне температур 600—1100 К методом разрешенной во времени атомной эмиссии и процесса электронно-электронного (и колебательного) переноса энергии  $Mg(3^3P_J) + MgO$  методом молекулярной хемилюминесценции после импульсного возбуждения лазером на красителе при  $\lambda = 457,1$  нм перехода  $[Mg(3^3P_1) \leftarrow Mg(3^1S_0)]$ . Kinetic investigation of the collisional quenching of  $Mg(3^3P_J)$  by  $N_2O$  over the temperature range 600—1100 K by time-resolved atomic emission and  $E-(E, V)$  transfer between  $Mg(3^3P_J) + MgO$  by molecular chemiluminescence following pulsed dye-laser excitation at  $\lambda = 457,1$  nm  $[Mg(3^3P_1) \leftarrow Mg(3^1S_0)]$ . Husain David, Roberts Gareth. «J. Chem. Soc. Faraday. Trans.», 1986, 82, № 3, Pt2, 395—413 (англ.)

спектр

В диапазоне т-р 600—1100 К изучена т-рная зависимость дезактивации возбужденных атомов  $Mg^*(3^3P_J)$  (энергия возбуждения 2,712 эВ по отношению к основ-

X. 1986, 19, № 20

ному состоянию  $3^1S_0$ ) в соударениях с молекулами  $N_2O$ . Атомы  $Mg^*$  генерировали путем импульсного возбуждения паров  $Mg$  в переходе  $Mg(3^3P_1 \leftarrow 3^1S_0)$  светом 457,1 нм перестраиваемого лазера на красителе. Кинетику гибели атомов  $Mg^*$  контролировали по интенсивности эмиссии света в этом запрещенном резонансном переходе. Параметры уравнения Аррениуса для константы скорости тушения  $Mg^*$  молекулами  $N_2O$  таковы:  $A = (2,6 + 3,5; -1,5) \cdot 10^{-10}$  см<sup>3</sup>/(молекула·с);  $E = 41,3 \pm \pm 5,3$  кДж/моль. Методом разрешенной во времени молек. эмиссии  $MgO^*$  изучена также кинетика превращений этих возбужденных молекул. Кинетич. кривые эмиссии для каждого возбужденного состояния  $MgO^*$  обнаруживают максимумы, показывая тем самым, что их заселение происходит не в прямой р-ции  $Mg^*(3^3P_J)$  с  $N_2O$ , а в процессе переноса энергии с  $Mg^*(3^3P_J)$  на образованные ранее долгоживущие состояния  $MgO(X^1\Sigma^+, a^3\Pi, A^1\Pi, b^3\Sigma^+)$ . Анализ эмиссионных спектров  $MgO^*$  указывает на сильное колебат. возбуждение  $MgO^*$  (колебат. т-ра в 2—5 раз выше т-ры газа) в процессе переноса энергии. По оценкам конц-ии  $MgO$  в состояниях  $d^3\Delta$  и  $D^1\Delta$  составляют  $\sim 0,1\%$  от конц-ии  $MgO$  ( $B^1\Sigma^+$ ).

В. Е. Скврат

MgO

1986

1/19 Б4008. Кинетическое исследование: а) столкновительного тушения  $\text{Mg}(3^3P_J)$  молекулами  $\text{CO}_2$  в области температур 600—1100 К при помощи разрешенной по времени атомной эмиссии ( $\text{Mg}(3^3P_1) \rightarrow \text{Mg}(3^1S_0) + h\nu$ ) и б) передачи энергии  $E \rightarrow (E, V)$  от  $\text{Mg}(3^3P_J)$  к  $\text{MgO}$  при помощи разрешенной по времени молекулярной эмиссии ( $\text{MgO}, B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$  и  $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ ), возникающей при возбуждении импульсным лазером с  $\lambda = 457,1$  нм ( $\text{Mg}(3^3P_1) \leftarrow \text{Mg}(3^1S_0)$ ). Kinetic investigation of (a) the collisional quenching of  $\text{Mg}(3^3P_J)$  by  $\text{CO}_2$  over the temperature range 600—1100 K by time-resolved atomic emission ( $\text{Mg}(3^3P_1) \rightarrow \text{Mg}(3^1S_0) + h\nu$ ) and (b)  $E \rightarrow (E, V)$  transfer from  $\text{Mg}(3^3P_J)$  to  $\text{MgO}$  by time-resolved molecular emission ( $\text{MgO}, B^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$  and  $B^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$ ) following pulsed dye-laser excitation at  $\lambda = 457.1$  nm ( $\text{Mg}(3^3P_1) \leftarrow \text{Mg}(3^1S_0)$ ). Husain David, Roberts Gareth. «Ber. Bunsenges. phys. chem.», 1986, 90, № 4, 360—369 (англ.)

( $B^1\Sigma^+$ )

X. 1986, 19, N 19

В условиях медленного потока исследована кинетика указанных в заголовке процессов. Зависимость эффективной константы скорости процесса (а) от  $T$ -ры дается выражением  $k = (2,4_{-0,5}^{+0,7}) \cdot 10^{-10} \exp(-47,6^{+5,8} \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}/RT) + (8,1_{-2,1}^{+2,9}) \cdot 10^{-4} \exp(-171,3 \pm 34,3 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}/RT) \text{ см}^3 (\text{молекула} \cdot \text{с})$ . Второй член отражает вклад двух каналов процесса (а)  $\text{Mg}(3^3P_J) + \text{CO}_2 \rightarrow \text{MgO} + \text{CO}$  и  $\text{Mg}(3^3P_J) + \text{CO}_2 \rightarrow \text{Mg}(3^1S_0) + \text{CO}_2$  в скорость расходования атомов  $\text{Mg}(3^3P_J)$ . Обнаружена Хл молекул  $\text{MgO}(B^1\Sigma^+)$  (I); возникающих в прямом процессе  $\text{Mg}(3^3P_J) + \text{CO}_2$ . Измерены колебат. и вращат.  $T$ -ры I, составляющие  $T_V = 3042 - 2346 \text{ К}$  и  $T_R = 850 - 1100 \text{ К}$ .

Л. Ю. Русин



Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

1986

Langhoff S. R.,  
Baenschlicker Ch. W., et al.


param

J. Chem. Phys., 1986,

n. n.

Do, Si, n. n.

84, N 8, 4474 - 4480.

(see  LiO; III)

MgO<sup>+</sup> (Om. 23732) 1986

Partridge Harry,  
Langhoff S.R., et al.

D<sub>0</sub>, n.r.,  
ab initio  
paerem

J. Chem. Phys. 1986,  
84(8), 4489-96.

(cor. BeO<sup>+</sup>; III)

MgO

[ OM. 25866 ]

1986

Pyper N. C.

ab initio  
pacrim.

Phil. Trans. Roy.  
Soc. London, 1986,

A 320, N 1553, 107 -  
● - 158.



MgO

1986

105: 51138v The microwave absorption spectrum of magnesium oxide. Toerring, T.; Hoelt, J. (Inst. Molekuelphys., Freien Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 126(6), 477-80 (Eng). The microwave absorption spectrum of  $^{24}\text{MgO}$ ,  $^{25}\text{MgO}$ , and  $^{26}\text{MgO}$  was obsd. at 67-275 GHz. Quadrupole hyperfine structure of  $^{25}\text{MgO}$  was partially resolved. The mol. consts. derived from these measurements are 2 orders of magnitude more accurate than previous results.

YB CREEP,  
M.N.

C.A. 1986, 105, N 6

MgO

1986

19 B1219. Микроволновый спектр поглощения MgO.  
The microwave absorption spectrum of MgO. Torr-  
ring T., Hoelt J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 6,  
477—480 (англ.)

В диапазоне 67—275 ГГц измерен МВ-спектр погло-  
щения MgO ( $X^1\Sigma^+$ ,  $v=0-2$ ). Молекулы MgO получа-  
ли непосредственно в ячейке поглощения при взаимо-  
действии паров магния ( $^{24, 25, 26}\text{Mg}$ ) с  $\text{N}_2\text{O}$ . В случае  
 $^{25}\text{MgO}$  удалось частично разрешить ядерную СТС  
( $eqQ = -9,5$  МГц). Значения молек. постоянных  $^{24}\text{Mg}-$   
 $^{16}\text{O}$ :  $Y_{01} = 17229,2034$ ,  $Y_{11} = -159,6026$  МГц,  $Y_{21} = -99,4$ ,  
 $Y_{02} = -36,958$ ,  $Y_{12} = -0,091$  кГц,  $\omega_e = 784,78$ ,  $\omega_e x_e =$   
 $= 5,264$  см $^{-1}$ ,  $R_e = 1,748382$  А,  $a_0 = 267917$  см $^{-1}$ ,  $a_1 =$   
 $= -3,10830$ ,  $a_2 = 5,970$ ,  $a_3 = -9,26$  ( $a_i$  — изотопич. не-  
зависимые параметры потенциальной ф-ции Данхема).  
В. М. Ковба

(М.П.)

X. 1986, 19, N 19

MgO

1986

Л 9 Л175. Микроволновый спектр поглощения MgO.

The microwave absorption spectrum of MgO. Tör-  
ring T., Hoelt J. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 6,  
477—480 (англ.)

Изучены микроволн. спектры поглощения (область  
67—275 ГГц) паров (давл.  $\sim$  Тор,  $T \sim 925$  К)  $^{24}\text{MgO}$  (I),  
 $^{25}\text{MgO}$  (II) и  $^{26}\text{MgO}$  (III). Проведено отнесение линий  
в спектрах к различным типам переходов. Для II на-  
блюдалось сверхтонкое квадрупольное расщепление ли-  
ний. Определены молекулярные постоянные  $Y_{01}$ ,  $Y_{11}$ ,  $Y_{22}$ ,  
 $Y_{02}$ ,  $Y_{12}$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e X_e$ ,  $a_0$ ,  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $r_0$  и  $\mu$  в основном со-  
стоянии  $X^1\Sigma^+$ . Значения  $\omega_e$  и  $\omega_e X_e$  хорошо согласуются  
с данными оптич. измерений. В. В. Белякова

(М.П.)

ф. 1986, 18, N 9

Algo

1986

Walvekar A.P., Rama M.A.,

расчёт  
потенциала  
ср-цм

Indian J. Phys., B  
1986, 60B (2), 225-7.

(см.  $C_2$ ; III)

1190

1986

Walvekar A. P.,  
Rama M. A.

n.n. Indian J. Phys., 1986,  
B60, N2, 235-237.

(Cur. O<sub>2</sub>; III)

MgO

1987

8 Л217. Электрические дипольные моменты состояний  $B^1\Sigma^+$  и  $X^1\Sigma^+$  молекулы MgO. Electric dipole moments of the MgO  $B^1\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states. Büsener H., Heinrich F., Hese A. «Chem. Phys.», 1987, 112, № 1, 139—146 (англ.)

Методами штарковской спектроскопии определены электрический дипольный момент состояния  $B^1\Sigma^+$ , ( $\mu = 5,94 \pm 0,24$  ед. Дебая) основного состояния  $X^1\Sigma^+$  ( $\mu = 6,2 \pm 0,6 D$ ) молекулы MgO. Большая величина дипольного момента для обоих состояний объясняет появление интенсивных линий Q-ветви в электрич. поле. Определено время жизни состояния  $B^1\Sigma^+$  ( $22,5 \pm 1,5$  нс), которое согласуется с результатами неэмпирич. расчетов.

М. А.

лл. 11.

ф. 1987, 18, № 8

MgO

1987

106: 146330m Electric dipole moments of the magnesium oxide  $B^1\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states. Buesener, H.; Heinrich, F.; Hese, A. (Inst. Strahlungs Kernphys., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1987, 112(1), 139-46 (Eng). The elec. dipole moment of the excited  $B^1\Sigma^+$  ( $v' = 0$ ) state of MgO produced in a gas-phase reaction of Mg( $^1S$ ) atoms and  $N_2O$  is measured using the technique of Stark quantum-beat spectroscopy. It is  $|\mu_{v'=0}| = 5.94(24)$  D. The lifetime of the excited  $B^1\Sigma^+$  ( $v' = 0$ ) state is  $\tau = 22.5(1.5)$  ns. Using laser excitation spectroscopy and by direct observation of the  $P(1)$  line splitting at high elec. field strengths in the  $B^1\Sigma^+$  (0,0) system the ground-state elec. dipole moment is  $|\mu_{v=0}| = 6.2(6)$  D. Furthermore an elec.-field-induced Q branch is obsd.

$X^1\Sigma^+$ ,  $B^1\Sigma^+$   
ground-state  
moment

C. A. 1987, 106, N18

1987

МГО

Добрееков В.В.,

Автореферат диссертации  
на соискание ученой степени  
К.Х.Н., Москва, 1987.

Э,

М.П.

Электронно-возбужденный состав

Определение радиационных  
времен жизни и молекуляр-  
ных постоянных Электрон  
но-возбужденный состав



Этими молекулами  $MgO$ ,  $CaO$ ,  $SiO$   
методом лазерной флуоресценции.

MgO

[OM. 27982]

1987

Pyykkö P., Diercksen  
G. H. F., et al.

neopen-  
pachem

Chem. Phys. Lett.,  
1987, 141, N 6, 535-39.

● (ca. NaF; III)

Окисел Mg

1987

Lamoureux R. H.,  
Hildenbrand D. L.,  
et al.

л. н., Кр,  
ΔfG, p.

J. Phys. Chem. Ref.  
Data 1987, 16 (3),

● 419-43.

(см. Окисел Be; III)

MgO

1988

3 Д60. Частоты вращательных переходов в молекулах, содержащих изотопы Mg / Багринцева Е. М. // Астрон. циркуляр.— 1988.— № 1527.— С. 11—12.— Рез. англ.

Приведены таблицы рассчитанных частот вращательных переходов молекул  $\text{MgO}$ ,  $\text{MgCl}_2$ ,  $\text{MgH}_2$ ,  $\text{MgS}$ ,  $\text{MgF}_2$ , содержащих  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{25}\text{Mg}$  и  $^{26}\text{Mg}$ .

М. П.

(44) ⊗

ср. 1989, № 3

МгО

(от. 29162)

1988

~~Акад. Капаров В.В.~~, Ветухин  
В.М. и др.

(До) Докл. АН СССР, 1988, 299,  
№3, 649-652.

MgO

1988

Olander D. R., Yagnik  
S. K. et al.

интенси́вное  
лазерное  
истощение

J. Appl. Phys. 1988,  
64(5), 2680-95.

●  
(сер.  $UO_2$ ; III)

MgO

1988

110: 84319m Spin-forbidden radiative decay involving quasi-degenerate states. Application to the  $B \ ^1\Sigma^+ \rightarrow a \ ^3\Pi$  transition in magnesium oxide. Yarkony, David R. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(12), 7324-44 (Eng). The spin-orbit induced interactions among the low-lying  $X$ ,  $B \ ^1\Sigma^+$ ,  $a \ ^3\Pi$ ,  $A \ ^1\Pi$ , and  $c \ ^3\Sigma^-$  states of MgO are studied with emphasis on the exptl. obsd.  $B \ ^1\Sigma^+ \rightarrow a \ ^3\Pi$  spin-forbidden dipole-allowed radiative transition. A dressed diabatic states approach is used in which the spin-orbit induced perturbation of the (zeroth order)  $a \ ^3\Pi_0+$  and  $a \ ^3\Pi_1$  fine structure states is partitioned into a contribution from the zeroth order  $X \ ^1\Sigma_0+^+$  and  $A \ ^1\Pi_1$  states and contributions from all other remaining states of  $^1\Sigma_0+^+$  and  $^1\Pi_1$  symmetry. This perturbation-partitioning approach extends a recently developed technique for detg. spin-orbit perturbed wave functions directly in the CSF basis based on first order perturbation theory of S. J. Havriliak and Y. (1985) to situations involving quasidegenerate electronic states. The wave functions in question are expanded in second order configuration state function spaces of between 60,000-100,000 terms. The parallel [ $\mu_1(B \ ^1\Sigma_0+^+, v = 0; a$

спин-орбит  
взаимодействие

С.А. 1989, 110, N10

$^3\Pi_{0+}$ ,  $\nu = n$ ) and perpendicular [ $\mu_{\perp}(B \ ^1\Sigma_{0+}, \nu = 0; a \ ^3\Pi_1, \nu = n)$ ] components of the spin-forbidden dipole-allowed transition moment for the  $B \ ^1\Sigma^+, \nu = 0 \rightarrow a \ ^3\Pi, \nu = n$  transition were obtained. It was found that  $\mu_{\perp}(B \ ^1\Sigma_{0+}, \nu = 0; a \ ^3\Pi_1, \nu = n)$  peaks at  $n = 1$  and that for  $0 \leq n \leq 3$   $\mu_{\perp}(B \ ^1\Sigma_{0+}, \nu = 0; a \ ^3\Pi_1, \nu = n) > \mu_{\parallel}(B \ ^1\Sigma_{0+}, \nu = 0; a \ ^3\Pi_{0+}, \nu = n)$ . The spin-orbit induced mixings of the zeroth order of  $X \ ^1\Sigma_{0+}$  and  $A \ ^1\Pi_1$  states with the  $a \ ^3\Pi_{0+}$  and  $a \ ^3\Pi_1$  states are responsible for the preponderance of the obsd.  $B \rightarrow a$  (0,0) and (0,1) transition moments.





MgO

1988

17 Б1024. Запрещенный по спину радиационный распад с участием квазивыврожденных состояний. Приложение к переходу  $B^1\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$  в MgO. Spin-forbidden radiative decay involving quasidegenerate states. Application to the  $B^1\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$  transition in MgO / Yarkony D. R. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 12.— С. 7324—7333.— Англ.

Рассчитаны  $\chi$ -ки спин-орбитального взаимодействия и запрещенного по спину перехода  $B^1\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$  для молекулы MgO. Применена пертурбац. техника разделения для построения адиабатич. состояний в рамках формализма с полным гамильтонианом Брейта—Паули. Невозмущенная задача сформулирована с нерелятивистскими волновыми ф-циями состояний  $X^1\Sigma^+$ ,  $A^1\Pi$ ,  $a^3\Pi$ ,  $c^3\Sigma^-$ . Для их представления использовано приближение конфигурац. взаимодействия с орбиталями, найденными методом МК ССП с усреднением по состояниям. В результате рассчитаны параллельная  $\mu_{\parallel}(B^1\Sigma_{0+}^+, v=0, a^3\Pi_{0+}, v=n)$  и перпендикулярная  $\mu_{\perp}(B^1\Sigma_{0+}^+, v=1, a^3\Pi_1, v=n)$  компоненты момента перехода для  $n=0-3$ . Отмечено согласие с известными эксперим. данными для  $n=0,1$ .

(М.П.)

X. 1989, N 17

А. В. Немухин

MgO

DM 32425

1989

1 4 B1018. Изучение  $a^3\Pi$  и  $X^1\Sigma^+$  состояний молекулы MgO: запрещенный по спину переход и нарушение приближения Борна—Опенгеймера. Study of the  $a^3\Pi$  and  $X^1\Sigma^+$  states of the MgO molecule: spin-forbidden transitions and breakdown of the Born-Oppenheimer approximation / Thümmel H., Klotz R., Peyerimhoff S. D. // Chem. Phys.— 1989.— 135, № 2.— С. 229—245.— Англ.

Рассчитана система колебат. уровней для состояний  $^3\Pi_{0+}$  и  $X^1\Sigma^+$  молекулы MgO с учетом спин-орбитального взаимодействия представленного одно- и двухэлектронными операторами Брейта—Паули. Отмечено сильное нарушение адиабатич. приближения за счет спин-орбитального взаимодействия, в частности сдвиг для почти вырожденных  $X^1\Sigma^+$  ( $v''=6$ ) и  $a^3\Pi$  ( $v'=3$ ) уровней составляет  $\sim 16 \text{ см}^{-1}$ . Получены интенсивности интеркомбинац. переходов  $a^3\Pi_{0+} \rightarrow X^1\Sigma^+$  с учетом состояний  $B^1\Sigma^+$ , 2,3  $^3\Pi$  и 1,2  $^3\Sigma^-$  в первом порядке теории возмущений. Исследовано также влияние спин-орбитального взаимодействия на интенсивности ИК-переходов и на дипольные моменты.

П. В. Ганелин

М.А.

X.1990, N4

MgO

DM 32425

1989

' 111: 183170h Study of the  $a^3\Pi$  and  $X^1\Sigma^+$  states of the magnesium oxide molecule: spin-forbidden transitions and breakdown of the Born-Oppenheimer approximation. Thuemmel, Helmar; Klotz, Rainer; Peyerimhoff, Sigrid D. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.), *Chem. Phys.*, 1989, 135(2), 229-45 (Eng). The perturbation of the  $a^3\Pi_0^+$  and  $X^1\Sigma^+$  vibrational levels in the MgO mol. due to spin-orbit interaction was investigated. The magnitude depends on the size of the energy difference between the unperturbed levels and on the spin-orbit matrix elements which are calcd. employing the Breit-Pauli 1- and 2-electron spin-orbit operator. The theor. procedure is given for the calcn. of spin-forbidden transitions in cases where the zero-order states involved cannot be treated within the Born-Oppenheimer approxn. The intensity distribution of the intercombination bands  $a^3\Pi_0^+ = X^1\Sigma^+$  was evaluated. The weak perturber states  $B^1\Sigma^+$ ,  $2,3^3\Pi$  and  $1,2^3\Sigma^-$  are explicitly considered in addn. to the interaction of a  $^2\Pi_0^+$  with the strong perturber state  $X^1\Sigma^+$ . The mechanisms are discussed in terms of intensity borrowing. The decrease/increase in intensity of the IR transitions  $a^3\Pi_0^+(v') \rightarrow a^3\Pi_0^+(v')$  and  $X^1\Sigma^+(v'') \rightarrow X^1\Sigma^+(v'')$ , due to spin-orbit interaction is discussed; the perturbed and unperturbed dipole moments,  $\mu(X^1\Sigma^+, v'')$  and  $\mu(a^3\Pi_0^+, v')$  are given.

$a^3\Pi - X^1\Sigma$ ,  
sp. mix.  
problem

C.A. 1989, 111, N20

MgO

От 31 790 1989

№ 17 Б1023. Электронная структура молекулы MgO в основном и возбужденных состояниях. The electronic structure of the MgO molecule in ground and excited states / Thümmel H., Klotz R., Peyerimhoff S. D. // Chem. Phys.— 1989.— 129, № 3.— С. 417—430.— Англ.

В базисе из 65 сгруппированных гауссовых орбиталей *s*-, *p*- и *d*-типа методами конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые синглетных и триплетных состояний молекулы MgO, коррелирующих с низшими 4-мя диссоциац. пределами  $Mg+O$ . Детально проанализированы соотношения вкладов разных электронных конфигураций и дана классификация состояний как валентных, ридберговых, ионных, диффузных и т. д. Рассчитаны кривые дипольных моментов и моментов электронных переходов в зависимости от межъядерного расстояния. Определены спектроскопич. постоянные для связанных состояний. А. В. Немухин

М.П.

Х. 1989, № 17

MgO

OM. 31790

1989

ab initio  
MgO

Электрон.  
структура

C.A. 1989, 110, N 20

110: 179709c The electronic structure of the magnesium oxide molecule in ground and excited states. Thuemmel, Helmar; Klotz, Rainer; Peyerimhoff, Sigrid D. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1989, 129(3), 417-30 (Eng). Potential curves for the ground and various excited states of the MgO mol. have been calcd. using the MR-CI method. The electronic structure of the states is analyzed in terms of their semi-diffuse, ionic, Rydberg, and valence character and the elec. dipole moments of the low-lying states are given. Special emphasis is placed upon the ionic-covalent interactions which give to numerous avoided crossings, primarily at large internuclear sepns. The character of the low-lying  $1\Sigma^+$  states which have distinct multiconfigurational nature is carefully investigated.

MgO от. 31790

1989

6 Д56. Электронное строение молекулы MgO в основном и возбужденных состояниях. The electronic structure of the MgO molecule in ground and excited states / Thümmel H., Klotz R., Peyerimhoff Sigrid D. // Chem. Phys.— 1989.— 129, № 3.— С. 417—430.— Англ.  
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в многоэкспоненц. базисе сгруппированных гауссовских ф-ций,

М.А.

ср. 1989, № 6

а также методом конфигурац. взаимодействия с исходной многодетерминантной ф-цией и учетом всех однократно- и двукратно возбужденных относительно этой ф-ции конфигураций рассчитаны потенц. кривые, дипольные моменты, частоты колебаний, вращательные постоянные и равновесные длины связей молекулы MgO в основном ( $^1\Sigma^+$ ) и ряде возбужденных ( $^1,^3\Sigma^+$ ,  $^1,^3\Sigma^-$ ,  $^1,^3\Pi$  и  $^1,^3\Delta$ ) состояний. Найдено, что исследованные состояния могут быть охарактеризованы как валентные полудиффузные, ридберговские или ионные. Подробно обсуждаются ионно-ковалентные взаимодействия, возникающие при достаточно больших межатомных расстояниях. Вычисленные значения частот колебаний и равновесных длин связей хорошо согласуются с экспериментальными. Библ. 20. В. А. Корсунов.

MgO

[Om. 35 414]

~ 1990?

U.N. Ip P.C.F., Cross K.F.,  
Field R.W., et al.,

Submitted to the Journal  
of Molecular Spectroscopy  
The  $B^1\Sigma^+ - a^3\Pi_1$  and  $D^1\Sigma - a^3\Pi_1$



Intercombination systems  
of the MgO molecule

MgO

1990

Peyerimhoff Sigrid D.

SASP'90 Symp. Atom. and  
Surface Phys., Obertraun,  
ver. n. March 18-24, 1990: Cont-  
rib. Innsbruck, 1990. c. 44.

(cer.  $\text{MgO}^{2+}$ ; III)

Mgo

(DM 34801)

1990

Singh M., Chaturvedi F.P.,

Department  
Konkan  
University,  
Rajawade  
Mumbai

Astrophys and Space  
Sci. 1990, 17, N2,

225-230 ●  
Vibrational Transition

MgO

1991

114: 256121s The  $d^3\Delta_1-a^3\Pi_1$  and  $d^3\Delta_2-A^1\Pi$  systems of the magnesium oxide molecule. Bourguignon, Bernard; Rostas, Joelle (Inst. Phys. Chim. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 146(2), 437-54 (Eng). The 0-0 band of the  $d^3\Delta-a^3\Pi$  transition of MgO lying at 372 nm was obsd. at high resol'n. by laser excitation spectroscopy. In addn., the 0-1, 1-2, and 2-3 bands of the  $^3\Delta_3-^3\Pi_2$  subband and the 0-0 and 1-1 bands of the intercombination system  $d^3\Delta_2-A^1\Pi$  were also recorded. The rotational anal. of the bands and the global fit of all the available data relevant to the D,  $d^{1,3}\Delta$  states permit full characterization of the  $d^3\Delta$  state and derivation of accurate vibration and rotational equil. consts. for the D,  $d^{1,3}\Delta$  states.

$d^3\Delta_1 - a^3\Pi$   
 $d^3\Delta_2 - A^1\Pi$

M.A.

c.A. 1991, 114, N 26

(OM. 35271 a")

1991

Algo

Livis S., Hedderich H.F.

et al.,

Chem.

Phys. Lett., 1991,

489 - 494

spec. pay - Chem. Phys. Lett.,  
1991, 176, N 5,  
M.A. —

MgO

1991

116: 28512f A MR-CI-PS and CAS-SCF study of the ground state magnesium oxide dissociation energy. Cuesta, I. Garcia; Sanchez de Meras, A.; Gil, I. Nebot (Dep. Quim. Fis., Univ. Valencia, Burjassot, Spain 46100). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 186(4-5), 386-92 (Eng). Ab initio calcns. at CASSCF and MRCI PS levels are used to det. the dissocn. energy for the  $X^1\Sigma^+$  state of MgO, which adiabatically dissoc. to the ground state  $^1S_g$  of magnesium and to the excited  $^1D_g$  state of oxygen, as well as other spectroscopic parameters. Emphasis is placed upon the problem of properly selecting an adequate active space in CASSCF calcns. and upon the improvements obtained in MRCI by selecting perturbatively the most important contributions to the total wavefunction and evaluating the remaining ones only by perturbational methods. Through a procedure based on stabilizing the computed dissocn. energy, values of 3.87 eV (MRCI PS) and 4.20 eV (CASSCF) are obtained. These values compare with the exptl. value of  $3.76 \pm 0.13$  eV.

Do, meep. para

C.A. 1992, 116, NY

MgO

1991

117: 138008z Experimental and theoretical investigation of chemical bonding: application to magnesium oxide. Foley, Jeffrey Arthur (Arizona State Univ., Tempe, AZ USA). 1991. 264 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA9134858. From *Diss. Abstr. Int. B* 1991, 52(6), 3129.

(хим. св-ва.  
ж-решим. и  
теор. иссл.)

С. А. 1992, 117, N 14

MgO

1991

9 Б1079. Исследование энергии диссоциации основного состояния MgO методами КВ НИК и ССП ПАП. A MRCI PS and CASSCF study of the ground state MgO dissociation energy / García Cuesta I., Sánchez de Merás A., Nebot Gil I. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 186, № 4—5.— С. 386—392.— Англ.

Методом ССП в полном активном пространстве (ССП ПАП) и методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям (КВ НИК) рассчитана энергия диссоциации основного электронного состояния молекулы MgO. Базис сгруппированных гауссовых ф-ций включал наборы  $(13s8p1d)/[6s4p1d]$  на Mg и  $(11s6p1d)/[5s3p1d]$  на O. Для расчетов методом конфигурац. взаимодействия использована вариационно-пертурбац. процедура CIPSI. Исследованы проблемы выбора активного пространства при расчетах методом ССП ПАП и пертурбац. отбора исходных конфигураций при расчетах методом КВ НИК. Методами ССП ПАП и КВ НИК получены оценки энергии диссоциации 4,20 и 3,87 эВ соотв., последняя из к-рых хорошо согласуется с эксперим. значениями  $3,76 \pm 0,13$  эВ.

М.А., Де

X.1992, № 9

А. А. Сафонов



MgO

P.C.F. Ip, K.J. Cross, R.W. Field, 1991  
J. Rostas, B. Bourguignon, J. McCombie

J. Mol. Spectrosc. 1991, 146 (2), 409

The  $B^1\Sigma - a^3\Pi$  and  $B^1\Delta - a^3\Pi$   
Intercombination Systems of MgO

$$T_e(a^3\Pi) = 2620.6 \text{ cm}^{-1}$$

OM 36762

MgO

Om. 36762

1991

114: 174204g The  $B^1\Sigma^+ - a^3\Pi_1$  and  $D^1\Delta - a^3\Pi_1$  intercombination systems of the magnesium oxide molecule. Ip, P. C. F.; Cross, K. J.; Field, R. W.; Rostas, J.; Bourguignon, B.; McCombie, J. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 146(2), 409-36 (Eng). The MgO  $B^1\Sigma^+ - a^3\Pi_1$  (0-0) and (0-1) and  $D^1\Delta - a^3\Pi_1$  (0-0) and (1-1) intercombination bands were obsd., rotationally analyzed, and reduced to mol. consts. by a nonstandard procedure which made extensive use of an elaborate but highly constrained effective Hamiltonian model. The MgO  $a^3\Pi$  state is important because it is low lying ( $T_e = 2620.6$  cm<sup>-1</sup>), it correlates to Mg(<sup>1</sup>S) + O(<sup>3</sup>P) ground state atoms (unlike the X<sup>1</sup> $\Sigma^+$  state), it is the lower state of the exceedingly complex near UV triplet-triplet bands, and many Mg + oxidant reactions significantly populate various  $\Omega$ , e/f components of the  $a^3\Pi$  state. The fit model, obsd. transitions, and computed eigenvalues and eigenvectors for MgO  $a^3\Pi$   $v = 0$  and 1 will aid the anal. of triplet-triplet bands and will be esp. valuable in providing transition frequencies and relative  $\Omega$ , e/f, and J-dependent rotational linesrength factors for population monitoring. The present results reaffirm the validity and utility of various semiempirical relationships between fine structure,  $\Lambda$ -doubling,

$B^1\Sigma^+ - a^3\Pi,$

$D^1\Delta - a^3\Pi,$

M.H.

C.A. 1991, 114, N 18

and  $\Omega$  perturbation parameters. Moreover, by showing that the  $\Lambda$ -doubling in the  $a^3\Pi$  state is dominated by interactions with the  $X^1\Sigma^+$  and  $b^3\Sigma^+$  states, an ab initio prediction of the location of the as yet unabsorbed  $b^3\Sigma^+$  state is confirmed. The  $B^1\Sigma^+ - a^3\Pi$  transition borrows its oscillator strength from the  $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  and  $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$  transitions. The pattern of  $a^3\Pi$ ,  $a^1\Pi$ , and  $X^1\Sigma^+$  vibrational levels is such that, for  $v \leq 4$ , the predominant perturber characters admixed into the  $a^3\Pi$ ,  $v_a$  level are  $v_x = v_e + 3$  and  $v_A = v_a$ . Interference effects between transition amplitudes borrowed from B-X and B-A transitions will cause intensity to be transferred from  $R_u(J)$  to  $P_u(J)$  or vice versa. These e-level interference effects will be strongly dependent on  $v_a$ ,  $v_e$ ,  $J$ , and  $\Omega$ .

Algo

[Am. 35560]

1991

$\tau$ , Naulin Ch., Costes M.,  
et al.,

(B  $2^+$ , d  $3A$ , Chem.  
d  $1A$ ) eocm. 1991,  
325 -

Phys. Lett.,  
178, N 2/3,

● 329.

(Cha et.)

Measurements of the radiative  
lifetimes of  $\text{MgO } (B^2^+,$   
 $d^3\Delta, D^1\Delta)$  states.

MgO

1992

(20) 51069. Химические сдвиги для энергий связи основных уровней оксидов щелочноземельных металлов. Chemical shifts of the core-level binding energies for the alkaline-earth oxides / Bagus Paul S., Pacchioni G., Sousa C., Minerva T., Parmigiani F. // Chem. Phys. Lett. — 1992. — 196, № 6. — С. 641—646. — Англ.

Для определения природы и тенденций хим. сдвигов энергий связи основных уровней металла проанализированы волновые ф-ции кластерных моделей оксидов щел.-зем. металлов MgO, CaO, SrO и BaO. Показано, что тенденция уменьшения хим. сдвигов для тяжелых атомов определяется компенсацией двух эффектов электростатич. природы для исходного состояния. Первый из них состоит в увеличении энергии связи дикатиона по сравнению с нейтр. атомом. Второй состоит в понижении энергии связи под влиянием маделунговского потенциала. Тенденция, суммирующая два указанных вклада, хорошо согласуется с эксперим. данными.

А. А. Сафонов

М.П.

2 (43)

X. 1993, № 20

MgO<sup>2-</sup>

1993

Boldyrev A. I.,  
Simons J.

u. n.

J. Chem. Phys. 1993. 98,  
N.B.C. 4745-4752,

● (C<sub>2</sub><sup>2-</sup>, III)

MgO

1993

/ 118: 261336c Reply to "Comment on 'A MR-CI-perturbative-selected and CAS-SCF study of the ground-state magnesium oxide dissociation energy'". Garcia Cucata, I.; Sanchez de Meras, A.; Nebot Gil, I. (Departamento de Quimica Fisica, Universidad de Valencia, Dr. Moliner, 50, Burjassot, Valencia, Spain 46100). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 205(4-5), 481-6 (Eng). A reply is made to the polemic of Charles W. Bauschlicher, Jr. and Harry Partridge (*ibid.* 1993, 205, 479) on the work of C., et al., (*ibid.* 1991, 186, 386). In the present work on the calcn. of the dissociation energy ( $D_0$ ) of MgO, the relations among the size of the active space in CAS-SCF wave functions, the calc'd.  $D_0$ , and the continuity of  $\partial E/\partial r$  were studied. Basis set influence was also considered. Finally, it was concluded that the dissociation energy of MgO referred to ground state atoms is  $2.32 \pm 0.1$  eV.

$(D_0 = 2.32 \pm 0.1$

eV)

C. A. 1993, 118, N 26



MgO

1993

Ф 9Д175. Расчет электронных уровней энергии и потенциальных кривых молекулы MgO методом  $X\alpha$  рассеянных волн. / He Wengjian, Shen Guofu, Huang Yingpeng, Wang Haipeng, Zhu Xiaoyi, Ling Yuanqi, Yang Baocheng, Pan Weizhou, Wang Xingheng, Guan Jianmin // Huadong shifan

daxue xuebao. Ziran kexue ban = J. East China Norm. Univ. Nat. Sci.. — 1993. — № 1. — С. 45—49. — Кит.; рез. англ.

В рамках неограниченного по спину метода  $X\alpha$  рассеянных волн исследовано электронное строение MgO. Приведены одноэлектронные уровни энергии и потенциальные кривые для основного и низколежащих возбужденных состояний в диапазоне длин связей 1,5—6 ат. ед. Рассчитаны также дипольные и квадрупольные моменты и ряд др. одноэлектронных свойств.

М. П.

Ф. 1993, № 9.

MgO

1995

119: 15482h Ab initio study of neutral and ionized microclusters of magnesia. Recio, J. M.; Pandey, Ravindra (Dep. Electr. Eng., Michigan Technol. Univ., Houghton, MI 49931 USA). *Phys. Rev. A* 1995, 47(3), 2075-82 (Eng). The equil. properties of small MgO clusters ( $MgO$ ,  $Mg_2O$ ,  $MgO_2$ , and  $Mg_2O_2$ ) are calcd. to obtain their dependence on computational constraints such as the basis set and level of computation. The results have led to the suggestion that the inclusion of the correlation correction at the second-order Moller-Plesset level is necessary for the atomization energy although the configuration parameters may be obtained at the Hartree-Fock level. Based on this suggestion, the calcd. properties of the neutral and single-ionized  $MgO$  monomer are in excellent agreement with the exptl. data and available values from very accurate calcs. For the triat. clusters,  $Mg_2O$  is found to be more stable than  $MgO_2$ , whose geometrical structure is detd. by the strong O-O interaction. The optimum configuration of  $Mg_2O_2$  is a slightly distorted square with a  $D_{2h}$  symmetry. Upon ionization, these clusters undergo structural modifications, but these effects are softer than in alkali halide clusters due to the delocalized character of the hole. The vaporization of a neutral oxygen atom provides the most favorable fragmentation channel for the neutral and single-ionized stoichiometric dimers.

анализирана,  
анализирана,  
ab initio  
параметри

⊗ (+3)

C.A. 1995, 119, N 2

$Mg_2O$ ,  $Mg_2O_2$ ,  $MgO_2$

MgO

1994

22 Б1062. Возбужденные состояния MgO. Исследование в рамках кластерной модели. Excited states of MgO: A cluster model study / Bagus P. S., Illas F., Sousa C. // J. Chem. Phys. .— 1994 .— 100, № 4 .— С. 2943—2946 .— Англ.

М.П.

X. 1994, № 22

MgO<sup>+</sup>

(M. 37758)

1994

121: 238747r A redetermination of the dissociation energy of MgO<sup>+</sup>. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Langhoff, Stephen R.; Partridge, Harry (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(3), 2644-5 (Eng). Because of discrepancies in literature values of dissociation energy of MgO<sup>+</sup>, the ground state of MgO<sup>+</sup> was studied by using a higher level of theoretical treatment. Two one-particle basis sets were used and the orbitals were optimized by the SCF approach. The electron correlation was incorporated by using the CCSD(T) and the modified coupled-pair functional (MCPF) approaches. Because of the sizeable core-valence effect, calculations were also carried out by the core polarization potential approach. The MgO<sup>+</sup> D<sub>0</sub> values computed using both the Mg<sup>+</sup>+O and Mg<sup>2+</sup>+O<sup>-</sup> limits are presented. The best estimate for D<sub>0</sub> value of MgO<sup>+</sup> is 2.32±0.06 eV, which is obtained by averaging these two limits. The present predicted D<sub>0</sub> value is in excellent agreement with authors' previous results as well as the photodissociation experiments of B. & Frasier, et al., (1989).

(D<sub>0</sub> = 2.32 ± 0.06 eV)

e. A. 1994, 121, N 20

NgD

PM. 37 773

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,  
Simons J.,

15<sup>+</sup>  
2,

2,

Женеруи;  
неорем.  
Васем

J. Phys. Chem., 1994,  
98, N 40, 9981-44

MgO

1994

121: 310689t Fourier transform infrared spectroscopy of the  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  system of MgO. Kagi, Eriko; Hirano, Tsuneco; Takano, Shuro; Kawaguchi, Kentarou (Dep. Chem., Univ. Otsuka, Tokyo, Japan 112). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 168(1), 109-25 (Eng). The gas-phase IR adsorption spectrum of the  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  system of MgO was obsd. in the 2700-5400  $\text{cm}^{-1}$  region with a high-resoln. Fourier transform IR spectrometer. The MgO mol. was produced in a reaction of Mg vapor with  $\text{N}_2\text{O}$ . The obsd. 501 spectral lines were assigned to five vibrational bands,  $\nu_A-\nu_x = 1-0, 2-0, 3-0, 2-1,$  and  $0-1$  of  $^{24}\text{MgO}$ . These lines were analyzed to det. the band origins, the rotational, centrifugal distortion, and  $\Lambda$ -type doubling const. in the  $A^1\Pi$  state. The term value  $T_c$  of the  $A^1\Pi$  state was derived to be  $3563.8377(74)\text{cm}^{-1}$ , with one std. deviation in parentheses. The rotational levels in the  $A^1\Pi$  state were found to be perturbed by those of the vibrational levels of the  $X^1\Sigma^+$  state through rotational- $\leftrightarrow$  electronic interaction, and the anal. of the perturbation was carried out to det. the interaction const. The spectra of the  $\nu_A-\nu_x = 1-0$  bands of the isotopic species,  $^{25}\text{MgO}$  and  $^{26}\text{MgO}$ , were also obsd. and analyzed.

( $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ )

C.A. 1994, 121, N 26

1994

MgO $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ Kagi E., Iizawa T., Takano S.,  
Kawaguchi K.,J. Mol. Spectrosc., 1994, 168, w1, 103-125.Fourier transform infrared system  
Spectroscopy of the  $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$  system  
of MgO.2700-5400 Å  
4 type spectra.  
Метод быстрого  
Фурье преобразования  
спектра системы

$$T_e = 3563.8377(74), \quad B_e = 0.5054366(32), \quad X_e = 0.0046590(30)$$

$$Y_e \cdot 10^5 = 1.530(69), \quad D_e \cdot 10^6 = 1.1709(12), \quad \beta_e \cdot 10^9 = 4.42(42)$$

$$\omega_e = 669.3929(49), \quad \omega_e X_e = 3.9293(26), \quad \omega_e Y_e = 0.01372(41)$$

$$r_e = 1.864325(59).$$

Кегашио Муртц Р., Рихтер С., Пфелзер С., Томмел Н.,  
Узбан В. (Mol. Phys. (Внеран)) метод быстрого  
Фурье преобразования спектра системы  
и фотокимический (0-2) переход  $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$  и (0,1) переход  
 $A^3\Pi_{0,1} - X^1\Sigma^+$  системы М.О. этого газа методом быстрого

MgO<sup>d+</sup>

1994.

Kolbieszewski Marcin;  
Wright, James 'S.',

no minus.  
Krusal, D O

Chem. Phys. Lett., 1994,  
218 (4), 338-42.

(all. MgN<sup>●d+</sup>; III)



MgO

DM 37600

1994

10 Б1190. Фарадеевская спектроскопия лазерного магнитного резонанса полос  $(0-2)A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  и  $(0-1)a^3\Pi_{0,1}-X^1\Sigma^+$  MgO. Faraday LMR spectroscopy of the MgO  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$   $(0-2)$  and  $a^3\Pi_{0,1}-X^1\Sigma^+$   $(0-1)$  bands /Murtz P., Richter S., Pfelzer C., Thummel H., Urban W. //Mol. Phys. —1994 .—82 ,№ 5 .—С. 989—1007 .—Англ.

Методом лазерного магнитного резонанса исследованы полосы переходов между сильно взаимодействующими основным и низколежащими электронными состояниями  $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$  и  $A^1\Pi$  молекулы  $^{24}\text{Mg}^{16}\text{O}$ . Приведено положение и отнесение наблюдаемых зеемановских резонансов в полосах  $0-2$  перехода  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  и  $0-1$  перехода  $a^3\Pi_{0,1}-X^1\Sigma^+$ ; рассчитанных с учетом возмущений значения эффективных молекулярных постоянных для уровней  $v=0, 1, 2$  состояния  $X^1\Sigma^+$  и уровней  $v=0$  состояний  $a^3\Pi$  и  $A^1\Pi$ ; параметров входящих в матричные элементы эффективного вращат. гамильтониана, учитывающего взаимные возмущения указанных электронно-колебат. уровней.

Р. М. Ковба

М. П.

X. 1995, N 10

MgO<sup>+</sup>

1995

18 Б146. Неэмпирическое исследование гипермагниевых катионов  $Mg_2O^+$  и  $Mg_3O^+$ . Ab initio study of the hypermagnesium  $Mg_2O^+$  and  $Mg_3O^+$  cations / Boldyrev Alexander I., Simons Jack, Schleyer Paul von R. // Chem. Phys. Lett. — 1995 — 233, № 3 — С. 266—272 — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах до  $6=311+ГФ(3df)$  с учетом электронной корреляции по различным схемам и методом функционала плотности рассчитаны равновесная геометрия и колебательные частоты  $MgO^+$  (I),  $Mg_2O^+$  (II) и  $Mg_3O^+$  (III). Показано, что II является линейной, а плоские Т- и Y-образные формы менее выгодны и практически вырождены. Энергии диссоциации I—III с отщеплением  $Mg^+$  найдены равными соотв. 52,2; 93,4 и 46,8 ккал/моль (с отщеплением Mg). Полученные результаты согласуются с данными времяпролетной масс-спектропии. Н. Л.

М.А.

④



$Mg_2O^+$ ,  $Mg_3O^+$

X. 1995, N 18

MgO<sup>+</sup>

1995

122: 199697y Ab initio study of the hypermagnesium Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup> and Mg<sub>3</sub>O<sup>+</sup> cations. Boldyrev, Alexander I.; Simons, Jack; Schleyer, P.von R. (Chemistry Department, The University of Utah,

Salt Lake City, UT 84112 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 233(3), 266-72 (Eng). The geometries and vibrational frequencies of MgO<sup>+</sup>, Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, and Mg<sub>3</sub>O<sup>+</sup> were calcd. using high level ab initio and d. functional theories. Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup> (D-h, <sup>2</sup>Σ<sup>+</sup><sub>g</sub>) is linear while the planar T-shaped (C<sub>2v</sub>, <sup>2</sup>B<sub>2</sub>) and Y-shaped (C<sub>2v</sub>, <sup>2</sup>A<sub>1</sub>) Mg<sub>3</sub>O<sup>+</sup> structures are essentially degenerate. MgO<sup>+</sup>, Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup> and Mg<sub>3</sub>O<sup>+</sup> have dissocn. energies of: MgO<sup>+</sup>, 52.2 kcal/mol (into O+Mg<sup>+</sup>); Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, 93.4 kcal/mol (MgO+Mg<sup>+</sup>); and Mg<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, 46.8 kcal/mol (Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup>+Mg). Our results agree well with the relative intensities of these cations in the time-of-flight mass spectra reported in a recent exptl. study.

Ze, We, Do,  
ab initio  
param

(H)

(H)



Mg<sub>2</sub>O<sup>+</sup>, Mg<sub>3</sub>O<sup>+</sup>

C.A. 1995, 122, N 16

Algo

124

of 38150

1995

124: 40270y New bands of the MgO  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  and  $a^3\Pi_{0,1}-X^1\Sigma^+$  systems by Faraday laser magnetic resonance spectroscopy. Muertz, P.; Thuemmel, H.; Pflzer, C.; Urban, W. (Inst. Angewandte Physik, Univ. Bonn, Germany). *Mol. Phys.* 1995, 86(3), 513-34 (Eng). Extended measurements are reported for rovibronic transitions between the strongly mixed low-lying  $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$  and  $A^1\Pi$  electronic states of the MgO mol. in the 1640-3510  $\text{cm}^{-1}$  region. The measurements were made with the Faraday laser magnetic resonance (LMR) technique utilizing a CO laser and a CO overtone laser. The new obsd. lines include the  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  (0-0, 0-1, 1-1, 1-2, 1-3, 2-2, 2-4, 3-3) bands as well as the much weaker  $a^3\Pi_{0,1}-X^1\Sigma^+$  (0-0, 1-0) intercombination bands. The present highly precise LMR data provide a basis for performing an extensive deperturbation anal. including the spin-orbit, orbit-rotation and Zeeman interactions between the rovibronic levels of the  $X^1\Sigma^+$ ,  $a^3\Pi$  and  $A^1\Pi$  states. Thereby the present data are combined with reliable earlier exptl. results, in particular for the transitions involving higher lying vibronic states, in order to obtain the effective deperturbed mol. consts. and perturbation parameters for the three lowest lying electronic states of MgO to as high an accuracy as possible. The abs. std. deviation of the LMR data is  $6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  (18 MHz), which is in accord with the accuracy of our measurements. The set of deperturbed mol. parameters reproduces all measured lines with an overall std. deviation of 0.87 relative to the exptl. uncertainties. For perturbations such as spin-orbit interaction there is good agreement with the predictions of large scale ab initio calcs.

( $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ ,  
 $a^3\Pi_{0,1}-X^1\Sigma^+$ )  
 u.n.

C.A. 1996,  
 124, NY

Algo -

(DM. 38 934)

1997

Butser B.L., et al.,

Chem. Phys. Lett.,  
1997, 276, 13-19



neop.  
racem



$$n = 1-6$$

1997

126: 243055w Ab initio calculations on  $(MgO)_n$ ,  $(CaO)_n$ , and  $(NaCl)_n$  clusters ( $n = 1-6$ ). Malliavin, M.-J.; Coudray, C. (CEA-DAM, Centre Etudes Bruyeres Chatel, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(6), 2323-2330 (Eng), American Institute of Physics. We report preliminary results of ab initio calcns. on  $(NaCl)_n$ ,  $(MgO)_n$ , and  $(CaO)_n$  clusters for  $n = 1-6$ . We det. the isomers and the structure of various neutral clusters. Their relative stabilities are studied by analyzing their binding energies and their dissocn. energies. As a particular behavior of  $(MgO)_n$  is obsd. for  $n = 3$  and  $n = 6$ , the bondings of  $(MgO)_3$ ,  $(CaO)_3$ , and  $(NaCl)_3$  are studied.

ab initio  
расчет

структур

и  
стабильн.

C. A. 1997, 126, N 18



MgD

(Dm. 39596)

1998

Dingfeng Chen et al.,

As Internat. J. Mass Spectro-  
metry 1998, 181, 181-199

NgO

[Um. 39244]

1998

Masanori Matsui,

J. Chem. Phys., 1998, 108,  
N 8, 3304-3305

Breathing ● shell model  
in molecular dynamics simu-



lation: Application to Ngband  
Cad.

1998

MgO

128: 186766u X-ray and electron diffraction study of MgO. Tsirelson, V. G.; Avilov, A. S.; Abramov, Yu. A.; Belokoneva, E. L.; Kitaneh, C. R.; Feil, D. (Mendeleev University of Chemical Technology, Moscow, Russia 125047). *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci.* 1998, B54(1), 8-17 (Eng), Munksgaard International Publishers Ltd.. Precise x-ray and high-energy transmission electron diffraction methods were used for the study of electron d. and electrostatic potential in MgO crystals. The structure amplitudes were detd. and their accuracy estd. using ab initio Hartree-Fock structure amplitudes as criteria. The electrostatic potential distributions, reconstructed using Fourier series from both x-ray and electron diffraction data, are in satisfactory mutual agreement and are similar to the theory. They, however, suffer from restricted exptl. resolu. and, therefore, the reconstruction of the electrostatic potential via an anal. structural model is preferable. The K model of electron d. was adjusted to x-ray exptl. structure amplitudes and those calcd. by the Hartree-Fock method. The electrostatic potential, deformation electron d. and the Laplacian of the electron d. were calcd. with this model. The crit. points in both exptl. and theor. model electron densities were found and compared with those for procystals from spherical atoms and ions. A disagreement concerning the type of crit. point at (1/4, 1/4, 0) in the area of low, near-uniform electron d. is obsd. Topol. anal. of the electron d. in crystals can be related with a close-packing concept.

Закрпнок.  
гусфпп.

C.A. 1998,  
128, N15

F: (MgO)<sub>n</sub>Mg<sup>2+</sup>

P: 3

130:301922 Structures and stabilities of doubly charged (MgO)<sub>n</sub>Mg<sup>2+</sup> (n=1-2) cluster ions.

Aquado, Andres; Lopez-Gejo, Francisco; Lopez, Jose M. (Facultad de Ciencias, Departamento de Fisica Teorica, Universidad de Valladolid, Valladolid 47011, Spain). J. Chem. Phys., 110(10), 4788-4796 (English) 1999  
Ab initio perturbed ion plus polarization calcns. are reported for doubly charged nonstoichiometric (MgO)<sub>n</sub>Mg<sup>2+</sup> (n=1-29) cluster ions. We consider a large no. of isomers with full relaxations of the geometries, add the correlation correction to the Hartree-Fock energies for all clust sizes. The

1999

polarization contribution is included at a semiempirical level also for all cluster sizes. Comparison is made with theor. results for neutral  $(\text{MgO})_n$  clusters and singly charged alkali-halide cluster ions. O method is also compared to phenomenol. pair potential models in order to assess their reliability for calcns. on small ionic systems. The large coordination- dependent polarizabilities of oxide anions favor the formati surface sites, and thus bulk-like structures begin to dominate only after  $n=24$ . The relative stabilities of the cluster ions against evapn. of an mol. show variations that are in excellent agreement with the exptl. abund spectra.

---

1999

F: MgO

P: 3

132:227648          Electronic structure of the alkali  
earth metals and their oxides, Sashin, V. A.; Ford,  
M. J.; Bolorizadeh, M. A.; Kheifets, A. S.

                    Physics Dept., Flinders University of South  
Australia            SA 5001, Australia          Proc. - Aust.

Conf. Nucl. Tech. Anal., 11th, 47-50 (English) 1999

The electronic structure of Be, Mg, Ca and their  
oxides was measured using electron momentum spectroscopy.  
Ab initio calcns. in the linear muffin-t orbital  
approxn. of the same compds. were also made.

C.A. 2000, 132

1999

F: MgO

P: 3

131:302407      Relative stabilities of CaO and MgO.

Xu, Xiaoping;      Schlesinger, Mark E.

Department of Metallurgical Engineering,

University of Missouri-Rolla Rolla, MO 65409-0340,

USA High Temp. Mater. Sci., Volume Date 1997,

38(2/3), 65-70 (English) 1999      Recent

investigations have suggested that the long-held  
belief that Ca oxide has a more neg. Gibbs energy  
of formation than Mg oxide at lower temps. is

inaccurate. If these claims are valid, elemental Mg should be effective reducing agent for CaO. To test this hypothesis, mixts. of elemental Mg and CaO and of elemental Ca and MgO were sealed under vacuum in molybdenum crucibles and equilibrated at 1398-1473 K for extended periods of time. Although anal. results suggest that true equil. was not established in these expts., the data do suggest that the needed correcti of the "traditional" thermodyn. data for CaO and MgO is not as great as claimed.

---

F: (MgO)<sub>n</sub>

P: 3

133:286783 Structures and Stabilities of CaO and MgO  
Clusters and Cluster Ions: An Alternative Interpretation  
of the Experimental Mass Spectra.

Aguado, Andres;  
Lopez, Jose M. Departamento de Fisica Teorica,  
Universidad de Valladolid Valladolid 47011, Spain

J. Phys. Chem. B, 104(35), 8398-8405 (English)

2000 The structures and relative stabilities of  
doubly charged nonstoichiometric (CaO)<sub>n</sub>Ca<sup>2+</sup> (n = 1-29)  
cluster ions and of neutral stoichiometric (MgO)<sub>n</sub> and  
(CaO)<sub>n</sub> (n = 3, 6, 9, 12, 15, 18) clusters are studied  
through ab initio perturbed ion plus polarization  
calcs. The large coordination-dependent  
polarizabilities of oxide anions favor the formation of

---

2000



surface sites, making the crit. cluster size where anions with bulk coordination first appear larger than that found in the related case of alkali metal halides. Thus, we show that there are substantial structural differences between alkali metal halide and alk. earth oxide cluster ions, contrary to what is suggested by the similarities in the exptl. mass spectra. An alternative interpretation of the magic nos. for the case of oxides is proposed, which involves an explicit consideration of isomer structures different from the ground states. A comparison with the previously studied  $(\text{MgO})_n\text{Mg}^{2+}$  cluster ions shows that the emergence of bulklike structural properties with size is slower for calcium oxide. Nevertheless, the structures of the doubly charged clusters are rather similar for the two materials. By contrast, the study of the neutrals reveals interesting structural differences between  $\text{MgO}$  and  $\text{CaO}$ , similar to those found in the case of alkali metal halides.

F: MgO

P: 3

133:49167 An accurate determination of the ionization energy of the MgO molecule. Bellert,

D.; Burns, K. L.; Wampler, R.; Breckenridge, W. H.

Department of Chemistry, University of Utah

Salt Lake City, UT 84112-0850, USA Chem. Phys.

Lett., 322(1,2), 41-44 (English) 2000

The ionization energy of the MgO(X 1.SIGMA+, v=0, J=0) mol., to form the MgO+(X 2.PI.3/2, v=0, J=3/2) ion, has been detd. by two-color photoionization threshold measurements to be 8.0067.+-.

.0.0009 eV. This value is consistent with, but much more accurate than, earlier exptl. and ab initio ests. of 7.9.+-.0.1 eV and 8.09 eV, resp.

~~ionization energy magnesium oxide mol.~~

em. 40220

2000

C.A. 2000

F: MgO

P: 3

133:49167

An accurate determination of the ionization energy of the MgO molecule.

Bellert, D.; Burns, K. L.; Wampler, R.;

Breckenridge, W. H. Department of Chemistry,  
University of Utah Salt Lake City, UT 84112-0850,  
USA Chem. Phys. Lett., 322(1,2), 41-44 (English)  
2000 The ionization energy of the MgO(X 1.SIGMA+, v=0,  
J=0) mol., to form the MgO+(X 2.PI.3/2, v=0, J=3/2) ion,  
has been detd. by two-color photoioniza threshold  
measurements to be 8.0067.+-.0.0009 eV. This value is  
consiste with, but much more accurate than, earlier  
exptl. and ab initio ests. of .0.1 eV and 8.09 eV, resp.

2000

C.A. 2000, 133

2000

**F: MgO**

**P: 3**

134:317920 **Laser spectroscopy of magnesium oxide in magnesium metal combustion.** Dreyer, Christopher B.; Daily, John W.; Abbud-Madrid, Angel; Branch, Melvyn C. Center for Combustion and Environmental Research, Department of Mechanical Engineering, University of Colorado at Boulder, Boulder, CO, USA. Trends Opt. Photonics (2000), 36(Laser Applications to Chemical and Environmental Analysis), 114-116. in English.

Magnesium oxide (MgO), produced by metal combustion in acetylene-air flame, was studied by laser-induced fluorescence spectroscopy. Laser induced excitation of the  $B1\Sigma^+-A1\Pi$  transition of MgO was followed by fluorescence detection of the  $B1\Sigma^+-X1\Sigma^+$  transition revealing a dense and complex structure with many active states. The most dominant feature of the spectrum was the (0,0) band-head at 606 nm. The R, P, and Q branches trailed to the blue, overlapping with (1,1) transitions at 601 nm and the (2,2) band at 594 nm. The  $\Delta v=-1$  vibrational bands, (0,1), (1,2), and (2,3) were also present due to the high temp. in the flame.

MgO

[ 08.40269 ]

2000

133: 22678u Dissociation energies of astrophysically important MgO, SO, SiN and TiO from spectroscopic data. Reddy, R. R.; Ahammed, Y. N.; Gopal, K. R.; Azeem, P. A.; Rao, T. V. R. (Department of Physics, Sri Krishnadevaraya University, Anantapur, India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 2000, 66(5), 501-508 (Eng), Elsevier Science Ltd. The potential energy curves for the electronic ground states of astrophys. important MgO, SO, SiN and TiO mols. are constructed by the RKR method. The dissocn. energies are detd. by curve-fitting techniques using the 5 parameters Hulburt-Hirschfelder function. The estd. dissocn. energies are  $3.674 \pm 0.075$ ,  $5.321 \pm 0.113$ ,  $4.492 \pm 0.103$  and  $6.94 \pm 0.16$  eV and MgO, SO, SiN and TiO, resp. The estd.  $D_0$  values are in reasonably good agreement with literature values.

(No)

meepem  
pacrem

(73)  
A

C.A. 2000, 133, N2

om. 40269

2000

F: MgO  
P: 3

133:22678          Dissociation energies of astrophysically important MgO, SO, SiN and TiO from spectroscopic data.

Reddy, R. R.; Ahammed, Y. N.; Gopal, K. R.;  
Azeem, P. A.; Rao, T. V. R.      Department of Physics, Sri  
Krishnadevaraya University      Anantapur, India      J.

Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 66(5), 501-508  
(English) 2000

C.A. 2000

~~\_\_\_\_\_~~ The potential energy curves for the electronic ground states of astrophys. important MgO, SO, SiN and TiO mols. are constructed by the RKR method. The dissocn. energies are detd. by curve-fitting techniques using the 5 parameters Hulburt-Hirschfelder function. The estd. dissocn. energies are 3.674  $\pm$  0.075, 5.321  $\pm$  0.113, 4.492  $\pm$  0.103 and 6.94  $\pm$  0.16 eV and MgO, SO, SiN and TiO, resp. The estd. D0 values are in reasonably good agreement with literature values.

~~\_\_\_\_\_ astrophys. important mol. dissocn. energy~~



F: MgO

P: 3

2000

133:22678          Dissociation energies of astrophysically important MgO, SO, SiN TiO from spectroscopic data.

Reddy, R. R.; Ahammed, Y. N.; Gopal, K. R.; P. A.; Rao, T. V. R.          Department of Physics, Sri Krishnadevaraya Universit          Anantapur, India

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 66(5), 501-508 (English) 2000          The potential energy curves for the electronic ground states of astrophy important MgO, SO, SiN and TiO mols. are constructed by the RKR method. dissocn. energies are detd. by curve-fitting techniques using the 5 param Hulburt-Hirschfelder function. The estd. dissocn. energies are 3.674  $\pm$  0.075, 5.321  $\pm$  0.113, 4.492  $\pm$  0.103 and 6.94  $\pm$  0.16 eV and MgO, and TiO, resp. The estd. D0 values are in reasonably good agreement with literature values.

C.A. 2000, 133

F: MgO

P: 1

133:340497

The valence band structures of BeO, MgO, and CaO.

Sashin, Vladimir A.; Dorsett, Helen E.; Bolorizadeh, Mohammad A.; Ford, Michael J. School of Chemistry, Physics and Earth Science, Flinders University of South Australia Adelaide, SA 5001, Australia

J. Chem. Phys., 113(18), 8175-8182

(English) 2000 We have performed direct

measurements of the valence band structures of the light alk. earth oxides BeO, MgO, and CaO using electron momentum spectroscopy (EMS). From these measurements,

2000

+



3<sup>g</sup> Kapitovala

we have detd. the band dispersions, valence bandwidths, and O(2s)-O(2p) intervalence bandgaps at the .GAMMA. point. For comparison we have also performed Hartree-Fock (HF) and d.-functional (DFT) calcns. in the LCAO (LCAO) approxn. Intervalence bandgaps compare reasonably well with the DFT calcns. and previous exptl. and theor. studies. Our measured bandwidths, however, are significantly smaller. In particular, we find that contrary to conventional wisdom, the local d. approxn. of DFT overestimates the valence bandwidths of these ionic solids.

---



MgO -

[Om. 40842]

2007


Charles W. Bauschlicher  
Jr., Harry Partridge

помощь.  
чекмп

и.п.  
оракон  
г-к.

Chem. Phys. Lett., 2001,

342, 441-446.

On interpreting  the photoelect

von Spectra 40 MgD.



MgO

2001

135:202233v Laser-induced fluorescence excitation spectroscopy of the magnesium oxide  $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$  system. Dreyer, Christopher B.; Daily, John W.; Abbud-Madrid, Angel; Branch, Melvyn C. (Department of Mechanical Engineering, University of Colorado at Boulder, Boulder, CO 80309 USA). *Appl. Opt.* 2001, 40(15), 2561-2570 (Eng), Optical Society of America. Excitation scans of the MgO  $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$  transition were made in a seeded acetylene-air flame. The combustion of magnesium in oxygen and carbon dioxide is well known and is of significant interest for fire safety, solid propellant applications, and recently for use as an in situ resource propellant for planetary exploration of Mars. This spectroscopic study expands the available data on this electronic transition, particularly data at high rotational states that are lacking in the literature. Rotational parameters of the  $v = 0, 1,$  and  $2$  states of  $B^1\Sigma^+$  are derived.

( $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$ )  
Laser-induced  
fluorescence

C.A. 2001, 135, 19

F: MgO

P: 3

134:345800 **Molecular properties of computationally difficult diatomic systems: O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub><sup>-</sup>, Cl<sub>2</sub><sup>-</sup>, SiF, SiCl, ClO and MgO.** Janoschek, Rudolf; Kalcher, Josef. Institut für Chemie, Theoretische Chemie, Karl-Franzens-Universität Graz, Graz, Austria. Z. Phys. Chem. (München, Ger.) (2001), 215(2), 197-206. in English.

For seven difficult diat. mols., O<sub>2</sub>, F<sub>2</sub><sup>-</sup>, Cl<sub>2</sub><sup>-</sup>, SiF, SiCl, ClO and MgO, spectroscopic consts.,  $R_e$ ,  $B_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e X_e$ , and  $D_0$ , have been calcd. by two computational methods, MR-ACPF and CCSD(T). The sequence of aug-cc-pVnZ+ basis sets has been used, and for O<sub>2</sub>, subsequent extrapolation of the total energies has been performed. In particular, new bond lengths for F<sub>2</sub><sup>-</sup> and Cl<sub>2</sub><sup>-</sup> are presented, and the established exptl. dissocn. energies for SiF and SiCl are cor. The dissocn. energy of the O<sub>2</sub> mol. has been calcd. by different methods, overcoming the deficiencies of the aug-cc-pVnZ basis sets, at an accuracy of at least 0.3 kcal mol<sup>-1</sup>.

---

2001

MgO, MgO<sup>-</sup> (X<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>)

(QM 40881)

2001

Ar, Yeou A<sup>3</sup>Π, A<sup>1</sup>Π,  
B<sup>3</sup>Σ<sup>+</sup>, B<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>

докум.  
на предмет  
фотогр. спекр

135: 144116w **Vibrationally Resolved Photoelectron Spectroscopy of MgO<sup>-</sup> and ZnO<sup>-</sup> and the Low-Lying Electronic States of MgO, MgO<sup>-</sup>, and ZnO.** Kim, Jeong Hyun; Li, Xi; Wang, Lai-Sheng; de Clercq, Helen L.; Fancher, Charles A.; Thomas, Owen C.; Bowen, Kit H. (Department of Physics, Washington State University, Richland, WA 99352 USA). *J. Phys. Chem. A* 2001, 105(23), 5709-5718 (Eng), American Chemical Society. Vibrationally resolved photoelectron spectra of MgO<sup>-</sup> and ZnO<sup>-</sup> were recorded at several photon energies under varied exptl. conditions. Peaks in these highly structured spectra were assigned to photodetachment transitions from the MgO<sup>-</sup> and ZnO<sup>-</sup> ground state (X<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>) to vibrational progressions in the ground and several low lying neutral excited states. In addn., a high-temp. MgO<sup>-</sup> spectrum shows spectral features due to photodetachment from an excited electronic state of the MgO<sup>-</sup> anion, which was assigned to an A<sup>2</sup>Π anionic state. From the MgO<sup>-</sup> spectra, the electron affinity of the MgO ground state

Δ (A)



ZnO, ZnO<sup>-</sup> (X<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>)

C. A. 2001, 135, N10

↓ a<sup>3</sup>Π, A<sup>1</sup>Π, X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> (Te)



( $X^1\Sigma^+$ ) is 1.630 (0.025) eV. Four electronic excited states of MgO,  $a^3\Pi$ ,  $A^1\Pi$ ,  $b^3\Sigma^+$ , and  $B^1\Sigma^+$ , lie 2510, 3390, 8390, and 20,000  $\text{cm}^{-1}$  above the  $X^1\Sigma^+$  neutral ground state, resp. The excited  $\text{MgO}^-$   $A^2\Pi$  anion state was found to lie 4791  $\text{cm}^{-1}$  above the  $\text{MgO}^-$   $X^2\Sigma^+$  anion ground state. The photoelectron spectra of  $\text{ZnO}^-$ , presented here at higher photon energies, extend a previous photoelectron study by Fancher et al. to the 1st 2 excited neutral states,  $a^3\Pi$  and  $A^1\Pi$ , which lie 2460 and 4960  $\text{cm}^{-1}$  above the  $X^1\Sigma^+$  ground state, resp. From Franck-Condon analyses of the well-resolved vibrational progressions for each electronic transition, equil. internuclear distances and fundamental vibrational frequencies of the MgO and ZnO neutral electronic states were detd. also, because the sources employed produced vibrationally hot anions, the bond length and vibrational frequencies of both the  $\text{MgO}^-$  ground and excited states were found from the vibrational hot band transitions.



ligO

$\text{a}^3\Pi_2$

Франц. и

Колб. Подьяковы

(om. 41949)

2003

D. Beller, K. L. Burns,  
Nguyen-Thi Van-Danh, Y. Wang,  
W. H. Breckenridge,  
Chem. Phys. Letters, 2003,  
381, 381-384.

A new source for vibrationally excited  
and rotationally cold  $\bullet$  metal-oxide  
molecules: spectroscopic characteri-

ization of the low-lying  
a  $^3\Pi_2$  metastable excited  
state of the  $\text{H}_2\text{O}$  molecule.

MgO

U.S. Dept.  
of Energy

Contract No.

DE-AC02-80OR21400

39 000 cm<sup>-1</sup>

F<sup>2</sup>Π ← X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>  
U.S. Dept. of Energy

F<sup>2</sup>Π

Am. 41920

2003

D. Bellert, K. L. Burns, N. T. Van Dant

J. Wang, W. M. Breckenridge

Chem. Phys. Letters 2003,  
381, 725-728.

Spectroscopic characterization  
of the F<sup>2</sup>Π<sub>1/2</sub> "Rydberg" state  
of the ● MgO molecule.