C_3 C_3^+ C_3^-

Cs | Bobrovnikoff W.T. | 1931

Astrophys. J. 73, 61

Полоса 4050 Å.

Сдвиг к новой серии CN.

необоснованное

MZU.

С3 | 0 | G. Herzberg 1942

Чозен | Rev. Mod. Phys. 14, 195

Колеб. структура полос привело Герцберга к выводу о том, что полоса чозен соответ. перпендикулярной полосе линейной молекулы для симметричного волчка XH_2, где ● X конц. вер. C, O, N.

МГУ | Наиболее подходящая CH_2, б.к.

она по расчетам имеет экранированный прицел в области 4000-4500Å. Однако окончательного заключения о природе полосы 4050 Гернбер не сделал.

6₃ G. Herzberg 1942

Astrophys. J., 96, 314

Наблюдались полосы CO₂
в синем разряде.
Удалось полос CO₂ - CH_4 - рамана
Предполагается разряд в смеси
гелия. Кислые продукты
- CH_4, H_2O и H_2. Использовались

первые молекулы радикала. В результате впервые в лаборат. условиях была получена полная copy того ранее наблюдавшегося только в спектрах звезд и комет (Swings, McKellar 1953г.).

С3 | Swings P | 1942

ч050

Astrophys J., 95, 270

Рассмотрение возможного ионизирующего поля ч050 (NH+, CH2, NH2+). Вывод о бл. гр. с точки зрения апроксимации больше водородных CH2.

м23

C_3 Swings P. [1942

Rev. Mod. Phys., 14, 190-4.

Molecular bands in cometary spectra. Identifications.

C3

Swings P. 1943

Monthly Notices Roy. Astron. Soc., 103, 86-111.

Reports on the progress of astronomic cometary spectra.

С3 R. Herman 1946

Compt. rend. 223, 281

Разработан интенсивный метод возбуждения полос ЧОТО. Использованы ультразвуковые колебания в атмосфере Hg, разбавленной ксеноном (давл. 3 атм). Наряду с полосами наблюдаются полосы ЧОТО

Идентифицированы и расшифрованы

Иначе не было выделано.

C3 McKellar A., 1948

Astrophys. J., 108, 453

Полосы 4050Å в спектре звезд Нимма

Cz | A. Monfils, B. Rosen 1949

Nature 164, 713

Изучение возбуждения плазмы 4050
в плазме назад из границы
в атмосфере не разбавленного
водородом или парами органиче-
ских соединений. (меди, ртути, кислорода)
Авторам удалось на
МВУ. примененном приборе с

диаметром 1,6 м/мин в обл. чало-х получив пашу с пандом в обл. 4049 Å. Заменив водород на дейтерий, они не обнаружили изотоп. смещения, что вызвало сомнение в правильности идентификации гриздиан пашы чозон°.

G3 Jose P. D., Swings P. 1950

Astrophys. J., 111, 41

Полосы Юзов в спектре кометы.

C_3 Douglas A. E. 1951

Astrophys. J., 114, 466

Спектр C_3 полученный в разряде между угольными электродами.

Σ – П переход

Фиол. спектр сравнительно полос.

Cz | | E. Étienne, P. Golf, B. Rosen 1951

Coll. de Mem. Liège, in 4°, n° 29, 1.

Условия возбуждения полос чого
полосы градуировки идут в одном
ряде органических соединений.
Одновременно определялось
влияние полосы чого в ацетоне
а реакция ● растворения графи-
MY | | того зерна, помещенного в

разрядной трубе радикалом CH_2 не наблюдалось. Это позволило сделать вывод о том, что CH_2 не является излучателем полос.

C_3

Phillips J. G. [1951]

Mém. Soc. Roy. Sci. Liège, 18, 538.-543.

Relative temperature coefficients of features in the C_3 spectrum.

C3 1952

Durie, R.A.

Proc. Roy. Soc. (S) A211, 110, 1952.

Полоса 4050 в изучении
пламени при реакции озона
с органическими соединениями

Полоса 4050 появилась в спектре
когда исследовали пары C2
Пламя наблюдалось, а затем они
только начали появляться.

Вьюри показал, что с исчезновением непрерывного излучения в спектре пропадает полоса 1050 и что в случае замены среды ненасыщенной CCl_4, необходимо добавлять водород, иначе полосы 1050 в спектре не появляются.

Cs

Gaydon A.G.,
Wolfhard H.G.

1952

Proc. Roy. Soc (L). A213, 366

Полосы 4050 Å в спектре пламени углеводородных пламен.

C3 K. Knox, R.G.W. Norrish, G. Porter. 1952

J. Chem. Phys. 20, 1477

Такое разрушение кислорода при действии света и последующее выделение окислительного вещества, вызываемого фотовосстановлением

M2y

C3 | Garton W.R.S. | 1953.

Proc Phys. Soc (L) A66, 848

Появление полос 4050Å в спектре угольной дуги Кина в вакуум. трансформ. Дуга в атмосфере водорода (0,5 мм Hg) этим полосы наблюдались до 2800°K. В спектре наряду с полосами C_2 появлялись полосы 4050Å, бывш

не исчезнуть, если работу вести при непрерывном откачке системы. Очевидно, что в условиях примененного возбуждения водород не играет никакой роли.

1953

C_3

Gaupil R., Herman R

Ann. Astrophys., 1953, 16, N6, 444

Условия испускания и прохождения группы полос 4050 Å.

Расчет частот по ур-нию в книге Герцберга

$$\lambda_1 + \lambda_3 = K_1\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) + K_3\left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}\right)$$

$$\lambda_1 \lambda_3 = \frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_1 m_2 m_3} K_1 K_3$$

Для C_3 $\lambda_1 + \lambda_3 = 2k\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m}\right) = \frac{4k}{m}$

$$\lambda_1 \lambda_3 = \frac{3k^2}{m^2}$$

$$x^2 - \frac{4k}{m}x + 3\frac{k^2}{m^2} = 0$$

$$\lambda_3 = \frac{3k}{m} \qquad \nu_3 = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{3k}{m}}$$

$$\lambda_1 = \frac{k}{m} \qquad \nu_1 = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$k = 2A$$

$$2A = 35 = 35 \cdot 10^4 \frac{см^{-1}}{A^2}$$

$$m = 12 \cdot 1{,}66 \cdot 10^{-24}\,г$$

$\nu_3 = 1725$ и $\nu_1 = 1020$ см$^{-1}$

в конце концов даст $\nu_1 = 1947$ см$^{-1}$ и

$\nu_3 = 1263$ см$^{-1}$

C_3.

Gaupil R.

1953

Compt. Rend. 236, 1542

Вычислено разделение нормального и первого возбужденного энергетического уровня линейной молекулы C_3.

C3 — omnica 2147 1953

крыв.	Rene Coupil
помещ.	Renee Herman
зкз.	„Ann. d'Astrophys" 1953, 16 № 6, 1-22

Conditions d'emission et origine du groupe 4050 A des Noyaux cometaires.

Зак. 247

C3 | | S. Hautecler, B. Rosen 1953

Compt. rend 237, 794-5

Полосы Swingsa и образование углеродного порошка

Cd 1954 г.

4966 а

С3 Haubecker S., Rosen B. 1953

Actes Congr. Luxembourg 72 secs.
Assoc. franç. avancem sci.,

Некоторые замечания об излучении полос Свинга (группа Чобот) в лабораторных условиях.

Градиентный разрядник с полым катодом. Обнаружены новые полосы, предположительно совпадающие с полосами поглощения Свинга

РЖХ, 56 год, №20 64219.

Раз в спектрах „углеродных" звезд в области 3850-3300 Å. Повидимому эти полосы также принадлежат „молекуле Y050"

C3 | A. Menfils, B. Rosen | 1953

Coll. de Jem. Liège in 4° n° 27, 47

Полное доказательство так
то получить - будучи нашим
чтобы не содержит бесчисл.

44

C3

Norrish R.G.W., 1953

Porter G., Thrush B.A.,

Proc. Roy. Soc. (L) A216, 165.

Кварц чистой в аммиаке было изучено. При фотолизе различных соединений.

С3

Rosen B., Swings P. 1953

Ann. d'Astrophys., 16, 82

Наиболее полный обзор проблемы, связанной с полосами λ 4050 Å.

C3 Swings P. 1953

спектр. Ann. Astrophys. 16, 307-14.

Полосы C3 в спектре комет и звезд класса N.

C_3

спектр. звезд.

Swings P., McKellar A., 1953

K.N. Rao,

Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 113. 571-81

Спектр звезд N типа в опыт. области.

C_3 мощная спектр при $\lambda = 4050$

CA 48 12549i

C_3 | R. E. Honig | 1954

J. Chem. Phys. 22, 126.

Масс-спектрометрическим химиком из первых обнаружил существование молекулярных соединений углерода. Нагревая графитовую нить до 2600° он нашел в парах соединения углеродных ионов от C_4^- до C_8^-, а также молекулы C_1, C_2 и C_3.

M24

C_3^{13}

Клузиус, Дуглас 1954

Clusius K., Douglas A.E.

Canad. J. Phys., 1954, 32, № 5 319–325

Спектры Полосы поглощения C_3^{13} при 4050 Å

[молекула C_3^{13} – линейная]

X-55-10-18119

C3

спектр брош. водород.

N. H. Kiess, A. M. Bass 1954

J. Ch. Ph. 22, 569–570, № 3

Полоса 4050 Å в C_2H_2-O_2 пла

Богдре пламя, в зоне реакц

Хилгер Е-2. Дифракция 1 лин

2-го порядок решетки 21ff с

дисперсия 0,88 Å/мм

IV-5412

Лучше предположить, что спектр связан с Σ-П переходом молекулы C_3.

Наши измерения дали (J=48 – III)

$B' = 0.413\ см^{-1}$ $B'' = 0.430\ см^{-1}$

$D' = 0.45 \cdot 10^{-6}\ см^{-1}$ $D'' = 0.90 \cdot 10^{-6}\ см^{-1}$

$\nu_0 = 24675.75\ см^{-1}$.

C3

G. Herzberg

Mem. soc. roy. sci Liège 15, 231-331 atlas.

Лабораторные наблюд. спектров молекул. полосы в спектрах звезд и комет.

Идентифицировал C3 как причину полос λ405 0 дисциплинарных подробн.

Cз | Herman R, Herman L | 1954

Compt. rend., 238, 664

Полосы 4050 Å в спектре электр. разряда (ксенон 3 мм Hg, CO)

✓

(1 пер.) $(d^3\Pi - a^3\Pi)$ – CO

$(A^2\Delta - X^2\Pi)$ – CH.

Присвоение ● кантов, полн. с. пер 4315 Å.

C3 | R. Herman, L. Herman 1955

C2 | Ann. Sci. Rev. Sci. Engl. 15, 352-9

Новые лабораторные методы
важны, сильные природы

C4 | 49
144 | 80

Cz McKellar A., Richardson E.H. 1955

Mém. Soc. roy. Sci. Liége, Collection in-8°, 15, 256.

Связь годового покачивания, сопровождающего движение Юпитера со спектром звезд

C_3

1955

Levkovits H. C., Fain J., Matsen F. A.,

J. Chem. Phys., 1955, 23, 1690.

осн. сост.

$^2A_2$

Полная π-электронная обработка аллил-радикала и аллил-иона.

C_3
C_3^+

Формальная теория для осн. сост. C_3 и C_3^+ идентична с теорией для H_3 и H_3^+, разработанной Hirschfelder-ом и др. (J. Ch. Ph., 4, 121, 130, 1936).

Dehicoag. C_3 ($^2A_2$).

С3

спектр.

Marr G.V., Nicholls R.W. 1955

Canad. J. Phys. 33, №7, 394.

Полосы CO и непер. спектр в инородно-аперил. пламени:

Полосы CO наб. в спектре комет (7) и в спектре планет. звезд (9).
В лаборатории в исп. электрического разряда (6,1,4), в углеводор. пламенах (2,8,3) в угольн. печи (12)

к 6 полосам. Часть photolysis (II). Кузнецов и Дуглас (I) показали, что полоса связана с молекулой C_3

C_3 наблюд. в светящейся зоне богатой $C_2H_2+O_2$ Ультрафиолет. спектр. 4 А/мм при 4000 А.

$\frac{C_2H_2}{O_2}$ от 2,5 до 4

На выходе 3-ьим коэффициентом зонной спектр. в спектре есть полосы CN, CH, C_3, C_2.

Библиография.

C3 J. Phillips, L. Brewer 1955

Ann. Soc. roy. Sci. Liège 15, 341-51

У гр. кварцитов в смеси углерода
шир. 4000 Å и шир. 4300 Å
эффектная есть сопротивление
карбо. до 2000° ~~4700-3700 Å~~

CA. 49
14 475 K

C_3

F. Cabannes 1956

J. Phys. et radium 17, №6, 492-96

Образование газа углерода в пламенах и наблюдение молекулы C_3.

C_3 N.H.Kiess, H.P.Broida 1956

Спектр. Canad. J. Phys. 34, №12B, 1471–1479

Спектр дающий C_3 в обл. 3600–4200 Å.
$C_2H_2+O_2$ пламя $C_2H_2/O_2 = 1/1$.
(40 кадров полос)
Полосы вырождены в уравнения идеал. Интенсивность CN и C_2 полос была наименьшей

Ш-54/13

Наведені аналіз полос 4050 і дан аналіз полос 4072 Å

	4050 Å	4072 Å
B'	0.4125 ± 0.0005	0,4110 ± 0,0005
B''	0,4280 ± 0,0005	0,428 ± 0.001
V_0	24675,75 ± 0,08	24539,8 ± 0,2
D'	$(0,22 \pm 0,03) \cdot 10^{-6}$	$(0,12 \pm 0,06) \cdot 10^{-6}$
D''	$(0,46 \pm 0,05) \cdot 10^{-6}$	$(0,7 \pm 0,2) \cdot 10^{-6}$.

C_3 L. S. Nelson, D. A. Ramsay 1956

J. Ch. Ph. 25, №2, 372

Спектры поглощения свободных радикалов, наблюдаемые при импульсном фотолизе

С3

Brion H., Lefebvre R., Moser C.

1957

J. Chim. Phys. et phys.-chim. biol. 1957, 54, N5, 363-368 (фр.)

Электронные состояния углеводородных радикалов: аллила, пентадиенила, бензила.

РЖФ №1. 1958, 669.

C_3

J. H. Callomon, D. A. Ramsay 1957

Canad. J. Phys. 35, 12, 129

Рем-эффект диффузности

(C_2, C_3 полосы).

C3 (Di) 116-IV 1957

Kiess H., Broida H. P.

Mém. Soc. roy. sci. Liège, 1957, 18, Fasc. unique, 544-548 (anon).

Spectrum of the C_3 molecule between 3600 A° and 4200 A°.

PHX, 1958, 80274 10

2

С3

Оттиск 377 р. 1957

С. Нетгберг.

Тем. Зос. Лоу Зеі. Lieja
с 1957. 18 1397-1481
Последние лабораторные
исследов. лишуд интересен
с точки зрения астрономии

Пламя $C_2H_2+O_2$

Радикалы

C_3

G. V. Marr

Canad. J. Phys. 35, №11, 1265

1957

II. Свободные радикалы и инген. конденсация и их влияние на излучение C_3 радикала в бензоло $C_2H_2+O_2$ пламени.

Исслед. излучения бензол пламен C_2H_2/O_2 в инте 2,3–4,2. Измерения интенсивн. излуч. C_2, C_3, CH и CN и непрер. спектра

в обл. от 3000 до 5200 Å показало, что
а) непр. спектр частиц углерода имеет распределение энергии, соотв. температуре 2900 ± 200° K.
б) непр. спектр связанный с C_3 простирается у 3500 до 4600 Å с максимумом при 4000 Å
в) непр. спектр в обл. 3000 - 500 Å аналогичен раньше ему для молекулы CO.
В предыдущей точке является идентиф. полосы C_3 возможный механизм реакций образов. C_3 и связ. с ними излучения рассматривают и вероятно может предсуществ. сформ.

$$C_2(X^3\Pi) + C(^3P) \rightarrow C_3(\Sigma) + h\nu \text{ (Continuum)}$$

и $C_3(\Sigma) \rightarrow C_3(\Pi) + h\nu$ (полосы).

C_3

Marr G. V. 1957

Can. J. Phys., 35, 1275

The luminous mantle of fuel-rich oxyacetylene flames, II. Free radicals and continuum intensities, and their influence on the C_3 emissions.

C3

Phillips J. G. 1957

Mem. soc. roy. sci Liége 18, 538-43

Относительные температурные коэффициенты характеристик элементов спектра Cs.

РИФ, №2 1959, 4338

~~Нить~~ ~~Линия~~ ~3000°K

угольная трубчатая нить

C_3 Dohnen. (1958

C–C = 1,28

51/CS/UV/6 Douglas A. E. Astrophys. J. 114, 466.

54/CS/UV/3 Clusius K., Douglas A. E.

Canad. J. Phys. 32, 319.

C_3 Haser L. 1958

Ann. Astrophys., 21, 114.

Some new bands emitted by the oxyacetylene flame (in French).

C_3 1958

Marr G.V.,
Pubs Astron. Soc. Pacific 70, 197-201

Величайшей неожиданностью явилось связанным с изучением радикала C_3 в лабораторных и астрофизических исследованиях.

Континуум связанный с полосами C_3 в спектре пламени C_2H_2/O_2 пламени сходен с [illegible], реакцией $C(^3P)+(C_2(^3\Pi_g)) \rightarrow C_3(\tilde{X})+h\nu$ (континуум), которой бы

CA 52
#17, 14321 b

$C_3(\Sigma) \rightarrow C_3(\pi) + h\nu$ (bands).

Такой континуум не наб. в спектрах комет и след-но рассматриваемый выше механизм образования возбужденных радикалов C_3 не явл. доминирующим при образовании C_3 в комедах.

1959

~~[illegible]~~ - Engelke J. L.

8E27 High-temperature studies of the

C_3, C_3 molecule

спектр, sHf Наблюд. полосы C_3 в обл. 3700-4850A

Тем д-ром доказано, что он принадлежит переходу

$^1\Pi_u - {}^1\Sigma_g^+$, где послед. - осн. электр. сост. C_3.

Измерена зависим. интенс. в полос. и состав.

2J в обл. 4045 A. ΔH°_{f0} (C_3, газ) = 189 ± 5 ккал

Даны ф. ф. C_3 (C_p, $H-H$, S, Φ^*) при

298.15, 2000, 2500, 3000, 3500 и

UCRL 4000°K

8727

C3

Drowart J., Burns R.P., 1959
De Maria G., Inghram M.G.

J. Phys. Chem., 31, 1131-1132

Mass spectrometric study of carbon vapor.

1959

C_3

SiC_2

NH_2

HCO

HNO

NCO

NCS

CH_3

CH_2

C_2H

Herzberg G.

An. Real soc. esp. fis. y quim., ser A,

1959, 55 (a), v5 n 6, 179

Espectros de radicales libres.

cf. Ottucx

Cs | John L. Gardeke | 1959

US At Energy Comm. UCRL -8727, 84 pp., 1959.

Высокотемпер. изучение мол-ы Cs.

Показано, что псевдоконечный Cs ива. ● гадно полос

CA 53, 1619 Swings-а, связанных с изотопом

2HKB:

$^1\Pi_u \rightarrow {}^1\Sigma_g^+$. Интегральное поглощение для сил осц. $f = 0,2$.

Температурный коэфф. поглощ. и излучения band 405 nm для 184 и 197 ± 10 атом/мм Hg выяв. нижним пределом ренгер образования C_3.

C_3

Pitzer K., Clementi E. 1959.

J. Am. Chem. Soc., 81, 4477.

Large molecules in carbon combustion phenomena.

C_3 Pitzer K., Clementi E. 1959

JACS, 1959, 81, 4778

1961

C3

Baum William L., Fischer David W.

J. Chem. Phys., 35, N4, 1578

Ассоциация углеродных атомов из графита в высокочастотном искровом разряде.

C3

1961

1639. Волновые функции основного состояния линейных молекул. Clementi Enrico. Ground-state wave functions for linear molecules. «J. Chem. Phys.»; 1961, 34, № 4, 1468—1469 (англ.).—Сообщаются некоторые результаты предпринимаемых в Чикагском университете систематич. расчетов волновых функций трех- и четырехатомных молекул с помощью электронно-счетных машин. Приводятся орбитальные коэф. энергии МО линейных трехатомных молекул C_3, N_3^-, NO_2^+, HF_2^-, полученные по методу самосогласованных МО ЛКАО. В качестве АО использовали функции слейтеровского типа с экспонентами для свободных атомов. Полные энергии для перечисленных выше молекул равны (в ат. ед.): —113,08754, —162,54219, —202,90110, —198,28264. М. Местечкин

х. 1962. 1.

C_3

Осн. сост.

$^1\Sigma_g^+$

полная энергия.

1961

Ground-state wave functions for linear molecules. Enrico Clementi (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 34, 1468-9(1961).—Slater-type at. orbitals were used as a basis to calc. the L.C.A.O.-M.O.-S.C.F. wave functions for the $1\Sigma_g^+$ ground states of C_3, N_3^-, NO_2^+, and HF_2^-. The total energy in at. units is, resp., −113.08754, −162.54219, −202.90110, and −198.28264. R. Benz

C.A. 1961, 55 19 18284f

1961

C_3
Спектр

The C_3 spectrum at 4050 A. B. Rosen (Univ. Liege, Belg.). *Astron. J.* 66, 383(1961).—High-dispersion spectra were obtained, showing structure in bands of CH, NH, CN, and C_3 for several bright comets. For the C_3 system 55 emission features were measured in the spectrum of comet Burnham (1959 k). No definitive analysis of these bands was made, but the main feature at 4050 A. undoubtedly belongs to the (0,0) transition. C. C. Kiess

C.A. 1962·56·7
6797a

C_3

1962

12 В160. Спектр C_3. Brewer Leo, Engelke John L. Spectrum of C_3. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 4, 992—998 (англ.)

Изучены термодинамич. и спектроскопич. свойства молекулы C_3 путем исследования температурной зависимости давления паров, масс-спектрометрич. исследований, анализа спектров поглощения и излучения в области 3500—5000Å в широком интервале т-р (печь Кинга) и т. д. Определены интегр. интенсивности полос (рассчитаны силы осцилляторов) и вычислена энтальпия сублимации C_3 при различных т-рах. Показано, что значения последней величины, полученные разными методами (напр., по спектрам поглощения и излучения), хорошо согласуются друг с другом, причем среднее значение равно 188 *ккал/моль*. Предложена новая электронно-колебательная схема образования спектра C_3 в области 3500—4500Å. Показано, в частности, что т. наз. континуум C_3, наблюдаемый в спектрах некоторых источников, на самом деле является псевдоконтинуумом и обусловлен переходами между обычными

см. на об.

Ф.1962.12В

кн. 1957

дискретными уровнями ($A^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$), которые по-разному возмущены в различных источниках (печах, электрич. разряде или кометах). Указана величина частоты 000—000-перехода (24686 $см^{-1}$) и приведены значения колебательных частот, активных в электронном спектре молекулы C_3. Библ. 26 назв. Н. Бахшиев

C_3

1962

21Б46. Спектр C_3. Brewer Leo, Engelke John L. Spectrum of C_3. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 4, 992—998 (англ.).—С целью выяснения происхождения непрерывного фона в спектре C_3 предприняты измерения интегрального поглощения равновесного пара C_3 в печи Кинга при т-ре 3200°. Обработка полученных данных показывает, что этот фон является псевдоконтинуумом, так как не может быть связан с диссоциацией C_3 на $C_2 + C$. Последнее предположение потребовало бы для объяснения наблюдаемой интенсивности считать силу вибратора порядка 10^6. Измерение зависимости интенсивности непрерывного фона спектров поглощения и излучения от т-ры дало возможность определить энтальпию сублимации C_3 $\Delta H_0^0 = 188 \pm 5$ *ккал/моль*, что согласуется с данными измерений другими методами. Отсюда заключено, что рассматриваемое сплошное поглощение отвечает тем же связанным состояниям, что и дискретные полосы Свингса, трактуемые как C_3 ($A^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$). Сила вибратора для полос 4050 А C_3 определена как 0,13 с возможной ошибкой в 2 раза. В. Дианов-Клоков

4858

ат.

2. 1962. 21

C_3

Ommen 4858

1962

Spectrum of C_3. Leo Brewer and John L. Engelke (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 36, 992–8 (1962).—The enthalpy of sublimation of C_3 was detd. to be 188 kcal./mole by a 2nd-law method by using both emission and absorption measurements. The results agreed with the total vapor pressure and mass spectrometer measurements. The enthalpy agreement and integrated absorption coeff. measurements demonstrate that the so-called continuum of C_3 is a pseudocontinuum and involves the same bound states as the discrete Swings bands of C_3 ($A^1\Pi_u$-$X^1\Sigma_g^+$. An oscillator strength for the 4050-A. bands was 0.13. Henry Leidheiser, Jr.

C. A. 1962. 56. 13
15058 ab

$\nu_1'' = 1300$ $\nu_2'' = 550$ $\nu_3'' = 2200$

$\nu_1' = 1130$ $\nu_2' = 420$ $\nu_3' = 2000$

000-000 полоса имеет кант при 24686 см$^{-1}$.
40500

010-010
40728

C_3

1962

14 Б93. Спектр поглощения паров углерода в твердом аргоне при 4 и 20° К. Barger R. L., Broida H. P. Absorption spectrum of carbon vapor in solid argon at 4° and 20° K. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 5, 1152—1153 (англ.)

Измерены спектры паров углерода, нанесенных на матрицу из твердого аргона в области 3000—6000 А при 4 и 20° К. В области 3797—4221 А в спектре наблюдаются полосы поглощения (21 полоса), которые отнесены к поглощению C_3. В более длинноволновой области лежат полосы 5269 и 5208 А, отнесенные к поглощению C_2. При повышении т-ры от 4 до 20° К полуширина полос увеличивается в полтора раза.

Н. Куплетская

X·1963·14

C_3

C_2

1962

Absorption spectrum of carbon vapor in solid argon at 4 and 20°K. R. L. Barger and H. P. Broida (Natl. Bur. of Stds., Boulder, Colo.). *J. Chem. Phys.* **37**, 1152–3(1962). A spectrum consisted of 21 absorption lines and a broad continuum was observed at 3797–4221 A. The spectrum was attributed to C_3. Two weak and broad lines were observed at 5269 and 5208 A.; these were attributed to C_2. Henry Leidheiser, Jr.

2 maps

C.A. 1963. 58. 1

1451

C_3

12 B57. Самосогласованная волновая функция МО ЛКАО для $^1\Sigma^+_g$ основного состояния C_3. Clementi Enrico, McLean A. D. SCF—LCAOMO wave function for the $^1\Sigma^+_g$ ground state of C_3. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 1, 45—47 (англ.) 1962

Вычислена энергия и волн. ф-ция основного

$$^1\sum_g^+ (1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (3\sigma_g)^2 (2\sigma_u)^2 (4\sigma_g)^2 (3\sigma_u)^2 (1\pi_u)^4$$

состояния молекулы C_3 для экспериментально наблюдаемой величины расстояния между соседними атомами $R_{CC} = 1{,}281$ А при линейном симметричном расположении атомов. Расчет произведен самосогласованным методом МО, являющихся линейной комбинацией атомных ф-ций Слейтера. Взаимодействие конфигураций не учитывалось. Сообщаются результаты четырех различных вариантов расчета, различающихся кол-вом или видом АО, образующих базисную систему ф-ций вариац. метода решения. Рассчитанные значения полной энергии, в зависимости от выбора базисных АО Слейтера, составляют —113,08754; —113,10970; —113,16254 и —113,1651 ат. ед., в то время как сумма энергий трех атомов С

Ф. 1962. 12В

см. на об.

в основных ^3P-состояниях равна: 1) —112,857 ат. ед. при расчете вариац. методом с минм. базисной системой АО Слейтера, 2) —112,8672 ат. ед., если, кроме того, минимизировать энергию по отношению к величинам эффективных зарядов и 3) —113,565 ат. ед. — эксперим. величина. Характер получаемой волн. ф-ции соответствует почти чистой структуре: C=C=C. Вычисления выполнены на электронной счетной машине по программе, описанной ранее (РЖФиз, 1961, 1В50). С. Ветчинкин

C3

1962

S.C.F.–L.C.A.O.–M.O. wave function for the $^1\Sigma_g^+$ ground state of C_3. Enrico Clementi and A. D. McLean (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 36, 45–7(1962); cf. *CA* 57, 4183*f*. Four different wave functions for the $(1\sigma_g)^2\ (1\sigma_u)^2\ (2\sigma_g)^2\ (3\sigma_g)^2\ (2\sigma_u)^2\ (4\sigma_g)^2\ (3\sigma_u)^2\ (1\pi_u)^4$:$^1\Sigma_g^+$ ground state of C_3 were calcd. with the use of 4 different base sets of Slater-type orbitals which were formed from those previously computed for the C_2 mol. (*CA* 55, 18284*e*; Mulliken, *CA* 55, 23029*i*). S.C.F. wave functions for occupied mol. orbitals and the corresponding orbital energies are tabulated. The 4 computed total energies range from −113.16518 to −113.08754 at. units. R. Benz

C.A. 1962 57.7
8068 h

C_3

1962

18Б13. Волновая функция самосогласованного поля МО ЛКАО для основного $^1\Sigma_g^+$-состояния C_3. Clementi Enrico, McLean A. D. SCF — LCAO-MO wave function for the $^1\Sigma_g^+$ ground state of C_3. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 1, 45—47 (англ.).—В рамках самосогласованного метода МО ЛКАО рассчитана волновая функция основного состояния линейной системы молекулы C_3 при межъядерном расстоянии C—C 1,28 A. Однодетерминантная волновая функция состояния $^1\Sigma_g^+$ отвечала конфигурации $(1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(3\sigma_g)^2 \cdot (2\sigma_u)^2(4\sigma_g)^2(3\sigma_u)^2(1\pi_u)^4$, причем при построении МО использовались четыре различных приближения: выбор одной слейтеровской АО для каждого ядра C при построении определенной МО, выбор двух $2p\sigma$-АО на центральном ядре, выбор двух $2p\sigma$-АО на центральном атоме с добавочной примесью $3d\sigma$-АО на центральном атоме и $3d\pi$-АО на крайних атомах, выбор двух $1s$-АО на центральном атоме. Рассчитанные полные энергии соответственно равны —113,08754, —113,10970,

см. обр.

х. 1962. 18

—113,16254 и —113,16518 ат. ед. Общий выигрыш в полной энергии за счет последовательного расширения базиса оказывается сравнительно малым ~2,1 *эв*. На основании общей картины распределения электронной плотности структура C_3 может быть отображена ф-лой :C=C=C:.

Е. Никитин

отписск 1008 1962

C_3 Herzberg G.

Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962. S. I. s. a., G3/I-G3/II

Последние работы по спектрам свободных радикалов.

см. SiC_2

7 Д177. **Спектральные исследования паров углерода, сконденсированных в инертных матрицах при 4 и 20°К.** Weltner William, Jr, Walsh Patrick N. Spectroscopy of carbon vapor condensed in inert matrices at 4° and 20° K. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 5, 1153—1154 (англ.)

Спектр поглощения C_3, изолированного в твердых матрицах Xe, Ar и Ne при т-рах 4 и 20° К, исследован в области системы полос 4050 Å. Образцы получались осаждением на охлажденное до 4 или 20° К окно из CsBr углерода, испаряемого при т-ре 2400° К с чистого графитового стержня. На это же окно направлялся поток инертного газа со скоростями 0,5—1 *л/час*. Отмечается, что полоса C_3 при 4072 Å не смещается при переходе от газа к матрице Ne, полоса у 4050 Å при этом смещается на 50 $см^{-1}$ в красную сторону. В спектре разбавленной матрицы Ne наблюдаются 4 пары полос (4072 и 3933, 4058 и 3921, 4020 и 3886, 3979 и 3847 Å), разность между которыми составляет 868, 861, 858 и 862 $см^{-1}$. Эта частота отнесена к частоте ν_1 сим. вал. кол. C_3 в возбужденном состоянии. Спектр C_3 в матрице Ar согласуется с полученным другими авторами. Здесь также наблюдаются пары полос с разностью частот около 860 $см^{-1}$. В ИК-области полу-

чена только одна полоса, отнесенная к ν_3 асим. вал. кол. C_3 в основном состоянии. Она встречается при 2040 *см*$^{-1}$ в матрице Ne как дублет при 2036 и 2040 *см*$^{-1}$ в Ar и как слабый дублет при 1993 и 2021 *см*$^{-1}$ в Xe. Некоторые слабые полосы, обусловленные C_2, обнаружены между 5199 и 5269 Å в матрице Ne и вблизи 4700 и 5200 Å в матрице Ar.

К. Василевский

C_3

C_2

1962

14Б131. Спектроскопия паров углерода, конденсированных на инертных матрицах при 4 и 20° К. Weltner William, Jr, Walsh Patrick N. Spectroscopy of carbon vapor condensed in inert matrices at 4° and 20° K. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 5, 1153—1154 (англ.)

Исследованы ИК-спектры в области 3—33 μ, а также видимые и УФ-спектры поглощения паров углерода, нанесенных на матрицы из Ne, Ar и Xe при 4 и 20° К. В области 3800—4050 А в спектрах на матрицах из неона и аргона обнаружено 8 полос, принадлежащих поглощению C_3. Разность между парами этих полос, равная 860 $см^{-1}$, отнесена к ν'_1 — симм. вал. кол. C_3 в возбужденном состоянии. В ИК-области для матрицы из Ne имеется одна полоса асимм. вал. кол. C_3 в основном состоянии при 2040 $см^{-1}$, превращающаяся в дублет для матриц из Ar и Xe. К поглощению C_2 относят полосы 5199 и 5269 А в Ne и 4700 и 5200 А в Ar.

Н. Куплетская

 1962

Weether W.,
Condensation. Evaporation
Solids Proc. intern. Symp.,
Dayton, Ohio, 1962, 243-53

C3 W. Weltner, Jr. and J.R.W. Warn [1962]
(Union Carbide Corp. Research Inst.
Tarrytown N.Y.) Jan. 1962
Contract DA-30-069-ORD-2787

Матрицы изолируют высокотемпературных паров: окиси бора и углерод.

[II] B2 D3

C_3 Clementi E., Clementi H. 1963

молек.
расчеты

Распределение электронной плотности в небольших молекулах.

„J. Chem. Phys.", 1962, 36, №11, 2824

Ф-1963 2ИД

см. C_2 (III)

IV-9637

1963

490

C_3

Спектры

(e)

Spectrum of the C_3 molecule. L. Gausset, G. Herzberg, A. Lagerqvist, and B. Rosen (Univ. Liege, Belg.). *Discussions Faraday Soc.* **1963**(35), 113–17. High-resolution spectra of the 4050-A. group of the C_3 radical were obtained in absorption in the flash photolysis of diazomethane. A reinvestigation of the 0–0 band at 4050 A. shows the electronic transition to be of the type $^1\Pi_u - {}^1\Sigma_g^+$ (not $\Sigma_u^+ - {}^1\Pi_g$). From the analysis of several addnl. bands, esp. 000–020 and 010–010, it follows that the bending frequency ν_2'' of the ground state is very low (about 70 cm.$^{-1}$). Because of this low value of ν_2'', a very large l-type doubling in the 010 level arises. For the same reason, the rotational const., α_2'', is very large. The low value of ν_2'' combined with large vibronic (Renner-Teller) splittings of the levels involving ν_2' in the upper state ($\nu_2' \gg \nu_2''$) is largely responsible for the complexity of the vibrational structure of the 4050-A. group; since, even at room temp., ν_2'' is excited by several quanta, both progressions and sequences in ν_2 arise which, on account of the vibronic splittings, do not show the usual simple regularities.

S. E. Whitcomb

Lab. Mach

C.A. 1964. 60

129 a

C_3

спектр

1963

490

10 Д126. Спектр молекулы C_3. Gausset L., Herzberg G., Lagerqvist A., Rosen B. Spectrum of the C_3 molecule. «Disc. Faraday Soc.», 1963, № 35, 113—117 (англ.)

Получены спектры радикала C_3 в области 4050 Å в поглощении при импульсном фотолизе диазометана. Уточненный анализ O—O-полосы у 4050 Å показывает, что спектр соответствует электронному переходу $^1\Pi_u - ^1\Sigma_g^+$. Из анализа некоторых других полос, в особенности 000—020 и 010—010, следует, что деформационная частота ν_2'' основного состояния весьма мала (~ 70 *см*$^{-1}$). Поэтому наблюдается значительное удвоение *l*-типа для уровня 010. По той же причине вращательная константа очень велика. Малая величина ν_2'' в основном обусловливает сложность колебательной структуры спектра.

Ф-1964-10Д

C3 Dixon R.N.

Discussion Faraday Soc.,

1963, 35, 222.

1963

by pasted Weldner-an McLeod-a.

С3 6/22

Dixon R.N., Walsh A.D. 1963.

Disc. Faraday Soc., 1963, 35, 223.

Исследование работ Gousset-a, Kerr-berge, Lagergvist-a и Rosen-a в отношении низкого значения ν_2 ~ 70 см$^{-1}$.

C3 Herzberg G.

1963
1009

см/рукт.
э. бозб. сост.

„Discussions Far. Soc."
1963, № 35

„Determination of the Struct.,

1963

41M - 10

C, C_2, C_3, C_4 (Стабильность электрон. структур

Mueller H.
Z.Chem., 1963, 3(10), 369-78

Physical stability and ...

J

12 Д224. Спектры свободных многоатомных радикалов. Рамзай Д. В сб. «Успехи спектроскопии». М., Изд-во ин. лит., 1963, 11—74

В обзоре обобщен накопленный материал по спектрам многоатомных свободных радикалов и технич. приемы, используемые для получения этих спектров. Дано описание спектров радикалов, полученных методами электрич. разрядов, пламен, флуоресценции, непрерывного и импульсного фотолиза, методами высокотемпературных печей и замороженных радикалов, а также химич. методами. Обсуждены спектры радикалов C_3, CO^+_2, CS^+_2, $C_4H^+_2$, HCO, DCO, HNO, DNO, NH_2 и ND_2, для которых выполнен подробный анализ вращательной структуры. При интерпретации спектров использован метод МО с привлечением орбитальных диаграмм Уолша. На примере спектра поглощения радикала NH рассмотрено влияние на колебательные спектры линейных многоатомных молекул взаимодействия электронного момента кол-ва движения с моментом, связанным с деформационными колебаниями молекул (эффект Реннера). Библ. 195 назв.

В. Колобков

C_3
SiC_2

1963

12 Д180. **Спектроскопия молекул C_3 и SiC_2 в неоновых и аргоновых твердых растворах.** Weltner W., Jr, McLeod D., Jr. Spectroscopy of C_3 and SiC_2 molecules in neon and argon matrices. Abstract. «Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc., Columbus, 1963, Columbus Ohio, s. a., 47—48 (англ.)

Измерены ИК- и УФ-спектры поглощения C_3 в неоне и аргоне при 4 и 20° К, а также спектры люминесценции в видимой области. Выделены полосы, отвечающие колебаниям в основном и возбужденном состоянии. Сделан вывод, что наблюдаемый переход скорее $^3\Pi_u \leftrightarrow X^3\Sigma_g^-$, чем $^1\Pi_u \leftrightarrow {}^1\Sigma_g^+$. Аналогичные измерения проведены для SiC_2. В спектрах обнаружены полосы примесей Si_2; Si_2C; Si_2C_3. Д. Глебовский

?

ВФ-1022-17

Ф·1964·12Д

C_3

25 Б62. **Спектроскопия C_3 и SiC_2 в матрицах неона и аргона.** Weltner W., Jr, McLeod D., Jr. Spectroscopy of C_3 and SiC_2 molecules in neon and argon matrices. Abstract. «Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc., Columbus, 1963». Columbus Ohio, s. a., 47—48 (англ.)

Изучены УФ- и ИК-спектры поглощения и спектры флуоресценции молекул C_3 в матрицах неона и аргона при 4 и 20° К. Спектр в неоне близок по своему характеру к хорошо известному спектру испускания комет, начинающемуся при 4050А. Найденные из УФ-спектра значения частот колебаний C_3 в возбужденном состоянии равны 1100 $см^{-1}$ (ν_1') и 420 $см^{-1}$ (ν_2'). Из ИК-спектров поглощения и флуоресценции для основного состояния получены значения ν_1 1235 $см^{-1}$ и ν_3 2042 $см^{-1}$. Данные УФ-спектров согласуются с литературными данными: ν_2 ~70 $см^{-1}$. Показано, что наблюдаемая полоса скорее относится к переходу $^3\Pi_u—X^3\Sigma_g^-$, чем к ожидавшемуся переходу $^1\Pi_u—^1\Sigma_g^+$. Подобное исследование проведено также с молекулой SiC_2, спектр которой ранее наблюдался в излучении звезд. Поглощение начинается около 4963А и содержит серию полос, часть из которых может быть отнесена к молекулам Si_2, Si_2C и Si_2C_3.

Из резюме авторов

1963

ВФ-10022-IV

Х.1965-5

C3

1964

22 Б15. Теоретическое исследование электронной структуры молекул, содержащих *sp*-гибридные атомы. II. Молекула C_3. Julg André, Pellégatti Alain. Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hybridés en *sp*: II: La molécule C_3. «Theoret. chim. acta», 1964, 2, № 3, 210—214 (франц.; рез. англ., нем.).

Расчет молекулы C_3 по улучшенному методу МО ЛКАО (Сообщение I, РЖХим, 1965, 14Б83) произведен в двух вариантах: без учета электронного смещения вдоль δ-связи и с учетом такого смещения. При расчете по первому варианту получаются слишком высокие остаточные заряды у крайних атомов (q_1 и q_3). Кроме того, не наблюдается равенства значений для интегралов остова I_{12} и I_{21}. Указанные недостатки удается избежать во втором варианте. При этом вычисленные заряды равны $q_1 = q_2 = 0{,}09$; полученное в результате расчета межатомное расстояние C—C равно 1,286 A и хорошо согласуется с опытным значением. Рассчитанные энергии первых двух $N \to V$-переходов $^1\Sigma_g^+ \to {}^1\Sigma_u^- = 4{,}7$ *эв*, $^1\Sigma_g^+ \to \Delta_u = 4{,}8$ *эв*. По данным, полученным путем изучения спектров комет, энергии этих переходов должны быть $> 4{,}1$ *эв*.

М. Адамов

X·1965·22

C_3

1964

5Д108. Теоретическое исследование электронной структуры молекул, содержащих *sp*-гибридные атомы. II. Молекула C_3. Julg André, Pellégatti Alain. Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hubridés en sp. II. La molécule C_3. «Theoret. chim. acta», 1964, 2, № 3, 210—214 (франц.; рез. англ., нем.)

Расчет молекулы C_3 по улучшенному методу МО ЛКАО произведен в двух вариантах: без учета электронного смещения вдоль σ-связи и с учетом такого смещения. При расчете по первому варианту получаются слишком высокие остаточные заряды у крайних атомов (q_1 и q_3). Кроме того, не равны интегралы остова I_{12} и I_{21}. Указанных недостатков удается избежать во втором варианте. При этом вычисленные заряды равны $q_1=q_3=0{,}09$, полученное в результате расчета межатомное расстояние C—C равно 1,286 Å и хорошо согласуется с опытным значением. Рассчитанные энергии первых двух $N\rightarrow V$-переходов $^1\Sigma_g{}^+\rightarrow{}^1\Sigma_u{}^-$, $^1\Sigma_g{}^+\rightarrow\Delta_u$ равны соответственно 4,7 и 4,8 *эв*. По данным, полученным путем изучения спектров комет, энергии этих переходов должны быть выше чем 4,1 *эв*. Ч. I см. реф. 5Д107. М. Адамов

Ф. 1965·58

C_3

1964

4 Д192. Аномалии колебательных силовых постоянных. Pitzer Kenneth S., Strickler S. J. Abnormalities in vibrational potential constants. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 3, 730—732 (англ.)

Приведены величины силовых постоянных угла между двойными связями =C= и =N= для 9 линейных и квазилинейных молекул. Отмечена большая область ее изменения (от 0,095 до $7{,}7 \cdot 10^{-12}$ *эрг · град*$^{-2}$). Малое значение силовой постоянной угла C=C=C в молекуле C_3O_2 позволяет объяснить ее ИК-спектр. Очень низкое значение для C_3, полученное из спектроскопич. данных, приводит к завышенным значениям некоторых термодинамич. величин. Библ. 13 назв. С. С.

Ф. 1965. 4Д

Monogram. Strickler S.J., Pitzer K.S. 1964.

Molecular Orbitals in Chemistry

$C_{3,...}$

Academic Press Inc., New York, 1964.

Jaffe, Energy Calculations for Polyatomic Carbon Molecules

284-291.

(*) C_3 Vi fun

Spectroscopy of carbon vapor condensed in rare-gas matrixes at 4 and 20°K. I. W. Weltner, Jr., P. N. Walsh, and C. L. Angell (Union Carbide Res. Inst., Tarrytown, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 40(5), 1299–1305(1964). The mols. vaporizing from graphite at 2300–600°K. were trapped in Ne, Ar, and Xe matrixes at 4 and 20°K. The near-ultraviolet bands of C_3, beginning at 4050 A. in the gas, were observed in the absorption spectra of these matrixes, but shifted to 4057 A. in Ne, 4102 A. in Ar, and 4226 A. in Xe. The Ne spectrum is strikingly similar to low-temp. gaseous spectra, including cometary spectra, but the matrix bands occur in groups about 100 cm.$^{-1}$ wide. The infrared spectrum yields a strong band at 2038 cm.$^{-1}$ in Ar (2042 cm.$^{-1}$ in Ne) which is assigned to ν_3'', the asymmetric stretching frequency of C_3 in the ground electronic state. When the Ar matrix is allowed to warm up, diffusion occurs, and larger carbon mols. C_4, C_5, C_6, etc., are formed, causing the appearance of many new bands in the infrared. The Swan bands of C_2 are observed in Ne and Ar matrixes, but only after some annealing of the matrix has occurred by warming. The vibrational frequency of C_2 in the excited $^3\Pi_u$ state in a Ne matrix is 2094 cm.$^{-1}$, exceeding the value found in any other matrix or in the gas (1750 cm.$^{-1}$). The possible appearance of C_2 in its $^1\Sigma_g^+$ ground state in Ne and Ar matrixes

CON

1964

C.A. 1964. 60. 7589h–7590ab

Cell. refs.

is discussed briefly. II. William Weltner, Jr., and Donald McLeod, Jr. *Ibid.* 1305–16. The vaporization of ^{13}C-substituted carbon has established the isolation of C_3 mols. in the matrix and the assignment of the ν_3'' frequency observed in the infrared spectrum. A vibrational analysis of the near-ultraviolet spectrum (the well-known 4050-A. gas bands) of C_3 trapped in a Ne or Ar matrix was carried out. The presence of a large Renner effect ($\epsilon = \pm 0.566$) in the bending motion in the excited state of this $^1\Pi_u \leftrightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ transition was confirmed. Infrared and fluorescence spectra also support the assignment of a low bending frequency ($\sim$70 cm.$^{-1}$) in the ground state as recently proposed by Gausset, *et al.* (*CA* 60, 128*h*). Then the following vibrational frequencies apply: $^1\Pi_u$ state $\nu_1' = 1125$ cm.$^{-1}$, $\nu_2' = 305$ cm.$^{-1}$, $\nu_3' = ?$; $^1\Sigma_g^+$ ground state $\nu_1'' = 1235$ cm.$^{-1}$, $\nu_2'' \cong 70$ cm.$^{-1}$(?), $\nu_3'' = 2040$ cm.$^{-1}$ ν_2'' is still doubtful because it does not yield thermodynamic functions for C_3 which agree with those derived by mass spectrometry. The *f* number (oscillator strength) of the 0–0 band is $\sim 7 \times 10^{-4}$ in a Ne matrix. The properties of a long-lived emission (lifetime = 0.02 sec. in Ne) at 5856 A. indicate that it is the $^1\Pi_u \rightarrow {}^1\Sigma_g^+$ transition of C_3. Another, rather unpredictable, system of bands near 4200 A. was also seen in absorption and emission, but the mol. producing these bands was not identified. An attempt was made, via a linear chain model, to assign the stretching frequencies of the larger carbon molecules, C_4, ..., C_{12}, which were observed in the infrared after solid-state diffusion was allowed to occur. RCJQ

C_3

спектр

11 Д178. Спектроскопия паров углерода, сконденсированных в матрицах редких газов при 4 и 20° К. I. 1967

Weltner W., Jr, Walsh P. N., Angell C. L. Spectroscopy of carbon vapor condensed in rare-gas matrices at 4° and 20° K. I. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 5, 1299—1305 (англ.)

Проведено спектральное исследование (область 4230—3790 Å) методом матричной изоляции при 4 и 20° К молекул углерода, полученных испарением из графита. В качестве редких газов использованы Ne, Ar и Xe. Полосы поглощения C_3 в близкой УФ-области, начинающиеся в газе при 4050 Å, сдвинуты в спектрах матриц (M) к 4057 Å в Ne, к 4102 Å в аргоне и 4226 Å в Xe. Спектр C_3 в неоновой M сходен со спектром газа при низкой т-ре и со спектром комет. Сильная ИК-полоса поглощения 2038 $см^{-1}$ в Ar (2042 $см^{-1}$ в Ne) отнесена к ν_3'' — частоте несим. вал. кол. C_3 в основном электронном состоянии. Нагревание аргоновой M вызывает появление новых ИК-полос вследствие диффузии молекул C_3 и образования молекул C_4, C_5, C_6 и т. д. Наблюдены сван-полосы поглощения C_2. Частота колебаний C_2 в возбужденном $^3\Pi$-состоянии в неоновой M (2094 $см^{-1}$) превосходит по величине аналогичные частоты колебаний C_2 в других M и в газе (1750 $см^{-1}$). Библ. 32 назв.

Ф·1964·11Д

C_3 1964

3 Д175. Спектроскопия паров углерода, сконденсированных в матрицах редких газов при 4 и 20° К. Ч. II. Weltner William, Jr, McLeod Donald, Jr. Spectroscopy of carbon vapor condensed in rare-gas matrices at 4° and 20° K. II. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 5, 1305—1316 (англ.)

Продолжено спектральное исследование молекул углерода в области 4200—3520 Å методом матричной изоляции в Ne и Ar при 4 и 20° К. Дан колебательный анализ спектров поглощения и испускания матриц, содержащих молекулы C_3 и C^{13}-замещенные молекулы C_3. Приведены следующие основные данные относительно электронных и кол. уровней энергии молекулы C_3: 4050 Å-0—0-полоса перехода $^1\Pi_u \leftrightarrow X^1\Sigma_g^+$; в возбужденном $^1\Pi_u$-состоянии $\nu_1' = 1125$ *см*$^{-1}$, $\nu_2' = 305$ *см*$^{-1}$, пара-

ф. 1965. 3Д

метр Реннера $\varepsilon = +0{,}566$. В основном электронном состоянии $^1\Sigma_g{}^+$: $\nu_1'' = 1230$ *см*$^{-1}$, $\nu_2'' \cong 70$ *см*$^{-1}$, $\nu_3'' = 2040$ *см*$^{-1}$. Сила осциллятора 0—0-полосы 4050 Å $f = 7 \cdot 10^{-4}$. 0—0-полоса перехода $^3\Pi_u \leftrightarrow X^1\Sigma_g{}^+$ расположена около 5856 Å. Время жизни в триплетном состоянии в неоновой матрице при 4° К равно 0,02 *сек*. Новые полосы поглощения, появляющиеся в области 1300—3600 *см*$^{-1}$ при нагревании матрицы, отнесены к вал. кол. линейных молекул C_4, C_5, . . ., C_{12}. Библ. 20 назв. Ч. I см. РЖФиз, 11Д178.

M 1104 - IV 1965

S_2, C_3 (мол. пост.)

Brabson G.D.

U.S.At.Energy Comm. UCRL- 11976,
1965, 128pp

Spectroscopic investigation of high temperature species isolated in inert gas matrixes

F

J CA.,1966,64,N 5, 5936a

C_3

Barger R. L. 1965

Dissert. Abstr., 25(10), 6009

Spectra of C_2 and C_3 in frozen gases at 4°K and 20°K.

(cite. C_2)

ВФ-М1107-IV 1965

C_3

6 Д244. Спектр C_3 в матрицах при 4 и 20° К. Barger R. L., Broida H. P. Spectra of C_3 in solidified gases at 4° and 20° K. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 7, 2364—2370 (англ.)

спектры

ВФ-1324-IV

Изучен спектр молекул C_3 в матрицах из Ar, Kr, Xe, O_2, N_2, CO_2, SF_6 при 4 и 20° К. Источником молекулярного пучка углерода с известной плотностью C_3 служила эффузионная ячейка, нагреваемая до т-ры 2900° К. В области 3000—4500 Å получены полосы поглощения, отнесенные к переходу $^1\Pi_u$—$X^1\Sigma_g{}^+$ молекулы C_3. Приведены длины волн, ширины и интенсивности линий этой полосы. Вычислены основные колебательные частоты ν_1 и ν_2 для верхнего состояния $^1\Pi_u$ и ν_2 для основного состояния $^1\Sigma_g{}^+$, постоянные Реннера для ν_2 состояния $^1\Pi_u$ и сила осцилятора для перехода $^1\Sigma_g{}^+$—$^1\Pi_u$ молекулы C_3 во всех матрицах. Сила осцилятора оказалась одинаковой во всех случаях и равной $\sim 6 \cdot 10^{-2}$. Обнаружено, что ширина линий C_3 меняется в различных матрицах от 40 до 500 $см^{-1}$, а матричный сдвиг от —410 до 1065 $см^{-1}$. Библ. 17 назв.

А. Беляева

Ф. 1966. 6Д

Физ. 1 530.1

Kohn W., Sham L. J.

Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas. Phys. Rev., 1965, 137, N 6A, 1697—1705.

Квантовые колебания плотности неоднородного электронного газа.

Spectra of C_3 in solidified gases at 4° and 20°K. R. L. Barger and H. P. Broida (U.S. Natl. Bur. of Stds., Boulder, Colo.). *J. Chem. Phys.* 43(7), 2364–70(1965)(Eng). Wavelength, line width, and intensity measurements were made, 3000–4500 A., of the spectra of triat. C mols. trapped in solid matrixes of Ar, Kr, Xe, O, N, CO_2, and SF_6 at 4 and 20°K. The C source was a Knudsen cell, operated at temps. up to 2900°K., from which effused a mol. beam with known ds. of C_3. Absorption transitions are assigned to vibrational levels of both upper and lower states of the $^1\Pi_u$–$X^1\Sigma_g^+$ 4050-A. group of C_3. The fundamental vibrational frequencies ν_1 and ν_2 for the upper $^1\Pi_u$ state, ν_2 for the ground $^1\Sigma_g^+$ state, and Renner consts. for ν_2 of the $^1\Pi_u$ state in these matrixes are given. Measurements of absorption intensities give an oscillator strength, averaged for all matrixes, of 6×10^{-2} for the C_3 group. Little or no matrix effect on the intensities is found. However, exptl. detd. corrections to the intensities are necessary for effects caused by apparent diffusion of C in the matrixes to form nonabsorbing C aggregates. C_3 line widths vary with matrix from 40 to 500 cm.$^{-1}$, and C_3 line shifts vary from −410 to 1065 cm.$^{-1}$ All matrix shifts are to the red, except in the case of the CO_2 matrix. No definite effect of temp. on line widths or shifts is found.

RCJQ

1965

C3

N10

C.A. 1965. 63.

12512 g

C3

B9-IV-A868

1965

318

Analysis of the 4050-A. group of the C_3 molecule. L. Gausset, G. Herzberg, A. Lagerqvist, and B. Rosen (Natl. Res. Council, Ottawa, Can.). *Astrophys. J.* 142(1), 45–76(1965)(Eng). The C_3 bands at 4050 A., prominent in the spectra of comets, were obtained at high dispersion both in absorption and in fluorescence in the flash photolysis of CH_2N_2, in a multireflecting tube, at pressures of 0.005 to 0.040 mm., and mixed with N in the ratio 1:100. The bands represent transitions between vibronic levels in the lower $^1\Sigma_g^+$ state and the upper $^1\Pi_g$ state. The results of the analysis agree with those predicted theoretically for a mol. with 3 equal nuclei lying on a straight line. The similarity in the distribution of intensity in these bands in comets and in lab. sources is attributed to the near equality of the internuclear distances in the upper and lower states. Details of the measurements and analysis are listed in the tables.

C. C. Kiess

спектр, м. п., осн. сост.

C.A. 1965. 63. 13
17319ab

1 Д165. *K*-удвоение в линейных молекулах в состояниях $^1\Pi$. Johns J. W. C. *K*-type doubling of linear molecules in $^1\Pi$ electronic states. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 15, № 4, 473—482 (англ.)

Вращательные уровни, соответствующие колебательным уровням с симметрией П в электронных состояниях П линейных молекул, претерпевают удвоение. Оно обусловлено взаимодействиями вращения с колебаниями и электронным движением. Оба типа взаимодействий могут рассматриваться отдельно. Получены ф-лы для поправок к энергии, соответствующих обоим взаимодействиям. Вычисление выполнено во втором приближении теории возмущений. Поправки выражены через частоты колебаний, квантовые числа (вращательные и колебательные) и постоянные Кориолиса. Численные расчеты выполнены для молекулы C_3, для которой определены значения параметра удвоения при различных значениях колебательных квантовых чисел. Знаки этого параметра совпадают со знаками опытных его значений. Однако в абс. значениях имеются большие расхождения.

М. Ковнер

С3

М.н

(114)

опытные

1965

9.1966.19

C_3

1965

58996d C_3 and transition-metal oxide molecules. William Weltner, Jr. (Union Carbide Res. Inst., Tarrytown, N.Y.). NASA Accession No. N65-31322, Rept. No. AD 467028. Avail. CFSTI $3.00 cy, 115–18(1965)(Eng). An unsuccessful attempt to observe another electronic transition of $C_3(^1\Sigma_u^+ . X^1\Sigma_g^+)$ in a Ne matrix at 4°K. is described; the spectrum was measured out to the edge of the vacuum-uv region at 1900 A. By reasoning from the ground states of TiO and TaO, M.O. may be constructed which allow a prediction of the ground states of the transition-metal diat. oxides of Groups IIIB to VIB of the periodic table. A predicted $^1\Sigma^+$ ground state has been confirmed for ZrO by matrix-isolation work. WO, WO_2, and the larger tungsten oxide mols. are briefly discussed. From *Sci. Tech. Aerospace Rept.* 3(20), 3390(1965). TCSL

+4

C.A. 1967. 67. 12

1966

C_3

спектр

Spectrum of C_3. L. Gausset (Univ. Liege, Belg.). *Mem. Soc. Roy. Sci. Liege, Collection in-8*^{0} 12(1), 413–16(1966)(Fr). Fluorescence is used to provide the cometary emissions of C_3. The initial Boltzmann distribution, the method of cycles, and stationary states are used to establish the theoretical outline of the principal band. Parameters have been found for L, the no. of mechanisms necessary to attain equil., R, the parameter of the stationary states method, and N, the no. of levels with population $\geqq 10^{-4}$. V. Sutula

C.A. 1966. 65. 10
14642h

Обзор

1966

11 Д81. Спектры и строение трехатомных свободных радикалов. Герцберг Г. «Ж. Всес. хим. о-ва им. Д. И. Менделеева», 1966, 11, № 2, 146—153

Обзор. Дается краткое изложение спектроскопич. работ, в которых изучались трехатомные свободные радикалы, в том числе последних неопубликованных работ лаборатории проф. Г. Герцберга (Национальный научный совет Канады). Из приведенного обзора видно, что в течение последних 15 лет получены и изучены УФ-спектры довольно значительного числа трехатомных радикалов. Некоторые из этих радикалов давно известны химикам, но участие в химич. рекациях таких радикалов, как C_3, NCN, BO_2, ранее даже не предполагалось. Кроме того, в ряде случаев, из которых особо надо отметить CH_2, установлено, что как триплетные, так и синглетные нижние состояния весьма существенны.

С3

ф. 1966. 112

C_3

BP – M945 – IV 1966

Molecular constants and thermodynamic functions of some linear symmetrical molecules. G. Nagarajan (Oklahoma State Univ., Stillwater). *Acta Phys. Austriaca* 21(4), 355–65(1966) (Eng). A brief vibrational analysis including fundamental frequencies and internuclear distances of C_3, Si_3, Ge_3, and XeF_2 mols. possessing a linear sym. structure is given. Mean-sq. amplitude quantities, generalized mean-sq. amplitudes, and mean amplitudes of vibration for the bonded and nonbonded atom pairs were calcd. by following Cyvin's method (*CA* 54, 5235*d*) but with different notations. The values are reported at the temps. T = 0, 298, 500°K. The numerical values of the Bastiansen-Morino shrinkage effect are given at these temps. The mol. thermodynamic functions, such as heat content, free energy, entropy, and heat capacity, of Si_3, Ge_3, and XeF_2 mols. (Pitzer and Clementi, *CA* 54, 2849*b*) were calcd. at 100–2000°K. on the basis of a rigid rotator, harmonic oscillator model. 50 references. G. F. Goethel

+3 ws

C.A. 1966. 65. 4
4679 cf

M-1200-IV 1966

C_3

Si_3

XeF_2

Spectroscopic studies of molecular constants in some polyatomic molecules. G. Nagarajan (Oklahoma State Univ., Stillwater). *Z. Naturforsch.*, *a* 21(3), 244–51(1966)(Eng). Force consts. have been evaluated by the Wilson group theoretical method (*CA* 35, 1280[5]) for various ij_3 mols. possessing a planar trigonal symmetry. Mean sq. amplitude quantities and mean amplitudes of vibration for the bonded as well as nonbonded atom pairs have been computed at $T = 0°K.$ and $T = 298°K.$ for C_3, Si_3, and XeF_2 by the Cyvin method (Cyvin, *CA* 57, 7927*g*). The molar thermodynamic functions have been calcd. from spectroscopic data for Si_3 and XeF_2 on the basis of a rigid rotator, harmonic oscillator model. Bastiansen-Morino shrinkage effects (C., *CA* 57, 14445*d*) have been calcd. for various linear asym. *ijk*, linear sym. ij_2, and tetrahedral ij_4 mols. at $T = 0$ and $T = 298°K.$ F. Schossberger

+2

C.A. 1966. 65. 7
9923e

C_3

эксперим. значения частот

силовые конст.

7 Б28. Корреляция электронной структуры и силовой константы изгиба в некоторых линейных молекулах. Smith Wm. Hayden, Leroi George E. Correlation of electronic structure and bending force constants in some linear molecules. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 5, 1784—1786 (англ.)

В рамках методов МО и валентных схем исследована корреляция между силовой константой изгиба и электронной структурой молекул C_3, C_3N_2, C_3O_2, C_3S_2, C_3H_4, CCN, CCO, NCN, BO_2, NCO, NNO, CO_2. Приведены эксперим. значения частот и силовых констант. Рассмотрение методом МО приводит к выводу, что основное влияние на величину силовой константы изгиба центрального атома оказывает электронная плотность на высшей занятой орбите. Таким путем удается объяснить экспериментально обнаруженный рост силовых констант изгиба для центрального атома C в ряду $C_3 \approx C_3O_2 < C_3S_2 < C_3H_4 < CO_2$.

В. Лебедев

+11

Х·1967·7

С3 Вр. 41683-IV 1966

12 Б126. **Спектроскопия паров углерода, сконденсированных в матрицах из инертных газов при 4° К. III.** Weltner William, Jr, McLeod Donald, Jr. Spectroscopy of carbon vapor condensed in rare — gas matrices at 4° K. III. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 8, 3096—3105 (англ.)

Исследованы УФ-спектры поглощения (8900—1950 А) паров углерода, сконденсированных в матрицах из Ar и Ne при 4° К. Отмечено наличие различных мест захвата в матрице. Регулируемый разогрев матрицы из Ne,

Х·1967·12

содержащей пары углерода, вызывал исчезновение множественности мест захвата для молекул C_3, что способствует более определенному отнесению колебательных переходов в системе $^1\Pi_u \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. Вплоть до 1950 А в матрице из Ne не наблюдалось перехода $^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ для C_3. В результате изучения спектра C_2 в неоновой матрице до и после разогрева до 12° К подвергается сомнению отнесение полос в области 4000—6000 А к системе Свана для C_2; предложено их отнесение к бо́льшим молекулам углерода. Полоса 2320 А в Ne отнесена к полосе (0,0) системы $d^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ для C_2. Сделан вывод, что захват матрицами C_2 в возбужденном состоянии $^3\Pi_u$ менее вероятен, чем в основном состоянии $X^1\Sigma_g^+$. Отмечено, что в матрице из Ne при добавлении 0,06—0,5% N_2 происходит р-ция с образованием CNN. В спектрах молекул C_n обнаружено много новых колебательных полос; утверждается, что молекулу C_4 лучше записывать в виде $^{\cdot}C{\equiv}C{-}C{\equiv}C^{\cdot}$. Сообщ. II см. РЖХим, 1966, 13Б128.

С. Бурейко

C_2

C_3

C_4

(ν_i)

Вр-16 83-IV

1966

5 Д208. Спектроскопическое изучение паров углерода, конденсированных в матрицах из инертных газов при 4° К. III. Weltner William Jr, McLeod Donald, Jr. Spectroscopy of carbon vapor condensed in rare-gas matrices at 4° K. III. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 8, 3096—3105 (англ.)

Исследованы УФ-спектры поглощения (8900—1950 Å) паров углерода, конденсированных в матрицах из Ar и Ne при 4° К. Отмечено наличие различных мест захвата в матрице. Регулируемый разогрев матрицы из Ne, содержащей пары углерода, вызывал исчезновение множественности мест захвата для молекул C_3, что способствует более определенному отнесению колебательных переходов в системе $^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Вплоть до 1950 Å в матрице из Ne не наблюдалось перехода $^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ для C_3. В результате изучения спектра C_2 в неоновой матрице до и после разогрева до 12° К подвергается

Ф. 1967. 5Д

V

сомнению отнесение полос в области 4000—6000 Å к системе Свана для C_2; предложено их отнесение к бо́льшим молекулам углерода. Полоса 2320 Å в Ne отнесена к полосе (0,0) системы $d^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ для C_2. Делается вывод, что захват матрицами C_2 в возбужденном состоянии $^3\Pi_u$ менее вероятен, чем в основном состоянии $X^1\Sigma_g^+$. Отмечено, что в матрице из Ne при добавлении 0,06—0,5% N_2 происходит реакция с образованием CNN. В спектрах молекул C_n обнаружено много новых колебательных полос; утверждается, что в согласии с теорией молекулу C_4 лучше записывать в виде $\cdot C{\equiv}C{-}C{\equiv}C\cdot$. Библ. 28. Ч. II см. РЖФиз, 1965, 3Д175.

С. Бурейко

C3

BP-M-1683-IV 1966

Spectroscopy of carbon vapor condensed in rare-gas matrixes at 4°K. III. William Weltner, Jr., and Donald McLeod, Jr. (Union Carbide Res. Inst., Tarrytown, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 45(8), 3096–105(1966)(Eng); cf. *CA* 60, 7589*h*. For C_3, controlled warming of Ne matrixes contg. C vapor caused the multiple sites for C_3 mols. to disappear. The assignments of vibronic transitions in the $^1\Pi_u \leftarrow X\,^1\Sigma_g^+$ system could then be made more definite by using the parameters of Gausset, *et al.* (*CA* 63, 17319*a*). Two unaccounted-for bands were attributed to transitions involving $\nu_3' \cong 840$ cm.$^{-1}$ This low value was rationalized by comparison with other similar mols. The $^1\Sigma_u^+ \leftarrow X\,^1\Sigma_g^+$ transition of C_3 in a Ne matrix was not observed in the uv out to 1950 A. For C_2, the spectrum of C–Ne matrixes, before and after warming to 12°K., indicated that the absorption bands, 4000–6000 A., are probably not the C_2 Swan system but may be due to a larger C mol. A band at 2320 A. in Ne was attributed to the (0,0) band of the Mulliken system ($^1\Sigma_u^+ \leftarrow$

+2

C.A. 1966. 65:12

17904 de

$x\,^1\Sigma_g^+$) of C_2. These and other observations indicate that the trapping of C_2 in the excited $^3\Pi_u$ state in matrixes is doubtful. CNN is formed in Ne matrixes contg. N by the reaction of C atoms in C vapor with N. The proportion of C atoms in the vapor and the formation of CNN can be enhanced by vaporization of C from thin W or Ta cells because of the formation and vaporization of the solid carbide. For C_n, carefully controlled diffusion of C mols. relatively concd. in a Ne matrix led to the appearance of many new vibrational bands. These were analyzed in terms of 2 extreme linear chain models. It is concluded, for example, that C_4 is probably best written as •C⁝C–C⁝C•, in agreement with theory. RCJQ

С 2

1967

(спектр)

23 Б104. Изучение спектров поглощения свободных радикалов в пламенах. Jessen P. F., Gaydon A. G. Study of the absorption spectra of free radicals in flames. «Combustion and Flame», 1967, **11**, № 1, 11—16 (англ.)

Для определения спектров поглощения свободных радикалов в пламенах сконструирована система с многократным (до 12 раз) отражением луча света. Изображение точечного источника с высокой яркостной т-рой (импульсной лампы) фокусируется не на поверхностях сферич. зеркал (как это делается обычно), а в зоне пламени на небольшом расстоянии a от общего центра кривизны обоих зеркал; поэтому оно мало портится неравномерностями показателя преломления и т-ры. Последующие изображения получаются попеременно в двух точках по обе стороны от центра кривизны (в них располагаются две одинаковых горелки). Число отражений (и, следова-

X · 1967 · 23

X

тельно, оптическая длина пути) зависит от a и диаметра зеркал. По спектру поглощения кислородно-ацетиленового пламени зарегистрированы следующие радикалы: в верхней части реакц. зоны в богатой смеси ($C_2H_2 : O_2 = 6 : 5$) — интенсивный электронно-колебательно-вращательный спектр C_2 с центром при 5165 А, слабая полоса C_3 при 4051,5 А (обнаружена впервые) и — в более бедной смеси — системы полос CH при 4315, 3900 и 3143 А. Поглощение C_2 и C_3 (но не CH) наблюдается также и выше реакц. зоны (внутреннего конуса), что весьма интересно с точки зрения механизма образования углерода в пламени.

Р. Васильев

C_3

спектр, м. п.

ВФ - 644 - XIV

1967

345

9 Д652. **Спектры поглощения C_3 и C_3H_2 — продуктов импульсного фотолиза диазопропина.** Merer A. J. Absorption spectra of C_3 and C_3H_2 from the flash photolysis of diazopropyne. «Canad. J. Phys.», 1967, 45, № 12, 4103—4111 (англ.)

Исследовано поглощение продуктов импульсного фотолиза диазопропина ($HC_2 \cdot CHN_2$). Спектр поглощения свободного радикала C_3 вблизи 4050 *см*$^{-1}$ ($^1\Pi_u - {}^1\Sigma_g^+$-система C_3), появляющийся спустя 40 μсек. после импуль-

Ф. 1968 · 9Д

Ⓧ

са фотовозбуждения, подобен спектру C_3, полученному при импульсном фотолизе диазометана, но значительно превосходит его по интенсивности. Проведен колебательный анализ полос, не наблюденных ранее в спектре радикала C_3. Уточнено положение уровня $\nu_2''=6$ ($l=0$) на основании частичного вращательного анализа 000—060-полосы $^1\Pi_u-\Sigma_g^+$. Определена частота вал. кол. $\nu_1''=1224{,}5$ $см^{-1}$ в основном состоянии. В области 31 000—3700 Å обнаружена новая система полос поглощения, отнесенная к свободному радикалу HCCCH в синглетном состоянии. Анализ спектра C_3H_2 невозможен вследствие чрезвычайной сложности колебательной структуры и положения коротковолн. края поглощения $^3\Pi_u-{}^1\Sigma_g^+$-системы радикала C_3. Библ. 12. А. М. М.

C3

14502y Absorption spectra of C_3 and C_3H_2 from the flash photolysis of diazopropyne. A. J. Merer (Natl. Res. Council Canada, Ottawa). *Can. J. Phys.* 45(12), 4103–11(1967)(Eng). The flash photolysis of diazopropyne HC:CCHN$_2$ provides a particularly strong absorption spectrum of the free C_3 radical. About 40 μsec. after the photolysis flash, the appearance of the $^1\Pi_u - {}^1\Sigma_g^+$ (4050 A.) system of C_3 is similar to that obtained in the flash photolysis of diazomethane by Gausset, *et al.*, though much more intense. The intensity of the spectrum has permitted a study of the *l*-type doubling effect in the ground-state level $6\nu_2$, of which the Σ_g^+ component has been found to lie at 458.2 cm.$^{-1}$ At shorter time delays (<20 μsec.) the spectrum is complicated by bands arising from the levels ν_1'' (1224.5 cm.$^{-1}$) and $2\nu_1''$ (2436.0 cm.$^{-1}$). Below 3700 A. the C_3 spectrum is overlapped by absorption bands belonging to a new free radical, which has been identified from the intensity alternation in the rotational structure as the HCCCH radical. The vibrational structure of this system is exceptionally complex, and analysis has not been possible. The bands extend to about 3100 A., but are predissocd. below 3450 A. RCCN

1967

345

VII-X-64 - 68

+1

C.A. 1968. 68. 10

II-2312 — IV 1967

C_3(мол. пост. mgp)

Strauss H.L., Thiele E.

J.Chem. Phys., 1967, 46, N7, 2473-2480.

Thermodynamics of C_3H_4 General methods for nonrigid molecules at high temperature.

RX., 1967,9E21 Est/orig.

J F.

С3

1981

Отчет „Комплексное исследование термодинамич. свойств и молекулярных постоянных", ЛГУ, Хим-фак, 1983 (годовой отчет за 1981 г.)

вертикальн-электрон-спектры

C_3

1968

47699z Synthetic profiles of C_3 cometary emissions. Denis-Gausset, L.; Sauval, A. J. (Univ. Liege, Liege, Belg.). *Bull. Soc. Roy. Sci. Liege* 1968, 37(1–2), 48–54 (Fr). By using normal resonance-fluorescence calcns., the emission band at 4050 A. was calcd. for the $^1\Pi_u - {}^1\Sigma_g^+$ electronic transition in a C_3 mol. The 3 basic calcn. methods used gave differing *P* and *R* branches for the same *Q* branch. Spectra of 2 comets and a high resoln. solar spectrum were used for assessing the results of calcn. No choice could be made among the calcd. spectra because of the inadequacy of resoln. in the observed comet spectra. 21 references.

S. Goldwasser

C.A. 1968. 69. 12

C_3^+

C_3

C_3^-

структура

11 Д135. Электронная структура C_3^+, C_3 и C_3^-. Nibler J. W., Linnett J. W. Electronic structure of C_3^+, C_3, and C_3^-. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 5, 1153—1164 (англ.) 1968

На примере молекул C_3 и ионов C_3^+ и C_3^- рассмотрен выбор единственного наилучшего набора специальных спин-орбит неспаренных электронов. В качестве базиса использованы линейные комбинации слейтеровых определителей, составленных из *P*-орбит атомов углерода. Вычислены энергии ряда низколежащих орбит C_3^+, C_3 и C_3^- и результаты сопоставлены с результатами метода МО. Показано, что метод неспаренных орбит приводит к правильному описанию электронной структуры C_3 и C_3^-, а для C_3^+ к лучшему результату приводит метод МО. Вычислено также распределение электронных спинов в C_3^+, C_3 и C_3^- для различных базисных ф-ций. Развита процедура вычисления атомных интегралов, содержащих неспаренные орбиты и рассмотрено приведение векового ур-ния по симметрии М. Р. Алиев

ф. 1968. 11Д

C_3^+

1968

1 Б63. Электронное строение C_3^+, C_3 и C_3^-. Nibler J. W., Linnett J. W. Electronic structure of C_3^+, C_3, and C_3^-. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 5, 1153—1164 (англ.)

Показано, что волновые функции, построенные из МО и неспаренных пространственных орбиталей (НПО), дают наилучшее простое описание электронного строения C_3^+, C_3 и C_3^-. Рассмотрена задача наилучшего нахождения простых однозначных спиновых собственных функций, построенных из НПО. Исследованы два метода: в первом наилучшее спиновое распределение выбирается с помощью оператора спинового проектирования, тогда как во втором полностью исключаются наименее подходящие спиновые распределения. Рассмотрение результатов соотв-щих расчетов показывает, что второй метод является в общем случае более успешным.

Резюме

Х. 1969. 1

C_3^+, C_3, C_3^-

1968

(Wb. deep, pacref)

117246e Electronic structure of C_3^+, C_3, and C_3^-. J. W. Nibler and J. W. Linnett (Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 64(Pt. 5), 1153–64(1968)(Eng). Calcns. for C_3^+, C_3, and C_3^- show that M.O. and N.P.S.O. (nonpaired spatial orbital) functions provide the best simple description of the electronic structure of these species. The problem of the best a priori method of generating simple, unique N.P.S.O. spin eigenfunctions has been considered. Two methods were investigated; the first emphasizes the most favorable spin distribution by means of a spin projection operator, while the second excludes completely the least favorable spin distribution. In applying these methods, the double-quartet scheme permits the necessary qual. ordering of the spin distributions. A summary of all relevant N.P.S.O. calcns. done shows the exclusion method to be generally more successful. 18 references. RCTD

(+2 refs)

C.A. 1968: 68: 26

C_3

Preuss H.

Zanoschek R.

1969

D_0
γ
r_e
ν_i

J. Mol. Struct., 3 (4-5), 423.

(см. C_2H_4) III

1970

C3

Burdett J.

J. Chem. Phys., 1970,

propane.

сл. пост. 52, N 6, 2983

(Сл. CO_2) III

C_3

r_e

см. н.

строение

Dewar M.J.S. et al. 1970

Angew. Chem., 82 (18),

774.

(см. C_2) III

C_3

отчет 3589 1970

Hastie J.W. et.al.

Annual review of Phys chem, 1970, 21, 475-498

High temp chemistry...

полетрия и Di спектр в матрице

C3 Om. 18105 1971

Merzberg G.,
Spectroscopic Studies of
molecular structure,
Nobel Lecture, December
11, 1971.

M.N.

C_3

1972

9 Д208. **Частота деформационного колебания молекулы C_3.** Liskow Dean H., Bender Charles F., Schaefer Henry F., III. Bending frequency of the C_3 molecule. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 10, 5075—5080 (англ.)

(Vi)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах гауссовых ф-ций: по 4 ф-ции *s*-типа и 2 *p*-типа (базис 1), по 4*s*, 2*p* и дополнительно 1 ф-ции *d*-типа (базис 2), по 4*s*, 3*p* и 1*d* (базис 3) для каждого атома C, исследовано электронное строение молекулы C_3. Варьировался валентный угол в интервале 60°—180° и длины связей, но с сохранением симметрии C_{2v}. Для базиса 1 проведен расчет с учетом конфигурац. взаимодействия (КВ, 656 конфигураций). Приведены полные и орбитальные энергии и энергии колебательных уров-

Ф. 1972. 9Д.

ней деформац. колебаний. Обнаружено, что с базисом 1 полная энергия как ф-ция валентного угла изменяется наиболее быстро. Равновесная длина связи мало зависит от валентного угла. Базис 2 в отличие от остальных неправильно предсказывает большую стабильность изогнутой конфигурации молекулы. Базис 1 и КВ приводят к частоте деформац. колебания около 320 $см^{-1}$, что близко к таковым для родственных молекул, но значительно больше опытного значения 64 $см^{-1}$. И только базис 3 приводит к хорошему значению 69 $см^{-1}$; соответствующая потенц. кривая ангармонична. С помощью диаграмм Уолша подробно обсуждены зависимости орбитальных энергий от валентного угла и природа химич. связи в молекуле. В. Л. Лебедев

C_3

(D geop)

1972

11543v Bending frequency of the C_3 molecule. Liskow, Dean H.; Bender, Charles F.; Schaefer, Henry F., III (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(10), 5075–80 (Eng). Ab initio calcns. were made to det. a potential curve for the bending motion of C_3. The work was in part motivated by the disagreement between theoretical and exptl. values of the entropy of C_3. Three basis sets were used, with (4*s*2*p*), (4*s*2*p*1*d*), and (4*s*3*p*1*d*) centered on each C atom. Both SCF and configuration interaction (CI) (656 configurations) calcns. were carried out with the smallest basis. The CI wave functions were obtained by a method which may be viewed as an extension of the pseudonatural orbital technique of Edmiston and Krauss. By using the smallest basis, both SCF and CI calcns. yield "normal" bending frequencies, ~320 cm^{-1}. Electron correlation has little effect on the bending frequency. The larger (4*s*2*p*1*d*) and (4*s*3*p*1*d*) basis SCF calcns. yield much smaller bending frequencies, the latter being 69 cm^{-1}, in good agreement with the unusually low exptl. value of Gausset, Herzberg, Lagerqvist, and Rosen. The bending potential is predicted to be quite anharmonic. These results are discussed qual. in terms of a Walsh diagram and the importance of *d* orbitals by symmetry considerations.

C.A. 1972. 77. 2

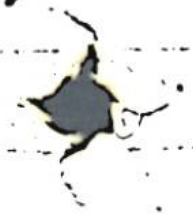
С3

Тепляков А.Н. 1972

Оптика и спектр.

1972, 33 N 4, 631.

„Влияние эф. Ренеера на значение эл. поеб. переходов



C_3

1972

21 Б56. Силовые постоянные возбужденных состояний некоторых линейных и изогнутых молекул типа XY_2. Ramaswamy K., Balasubramanian V. Excited state force constants of some linear and bent XY_2 type molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1972, 10, № 12, 853—857 (англ.)

Полуэмпирическая модель зарядов связей, предложенная Боркманом и Парром, применена для вычисления квадратичных силовых постоянных основного состояния и нек-рых возбужденных электронных состояний молекул C_3, BO_2, CO_2^+, CN_2, $HgCl_2$, $HgBr_2$, HO_2 и ClO_2. Для всех состояний, в к-рых рассматриваемые молекулы имеют линейную конфигурацию, полученные значения силовых постоянных очень близки к их эксперим. значениям. Для состояний с нелинейной конфигурацией при сохранении значений параметров модели расхождение между вычисленными и эксперим. значениями силовых постоянных устраняется, если предположить равенство значений силовой постоянной взаимодействия связей в основном и возбужденном состояниях. М. Р. Алиев

силов. пост.

Физ. хим. 1057

Х. 1973 № 21

(+7)

С3

1972

11 Д319. **Силовые постоянные возбужденных состояний некоторых линейных и изогнутых молекул типа XY_2.** Ramaswamy K., Balasubramanian V. Excited state force constants of some linear and bent XY_2 type molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1972, 10, № 12, 853—857 (англ.)

На основе метода Боркмана и др. (РЖФиз, 1969, 5 Д76) делается попытка расчета силовых постоянных для возбужденных состояний некоторых линейных и изогнутых молекул типа XY_2. Указанный полуэмпирич. метод основан на модельном представлении потенциала взаимодействия вблизи положения равновесия для двухатомных молекул, применении теоремы вириала и использования эксперим. данных. Для линейных молекул найдено хорошее согласие рассчитанных данных с экспериментальными, для изогнутых молекул согласие хуже, но положение значительно улучшается после введения дополнительного предположения о том, что продольные силовые постоянные не зависят от возбуждения молекул.

А. Зембеков

Х. 1973 N 11

Спектр. 1051

1972

C_3

Wyatt Jeffrey R. et al.

(7) "J. Phys. Chem."
1972, 76 (13), 1913-18

(см. C_2H; T)

C_3 ВФ-4664-XIV 1973

8 Д192. **Квантовая модель деформационных колебаний и термодинамические характеристики C_3.** Hansen C., Frederick, Pearson Walter E. A quantum model for bending vibrations and thermodynamic properties of C_3. «Can. J. Phys.», 1973, **51**, № 7, 751—760 (англ.; рез. франц.)

Проведен расчет энергетич. спектра дважды вырожденных деформационных колебательных мод молекулы C_3, находящейся в основном состоянии. Использован потенциал в виде прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками с добавкой в виде гармонич. возмущения, выбираемой из условия наилучшего совпадения рассчитанных низших 6 колебательных уровней v^l (v — полное колебательное число деформац. мод, l — их угловой момент) с эксперим. наблюдаемыми значениями в низшем вращательном состоянии. Связью с вращениями молекулы и l-удвоением пренебрегалось. Расстоя-

М.Н.Ei

Т.д.ф.

Ф 1973 № 8

(+1) ☒

Т.д.ф

ние между высшими колебательными уровнями систематически увеличивается ($\sim v$). Поскольку в модели достигается максимально возможное увеличение, найденная из спектра статистич. сумма принимает наименьшее возможное значение. Вклад остальных колебательных мод учитывался в гармонич. приближении; вклад вращений — в приближении жесткого ротатора. Вычислен ряд термодинамич. характеристик. Проведено сравнение результатов расчета с эксперим. данными.

Ю. П. Денисов

C3

Bp-4664-XIV 1973

153150j Quantum model for bending vibrations and thermodynamic properties of triatomic carbon. Hansen, C. Frederick; Pearson, Walter E. (Ames. Res. Cent., NASA, Moffett Field, Calif.). *Can. J. Phys.* 1973, 51(7), 751–60 (Eng). A quadratically perturbed square well potential was used to derive quantized bending mode vibrational energy levels for C_3. Coupling with rotational modes and *l* doubling was neglected for simplicity. The model was constrained to a best fit with obsd. lower vibrational levels in the lowest rotational state, and subject to this constraint, the upper vibrational levels have max. possible divergence. Thus a lower limit for the partition function and the entropy of C_3 was established; the neglected rotational coupling has little influence on these quantities because the splitting of levels is almost sym. The limits obtained support the classical model of Strauss and Thiele for the thermodn. properties of C_3 rather than the ests. listed in current JANAF Thermochem. Tables, and imply that recent graphite vapor pressure measurements made by Zavitsanos and by Wachi and Gilmartin are more correct than earlier measurements.

(Ei) Vi

T. g p.

JANAF

C.A. 1973 78 N24

(41) T g p.

C_3 Nakatsuji Hiroshi 1973

„J. Amer. Chem. Soc"

геом. 1973, 95, N2, 354–61.

структ „форма молекул в осн. и возб. состояниях"

(см $Beн_2$; III)

Kordis J.Gingerich K.A.
"J.Chem.Phys."
1973,58,III,5058-5066.

C_3

NCN

Ei

1973

11 Д326. Вращательная энергия линейной молекулы в электронном $^1\Pi$-состоянии. Петелин А. Н. «Оптика и спектроскопия», 1973, 35, № 1, 35—41

Рассматривается влияние сильного электронно-колебательного взаимодействия (эффекта Реннера) на вращательные уровни линейной молекулы. Показано, что при наличии эффекта Реннера эффективная вращательная постоянная молекулы зависит от величины электронно-колебательного взаимодействия, проекции вибронного момента на ось молекулы, а также от большего, по сравнению со случаем электронного Σ-состояния, числа постоянных ангармоничности. Вычисленные по полученным ф-лам значения эффективных вращательных постоянных для радикалов C_3 и NCN находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Резюме

Х. 1973 N 11

(+1)

1973

C_3

NCN

(Min.)

98703k Rotational energy of a linear molecule in a $^1\Pi$ electron state. Petelin, A. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1973, 35-(1), 35-41 (Russ). The effect of strong electronic-vibrational interactions (Renner effect) on the rotational levels of a linear mol. in a $^1\Pi$ state was studied. The Born-Oppenheimer method was used as an initial approxn. In the presence of the Renner effect, the effective rotational const. depends on the value of electronic-vibrational interaction, projection of the vibronic moment to the mol. axis, and the large no. of anharmonicity consts., as compared with the case of electronic Σ state. An obvious dependence of the effective rotational const. on the characteristics cited was revealed for XY_2-type mols. The values of effective rotational consts. for several electronic-vibrational states for C_3 and NCN agreed well with exptl. data.

J. Moravec

C.A. 1973 79 N16

(+1) ☒

C_3

1973

22 Б52. Вращательная энергия линейной молекулы в электронном $^1\Pi$-состоянии. Петелин А. Н. «Оптика и спектроскопия», 1973, 35, № 1, 35—41

Рассмотрено влияние сильного электронно-колебательного взаимодействия (эффект Реннера) на вращательные уровни линейной молекулы. Показано, что при наличии эффекта Реннера эффективная вращательная постоянная молекулы зависит от величины электронно-колебательного взаимодействия, проекции вибронного момента на ось молекулы, а также от большего, по сравнению со случаем электронного Σ-состояния, числа постоянных ангармоничности. Вычисленные по полученным ф-лам значения эффективных вращательных постоянных для радикалов C_3 и NCN находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Резюме

($\mathcal{E}_i$)

(+1) обиз
(+1) Energy
(+1) NCN

Ж. 1973 N 22

С3 Zahradnik R.
Carsky P.

1973
Ч-1671

электр спектр. „Collect. Czech. Chem. Commun-ns
1971, 38, N7, 1876-85

C_3 *4-5529 1974

(V:)

31774g Matrix isolation study of the vacuum ultraviolet photolysis of allene and methylacetylene. Vibrational and electronic spectra of the species C_3, C_3H, C_3H_2, and C_3H_3. Jacox, Marilyn E.; Milligan, Dophus E. (Inst. Mater. Res., Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *Chem. Phys.* 1974, 4(1), 45-61 (Eng). Upon H-discharge photolysis of normal or D-substituted allene or methylacetylene in an Ar or a N matrix at 14°K, ir

C.A. 1974. 81. N4

absorptions of all of the C_3H_n species with $n < 4$ appear. A H-deformation fundamental of C_3H_2 was identified in the far-ir. The ir studies of the partially D-substituted methylacetylenes indicate that extensive photoisomerization occurs. The obsd. products are consistent with those predicted using the previously postulated gas-phase photolysis mechanism. The uv spectrum of C_3H_2 corresponds closely with that characteristic of the gas-phase mol. Comparison of the spectrum between 1900 and 4000 Å of photolyzed methylacetylene with that of matrix-isolated graphite vapor has indicated that any new electronic transition of C_3 in this region must be weak.

C_3

1974

17 Б78. Влияние криволинейного движения на деформационное колебание с большой амплитудой [в молекуле] C_3. Hansen C., Frederick, Henderson B. ~~J.,~~ Pearson Walter E. Effects of curvilinear motion in large-amplitude bending of C_3. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 3, 754—759 (англ.)

Рассмотрена модель для деф. кол. линейной гомоядерной трехатомной молекулы с учетом криволинейности движения и проведен расчет соотв-щих колебательных уровней энергии молекулы C_3. За начало отсчета принят центр масс 0; ось параллельна линии, соединяющей концевые атомы; отклонение центрального атома вдоль оси симметрии второго порядка (y) от 0 равно $2r$, концевых — r; на оси y введена точка A, расстояние к-рой от 0 равно $3\delta r - r$, где δ — параметр, а расстояние от A до каждого концевого атома постоянно и равно параметру d. Вращение вокруг оси x задается углом φ. В координатах r, φ гамильтониан H представлен как обычный невозмущенный оператор $H_0 = p_r^2/2\mu + p\varphi^2/2\mu r^2 + V_0$ и возмущение $H' = F + V'$, $F = f(r, \delta, d)\, p_r^2/2\mu$, где p_r и p_φ — операторы импульсов, сопряженных r и φ, а $f(r, \delta, d)$ — известная отрицательно определенная функция. Оператор F характеризует

2056

Отмечен

Х. 1974 N 17

криволинейность движения. В кач-ве V_0 использован либо гармонич. Пт, либо Пт типа прямоугольной потенциальной ямы, а в кач-ве V' — квартичный Пт. Возмущение H' учитывалось в первом порядке теории возмущений. Параметры δ и d определены для молекулы C_3 из условия, чтобы вычисленные средние значения вращательной постоянной B_v в зависимости от v совпадали с эксперим. значениями: $\delta=0{,}8112$ и $d=1{,}287$ А (эксперим. равновесное расстояние С—С 1,277 А). Отмечено, что только совместный учет криволинейности движения и квартичного возмущения приводит к согласию с опытом для $v=0$—6. Для описания эксперим. поведения уровней с $v>6$, более пригодным оказывается Пт прямоугольной ямы. В целом, оператор F вызывает понижение уровней энергии, относит. величина этого понижения для всех уровней примерно одинакова ($\sim 10\%$) для v от 0 до 50. Это означает, что при обычном анализе нормальных координат подбором силовых постоянных можно эффективно учесть поправку, обусловленную криволинейностью движения, так что обычный анализ оказывается пригодным и для колебаний с большими амплитудами. Н. Ф. Степанс

C_3

1974

126225x Effects of curvilinear motion in large-amplitude bending of triatomic carbon. Hansen, C. Frederick; Henderson, B. J.; Pearson, Walter E. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(3), 754–9 (Eng). Large-amplitude bending of linear, homonuclear, triat. mols. is analyzed, with curvilinear departure of the atoms from normal coordinate bending included. The curvilinear motion is deduced from the obsd. variation of rotational const. with bending quantum no. The effect of this motion is to decrease the energy eigenvalues; energy states with lowest angular momentum are decreased most. These effects counteract the effects of a steeper than harmonic bending potential. A harmonic oscillator model of C_3 is fitted to the obsd. rotational const. within 0.6%, and the bond distance between atoms in the linear configuration of C_3 is

(M.N)

OMMUCL. 2056

C.A. 1974. 80. N2-2

1.287 Å; noticeably larger than the av. internuclear distance of the vibrational ground state, 1.277 Å. First order perturbation results, including the effect of a quartic perturbation potential, approx. duplicate the pattern of energy levels obsd. Square well bending potential wavefunctions are presumed to represent a limiting approxn. for high vibrational levels of C_3 since these provide the divergence of upper levels required to fit the measured vapor pressure of graphite. In this case, the effects of curvilinear motion are similar to those obtained for the harmonic oscillator model, although somewhat larger decreases in energy are obtained. In either case, the av. energy decrease is relatively const.—the order of 10%—over a wide range of vibrational quantum no. This means that the usual normal mode anal. can be adjusted to approx. the effects of curvilinear motion and explains why normal mode approxns. can often be extended beyond the limits of small-amplitude bending and yet give reasonably good results.

1975

C_3

11 Д113. **Параметры *K*-удвоения для линейных молекул в П-электронном состоянии.** Brown J. M. *K*-type doubling parameters for linear molecules in Π electronic states. «Mol. Spectrocs.», 1975, 56, № 1, 159—162 (англ.)

В низших порядках теории возмущений рассчитаны параметры *K*-удвоения 3-атомных молекул в П-электронном состоянии. В качестве оператора возмущения выбирается кориолисово взаимодействие, включающее операторы углового момента электрона и колебательного углового момента. Расчет сравнивается с экспериментом для состояния $A^1\Pi_u$ молекулы C_3.

Е. И. Дашевская

(м, н)

Ф. 1975 N 11 (+1) теор. спект. (расчет мн. ат. мол.

Cs^+

Chaikovskii E.F. 1975
et al

масспектр.
испарен.

Teplofiz. Vys. Temp.,
1975, 13(6), 1300-1

См C^+ ; III)

1975

Cradock S., Hinchcliffe A.J.
Matrix isolation.
A technique for the study of reactive inorganic species.

спектр в матрице

Cambridge University Press, 1975

C_3

TS-11470 1975

84: 67328r The vibrational spectrum of triatomic carbon in the 5-micron region. Treffers, Richard R.; Gilra, Daya P. (Dep. Astron., Univ. California, Berkeley, Calif.). *Astrophys. J.* 1975, 202(3, Pt. 1), 839-43 (Eng). A band near 5 μ was found in the emission from a C tube furnace at 3100°K. It is a broad unresolved feature centered near 1850 cm^{-1} and is ~370 cm^{-1} wide (full width half max.). It is shown to be the ν_3(asymmetric stretch)rotation-vibration band of C_3. A second band at 3200 cm^{-1} is present but weaker; it is possibly consistent with the combination band $\nu_1 + \nu_3$. These bands may be opacity sources in cool carbon stars.

(ν_3)

C.A. 1976. 84 #10

C_3 *Ч4-10061 1975

(М.М)

[illegible]2t C_3 radical. Theoretical study of the electronic spectrum of C_3 via the equations of motion method. Williams, Geoffrey R. J. (Res. Sch. Chem., Aust. Natl. Univ., Canberra, Aust.). *Chem. Phys. Lett.* 1975, 33(3), 582–4 (Eng). The excited states of the C_3 radical were studied by using the equations of motion method. This study confirms the exptl. assignments of the 2 lowest energy excitations obsd. for this radical and suggests an assignment for 2 other weak transitions that have been detected for this system. The expected $^1\Sigma_u^+ \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$ transition is predicted to lie at an energy of 7.68 eV and to have an oscillator strength of 0.92.

ВФ-6412-XIV

C.A. 1975, 83 N 14

C_3 Ж4-10061 1975

3 Б66. Радикал C_3. Теоретическое исследование электронного спектра C_3 с помощью метода уравнений движения. Williams Geoffrey R. J. The C_3 radical: a theoretical study of the electronic spectrum of C_3 via the equations of motion method. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 33, № 3, 582—584 (англ.)

Методом ур-ний движения в базисе сгруппированных гауссовых функций (типа 4—31 ГФ) рассчитан электронный спектр молекулы C_3 с геометрией, отвечающей эксперим. геометрии основного состояния $^1\Sigma_g^+$. Полу-

Электр. спектр.

[XIII]

Вр-6412

X/1976 N 3

чены вертикальные энергии возбуждения ΔE и силы осцилляторов f для 15 возбужденных состояний. Нижнему из возбужденных синглетных состояний отвечает $\Delta E=3{,}63$ эв, что согласуется с энергией единственного экспериментально наблюдавшегося в газовой фазе перехода $^1\Pi_u—^1\Sigma_g^+$ (3,06 эв). Спектр фосфоресценции C_3 при изоляции в матрице (2,12 эв) может быть приписан переходу из нижнего триплетного состояния $^3\Pi_u$, для к-рого $\Delta E=1{,}73$ эв. Расчет предсказывает существование перехода $^1\Sigma_u^+—^1\Sigma_g^+$ с $\Delta E=7{,}68$ эв и $f=0{,}92$ (эксперим. измерения выполнены в области энергий, не превышающих 6,4 эв). Результаты расчета позволяют также приписать две слабые полосы при 2812 А (4,41 эв) и 2320 А (5,34 эв) запрещенным переходам $^1\Delta_u—^1\Sigma_g^+$ ($\Delta E=4{,}18$ эв) и $^1\Pi_g—^1\Sigma_g^+$ ($\Delta E=5{,}02$ эв). Оценка потенциала ионизации C_3 на основании теоремы Купменса дала значение 12,7 эв. А. В. Абраменков

*45-1006 f 1975

C_3

Вр-6412-ХУК

м.п. гайтер

2 Д146. Радикал C_3; теоретическое исследование электронного спектра C_3 методом уравнений движения. Williams Geoffrey R. J. The C_3 radical: a theoretical study of the electronic spectrum of C_3 via the equations of motion method. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 33, № 3, 582—584 (англ.)

Энергии E возбужденных состояний радикала C_3 и силы осцилляторов f переходов в эти состояния вычислены методом ур-ний движения. Под ними подразумеваются (РЖФиз, 1968, 7В73) вариационные ур-ния для операторов, проводящих волн. ф-цию основного состояния в волн. ф-ции соответствующих возбужденных. Расчет выполнен при эксперим. геометрии молекулы в базисе СТО-4-31 Г. Рассмотрены все 52 однократных возбуждения с четырех верхних заполненных

емы

Ф 1976 N2

МО на 13 нижних вакантных, причем влияние двукратных возбуждений учитывалось методом теории возмущений. Из полученных переходов отмечены следующие. Переход $^1\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma^+_g$, с $E=3{,}63$ эв, разрешенный с $f=0{,}13$, близок к полосе 3,06 эв, наблюденной в газовой фазе. Переход $^3\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma^+_g$, запрещенный по спину, с $E=1{,}73$ эв, близок к полосе фосфоресценции при 2,12 эв на матрице при низкой т-ре. Эту полосу уже относили предположительно к этому же переходу, полагая, что он частично разрешен из-за подмешивания упоминавшегося перехода при 3,63 эв вследствие спин-орбитального взаимодействия. Наблюдаемые слабые полосы при 4,41 и 5,34 эв сопоставляются с полученными здесь переходами $^1\Delta_u \leftarrow {}^1\Sigma^+_g$ и $^1\Pi_g \leftarrow {}^1\Sigma_g$ соответственно с $E=4{,}18$ и 5,02 эв, запрещенными дипольно и проявляющимися, по-видимому, вследствие вибронных взаимодействий. За пределами экспериментально исследованного интервала (т. е. при $E>6{,}4$ эв) предсказан сильный ($f=0{,}92$) разрешенный переход $^1\Sigma_u^+ \rightarrow {}^1\Sigma_g^+$ с $E=7{,}68$ эв. Ю. Е. Эйзнер

Gilra Daya P. Spectra of N-type carbon stars and some related laboratory spectroscopy.

"Mém. Soc. roy. sci. Liège", 1976, 9, 77-81. Discuss., 83 (англ.)

С3 1976

Чаркин О.П. и др.

Ж. неорг. хим. 1976. 21, N 8. 2022-9.

(расчет. эл. стр.)

(см. Ветг) III

С3 монография 1976

Ramsay D. A.

Электр. „Spectrosc. Excited State"
спектр. New York – London, 1976,
47-83 (англ)

(см CO_2; III)

C_3 Vernardakis T., Hoch M. 1976

Pap. - London. Int. Conf.
испарение Carbon Graphite, 4th 1974,
графита (Pub. 1976), 536-42 (Eng.)
и углерода Soc. Chem. Ind.; London. Engl.
масс спектр.

(см. C) I

C_3

H_2C_2O

CO_2

1977

23 Б52. Локализованные молекулярные орбитали для кумуленов. Трехцентровые связи, дробные связи и угловые силовые постоянные. Brown Leo D., Lipscomb William N. Localized molecular orbitals for cumulenes. Three-center bonds, fractional bonds, and bending force constants. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 2, 3968—3979 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП в приближении частичного сохранения двухатомного дифференциального перекрывания в миним. базисе ОСТ рассчитаны МО соединений C_kO_2 (k=1, 3, 5, 7), C_k (k=3, 5, 7), H_2C_kO (k=1, 2, 4, 6) и $H_2C_kH_2$ (k=2, 3, 5, 7) и локализованы затем по методу Бойса. Для трех молекул: C_3, H_2C_2O и угловой конформации CO_2, выполнен точный неэмпирич. расчет с последующей локализацией МО по Эдмистону — Рюденбергу. Оба критерия локализации дали почти идентичные результаты для C_3 и CO_2 ($\angle OCO$=125°), но различные для H_2C_2O. Для молекул

Силов. пост. в. мех. расчет.

+2

Х-1977 №23

$H_2C_kH_2$ и H_2C_kO получены локализованные двойные связи С—С, связь С—О является промежуточной между двойной и тройной. В случае молекул C_k и C_kO_2 локализация дает скорее трехцентровые С—С—С связи, чем двойные кумилированные, часть связей С—С и связи С—О имеют дробный характер, являясь промежуточными между двойными и тройными связями. Более простая и удобная схема локализованных МО получается при раздельной локализации σ- и π-орбиталей. Приведены индексы связей, валентности и заряды атомов и силовые константы (k) угловых колебаний. Предложена след. корреляция между величинами k и зарядами атомов: малые значения k имеют колебания фрагментов, в вершине угла к-рых находится атом со значит. отриц. зарядом (фрагменты трехцентровых связей) большие значения k отвечают колебаниям, изгибающим фрагмент с положительно заряженным атомом в вершине (фрагменты с дробными связями).

А. Клягина

C_3^+ отмечен 5771 1977

(J)

Huntress W.T.,Jr.
Astrophys. J.Suppl. Ser.,
1977, 33, (4),495-514.

(см. H^+; III)

C3

1977

87: 191568v **Shock tube measurements of the optical absorption of triatomic carbon.** Jones, Jim J. (Langley Res. Cent., NASA, Langley Station, Va.). *NASA Tech. Memo.* 1977, NASA-TM-X-74025, 40 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Sci. Tech. Aerosp. Rep.* 1977, 15(18), Abstr. No. N77-27908. The spectral absorption of C_3 was measured in a shock tube using a test gas mixt. of acetylene dild. with Ar. The absorption of a pulsed Xe light source was measured by means of 8 photomultiplier channels to a spectrograph and an accompanying drum camera. The postshock test gas temp. and pressure were varied over the range 3300-4300 K and 0.36 to 2.13 atms., resp. The results showed appreciable absorption from C_3 for the wavelength range 300-540 nanometers. The computed electronic oscillator strength varied from 0.12 to 0.06 as a function of temp.

Cross reference. C 4, B; from

C.A. 1977, 87, No 4

С3 отпуск 5757 1977

(Ае)

Ионо Ж.Р.

Ж. Алгор. Вычл. Мат.,

1977, 22, (17), 5557-70.

C_3

1977

3 Б71. Расчет методом конфигурационного взаимодействия потенциальных кривых молекулы C_3 в основном и низших Π_u-состояниях. Peric-Radic J., Römelt J., Peyerimhoff S. D., Buenker R. J. Configuration interaction calculation of the potential curves for the C_3 molecule in its ground and lowest-lying Π_u states. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 2, 344—350 (англ.)

Вблизи равновесных геометрич. конфигураций рассчитаны потенциальные поверхности и частоты колебаний основного $^1\Sigma_g^+$ и возбужденных $^{1,3}\Pi_u$-состояний радикала C_3. Использован базисный набор двухэкспонентных сгруппированных гауссовых функций *s*- и *p*-типа, дополненный поляризац. связевыми функциями *s*- и *p*-типа, центрированными на связях C—C. Вычисления проведены в рамках процедур ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ), причем в последнем случае в расчет включались конфигурации одно- и двукратно возбужденные относительно выбранного исходного набора конфигураций сравнения. Найдено, что во всех трех состояниях минимуму энергии отвечают

Химия горения

Х, 1978, N3

линейные симм. конфигурации. Полученные методом КВ равновесные расстояния между соседними атомами углерода составляют 1,308; 1,311 и 1,317 Å для состояний $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_u$ и $^1\Pi_u$, соотв., тогда как аналогичные величины, полученные методом ССП, равны 1,285; 1,288 и 1,295 Å. Отмечено, что для основного состояния эксперим. данные (1,277 и 1,287 Å) ближе к хартри-фоковскому значению. Однако энергия возбуждения $^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^3\Pi_u$ (3,06 эв), рассчитанная в рамках процедуры КВ, практически точно совпадает с эксперим. величиной, в то время как метод ССП приводит к ошибке порядка 1,5 эв. На основе результатов вычислений наблюдаемая в спектре полоса 5900 Å отнесена к электронному переходу $^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^3\Pi_u$. Для рассмотренных переходов проведены также расчеты сил осцилляторов и факторов Франка — Кондона. А. В. Немухин

стоти
ед.

C_3

1977

2 Д106. Потенциальные кривые основного и низколежащих Π_u-состояний молекулы C_3, вычисленные методом конфигурационного взаимодействия. Perić-Radić J., Römelt J., Peyerimhoff S. D., Buenker R. J. Configuration interaction calculation of the potential curves for the C_3 molecule in its ground and lowest-lying Π_u states. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 2, 344—350 (англ.)

Методом ССП и КВ выполнен неэмпирич. расчет частот симметричных и антисимметричных валентных колебаний и симметричных деформац. колебаний молекулы C_3 в основном $^1\Sigma_g{}^+$ и двух первых $^1\Pi_u$ и $^3\Pi_u$ возбужденных состояниях. Базис на атоме C состоял из сгруппированных гауссовых ф-ций (4*s*, 2*p*), полученных с помощью разложения Даннинга, с включением поляризующих *s*- и *p*-ф-ций, центрированных в середине C—C-связи. Экспоненты $\alpha(s)$ и $\alpha(p)$ этих ф-ций оптимизированы по ССП расчетам рассматриваемых состояний и равны 1,25 и 0,7 соответственно. В вековом ур-нии учтены все доминирующие однократно и двукратно возбужденные конфигурации. Вклад остальных конфигураций учитывался с помощью экстраполяции.

Ф. 1978 № 2

Во всех трех состояниях молекула обнаруживает тенденцию к сохранению линейной симметрии (частоты деформац. колебаний малы). Найдено, что частоты валентных колебаний в основном и возбужденном состояниях мало отличаются, что связано с небольшим увеличением равновесной длины связи в возбужденном состоянии. С помощью частот колебаний, рассчитанных методом КВ, получены энергии возбуждения $^1\Pi_u$- и $^3\Pi_u$-состояний, составившие 3,06 и 2,04 эв соответственно. Энергия возбуждения состояния $^1\Pi_u$ хорошо согласуется с началом полосы (000—000) в спектре C_3 (4049,8 Å или 3,03 эв). Наличие серии линий при частоте 5900 Å (2,10 эв) связывается с переходом в состояние $^3\Pi_u$. Рассчитаны также равновесные расстояния между атомами углерода, время жизни состояния $^1\Pi_u$ и факторы Франка—Кондона для перехода в это состояние. Подробно обсуждается различие результатов в методах ССП и КВ, проводится сравнение с экспериментом и результатами других авторов.

А. В. Гольцов

C3

1977

(см.)

87: 174909q **Configuration interaction calculation of the potential curves for the triatomic carbon molecule in its ground and lowest-lying Π_u states.** Peric-Radic, J.; Roemelt, J.; Peyerimhoff, S. D.; Buenker, R. J. (Inst. Phys. Chem., Univ. Bonn, Bonn, Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 50(2), 344-50 (Eng). Ab initio SCF and CI calcns. are reported for the C_3 mol. using a basis set of double-zeta plus polarization quality. Potential curves are obtained for the sym. stretch and bending and antisym. stretch vibrational coordinates for the ground and $3\sigma_u \rightarrow 1\pi_g$ $^{3,1}\Pi_u$ excited states of this system in order to calc. the intensity distributions for the assocd. electronic transitions. The calcd. T_0 value for the $^1\Pi_u \leftarrow \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ transition of 3.03 eV is in quite good agreement with the location of the origin of the 4050-Å band system in C_3, confirming its previous assignment to this electronic transition; the lifetime of the $^1\Pi_u$ upper state is also obtained in the CI treatment. A value of 2.04 eV is calcd. for the corresponding $^3\Pi_u \leftarrow \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ origin, which result in turn suggests that the weak feature starting at 5900 Å should be assigned thereto.

C.A. 1977. 87. N 22

C3

1977

5 Д257. Высокотемпературные и межзвездные молекулы. Weltner William Jr. High-temperature and interstellar molecules. «Int. Conf. Matrix Isol. Spectroscopy. Diskussions tag. Dtsch. Bunsen Ges. Phys. Chem. West — Berlin, 1977. Extended abstr.» Berlin, s. a., 164—169 (англ.)

спектроск. молекул

Рассмотрены достоинства метода матричной изоляции для исследования тугоплавких соединений. По спектрам TiO в матрицах в УФ-, видимой и ИК-областях установлено основное электронное состояние этой молекулы $^3\Delta$, уточнены теоретич. расчеты ее орбиталей, а по лазерным исследованиям обнаружено 2 нижних синглетных состояния. Упомянуты работы по изучению гидридов, карбидов и нитридов переходных металлов в матрицах. Приведены результаты исследования углеродных молекул C_2, C_3 и C_4:, карбидов кремния и молекул Si_2 и B_2. Описаны результаты исследования с помощью матричной техники HNC и C_2H, обнаруженных в межзвездной среде. Библ. 37. М. Тонков

Ф, 878115

1978

С3

12 Д850. Процессы релаксации изолированных в матрице молекул C_3. Bondybey V. E., English J. H. Relaxation processes in matrix isolated C_3. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 10, 4641—4643 (англ.)

Получены спектры возбуждения и испускания молекул C_3, изолированных в Ar- и Ne-матрицах при т-ре 4° K. Молекулы C_3 получали в результате фотолиза ($\lambda = 1216$ Å) аллена, осажденного на охлаждаемое Pt-зеркало. Типичные конц-ии аллена в матрицах составляли 1 : 2000. Спектры возбуждались лазером на красителе. В результате анализа спектров возбуждения C_3 (24 600—27 600 см$^{-1}$) и спектров испускания (16 400—24 700 см$^{-1}$) излучение молекулы C_3 в области ~17 000 см$^{-1}$ приписано переходу $a^3\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Показано, что колебательная релаксация в состоянии $A^1\Pi_u$ происходит очень быстро. Обсуждено влияние окружения на характер процессов релаксации молекул C_3. Библ. 19.

спектры излучен. и возбужд.

Ф-1978, N12

C3

1978

релаксац. в матрице

89: 67948w Relaxation processes in matrix isolated triatomic carbon. Bondybey, V. E.; English, J. H. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(10), 4641–3 (Eng). The low value of the bending frequency ν_2 in the upper $A^1\Pi$ state leads to efficient vibrational relaxation. The (0,0,0) level of this state populates by efficient intersystem crossing a lower lying triplet state. The vibrational ground state levels involving excitation in the low frequency (~65 cm^{-1}) ν_2 fundamental exhibit severe lifetime broadening due to strong mixing with the lattice modes. The excited ground state levels involving only the stretching frequencies are, on the other hand, sharp.

C. A. 1978, 89, N8

C_3

BO_2

1978

22 Б82. **Применение функции Грина к исследованию химических возбуждений.** Goud Slacha, Balasubramanian V., Gupta B. K. Green's function application to chemical perturbation studies. «Proc. Indian Acad. Sci.», 1978, A87, № 10, 353—358 (англ.)

Метод функции Грина в формулировке Де Веймса — Вулфрема использован для расчетов изменений силового поля ΔF при переходе от одной молекулы к другой для след. пар молекул: XY_2—ZY_2 и XY_2—XZ_2, причем XY_2, ZY_2 и XZ_2 суть линейные трехатомные молекулы, различающиеся в каждой паре по определенному типу «хим. возмущения»: либо центральным атомом, либо концевыми атомами, либо типом электронного состояния для одной и той же молекулы. При расчетах взяты данные для молекул C_3, BO_2, CO_2^+, CN_2, $HgCl_2$, $HgBr_2$ и CO_2, причем для первых четырех из них — по нескольким электронным состояниям. Получено хорошее согласие между ΔF вычисленными по использованной методике и по разности силовых полей соотв-щих молекул.

Н. Степанов

сил. пост.

(+6)

Х. 1979, 1Д22

C_3 оттиск 6870 1978

расчет Ei 4.11 !

2 Б39. Расчеты неэмпирическим методом МОД КВ электронного спектра радикала C_3. Römelt Joachim, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. Ab initio MRD CI calculations for the electron spectrum of the C_3 radical. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 58, № 1, 1—7 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия наиболее существенных моно- и дважды возбужденный конфигураций рассчитан электронный спектр поглощения радикала C_3 и геометрия его нижних возбужденных состояний. Использовано два биэкспоненциальных гауссовых базиса с дополнительным включением в расчет поляризац. функций, всего 42 и 56 сгруппированных гауссовых функций. Для учета КВ использован многоконфигурац. метод для отобранных

Х. 1979 N 2

детерминантов (МОД КВ). Показано, что электронная конфигурация основного состояния $C_3 \ldots 4\sigma_g^2 3\sigma_u^2 1\pi_u^4 1\pi_g^0$. Нижними возбужденными состояниями являются (в скобках приведены эксперим. величины) $^3\Pi_u$ 2,11 (2,10) эв и $^1\Pi_u$ 3,16 (3,06) эв, к-рые соотв-вуют переходу $3\sigma_u \rightarrow 1\Pi_g$. Выше лежат состояния $^3\Pi_g$ и $^1\Pi_g$ 2,82—2,92 и 4,17 эв, соотв-щие переходы $4\sigma_g \rightarrow 1\Pi_g$. Все состояния, соотв-щие переходу $1\Pi_u \rightarrow 1\Pi_g$ лежат в области 4 эв за исключением $^1\Sigma_u^+$ 8,13 эв, их порядок $^3\Sigma_u^+$, $^3\Delta_u$, $^3\Sigma_u^-$, $^1\Sigma_u^-$, $^1\Delta_u$ и $^1\Sigma_u^+$. Ридберговские переходы $1\Pi_u \rightarrow 3s$ имеют энергии выше 9 эв. Анализируются формы потенциальных кривых для основного и возбужденного $(1\Pi_u \rightarrow 1\Pi_g)\,^1\Sigma_u^+$ состояний.

К. Я. Бурштейн

C_3 оптич 6870 1978

2 Д132. **Неэмпирические расчеты методом МРД КВ электронного спектра радикала C_3.** Römelt Joachim, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. Ab initio MRD CI calculations for the electron spectrum of the C_3 radical. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 58, № 1, 1—7 (англ.)

Метод конфигурационного взаимодействия (КВ) применен для исследования низколежащих ридберговых электронных состояний, а также состояний, возникающих при возбуждении электронов занятых орбиталей $4\sigma_g$ и $1\pi_u$ на орбитали π^*-типа в радикале C_3. Использованный базис сгруппированных гауссовых ф-ций имитировал двухэкспонентный базис слэтеровских орбиталей с включением (в качестве поляризационных) ф-ций s- и p-типов, центрированных на серединах связей C—C.

Ф. 1979-2

При расчете учитывались одно- и дваждывозбужденные конфигурации с последующей экстраполяцией результатов на результаты полного учета КВ в данном базисе. Получены энергии вертикальных переходов из основного электронного состояния $X^1\Sigma_g^+$ линейной молекулы в синглетные и триплетные состояния типов Σ, π и Δ, а также рассчитаны вероятности дипольного перехода $^1\Pi_u \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментом. Для состояния $^1\Sigma_u^+$ ($\pi_u \rightarrow \pi_g$), кроме того, рассчитана потенц. кривая, найдена равновесная геометрия и оценены колебательные частоты.

А. Дементьев

C3

summer 6870 1978

89: 188446q **Ab initio MRD CI calculations for the electron spectrum of the triatomic carbon radical.** Roemelt, Joachim; Peyerimhoff, Sigrid D.; Buenker, Robert J. (Lehrstuhl Theor. Chem., Univ. Bonn, Bonn, Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 58(1), 1–7 (Eng). Calcns. using the MRD CI method are reported for the ground and low lying excited states of C_3. Transitions from the $3\sigma_u$, $4\sigma_g$ and $1\pi_u$ MO's into $1\pi_g$ are considered, as well as the $1\pi_u \rightarrow 3s$ Rydberg species and the corresponding ionization, and good agreement with exptl. data is obtained when comparison is possible. Potential curves calcd. for the ground and $(1\pi_u \rightarrow 1\pi_g)\,^1\Sigma_u^+$ excited state are discussed.

потенц. кривые

C.A. 1978, 89, N22

C_3

1979

91: 201503u An experimental determination of the cross section of the Swings band system of triatomic carbon. Cooper, D. M.; Jones, J. J. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1979, 22(2), 201–8 (Eng). The spectral absorption cross section of the Swings band of C_3 was detd. from measurements behind incident shock waves that heated a gas mixt. of Ar and C_2H_2. These measurements spanned the spectral region between 300 and 540 nm, and were obtained at temps. between 3200 and 4000 K. An electronic oscillator strength of 0.033 was deduced from the measurements.

nonsteady. сечение

C.A. 1979, 91, n24

1979

C_3

4 Б125. Экспериментальное определение сечения поглощения в полосе Свинга системы C_3. Cooper D. M., Jones J. J. An experimental determination of the cross section of the Swings band system of C_3. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1979, 22, № 2, 201—208 (англ.)

сечение поглощения.

Экспериментально определены абс. сечения поглощения в полосе Свинга системы C_3 в диапазоне т-р 3200—4000° К из измерений по нагреву газовой смеси аргона и ацетилена ударной волной (метод ударной трубы) в спектральном диапазоне 300—540 нм. Структура, наблюдающаяся в зависимости величины спектральных сечений поглощения от длины волны, обусловлена колебательными переходами. На основе полученных величин сечений вычислена сила электронных осцилляторов и показано, что она слабо изменяется при изменении т-ры и составляет 0,033 для всех измерений, что находится в соответствии с экспериментально измеренными и теоретически рассчитанными величинами электронных сил осцилляторов, имеющимися в литературе. В. А. Сараев

Х:1980.N4

C3

Communication 9706

1979

Goud S. Tacha, et al.

cell. mot.
Ji

Proc. - Indian Acad. Sci.,
Sect. A 1979, 88A (Pt. 1, No. 6),
453-5.

cell. CO_2 - II

ВЦ-XIV-9478

C_3

6 Б58. Неэмпирическое исследование эффекта Реннера в молекуле C_3. Perić M., Radić-Perić J. Ab initio investigation of the Renner effect in the C_3 molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 1, 138—141

Вариационным методом в базисе волновых ф-ций двумерного гармонич. осциллятора вычислены низшие вибронные уровни энергии молекулы C_3. Неэмпирич. поверхности потенциальной энергии для компонент $^1B_1$ и $^1A_1$ электронного состояния $^1\Pi_u$ заимствовались из результата неэмпирич. расчета и представлялись в виде полинома 6-й степени по координате r деф. кол. C_3. Увеличение базиса используемых ф-ций позволило проследить сходимость положения вибронных уровней, вычисленных при отсутствии взаимодействия с валентными симм. и антисимм. колебаниями. Это обстоятельство, возможно, объясняет небольшое расхождение теории с экспериментом. Др. объяснение заключается в том, что выбранные адиабатич. потенциалы слишком быстро возрастают при увеличении r.

Е. Е. Никитин

кв. мех. расчет потенц. энергии поверхн.

Х: 1980. №6

C_3

ВР-XIV-9478

1979

92: 130418w Ab initio investigation of the Renner effect in the triatomic carbon molecule. Peric, Miljenko; Radic-Peric, Jelena (Inst. Fiz. Hem., Prirodno-Mat. Fak., 11000 Belgrade, Yugoslavia). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 67(1), 138-41 (Eng). A method is developed for the ab initio treatment of the coupling between the electronic and vibrational motions in triat. mols. It is based on a polynomial expansion of the mol. potential and the use of a variational method for calcns. of vibronic levels and wavefunctions. The results for the $^1\Pi_u$ state of the C_3 mol. are reported.

кв. мех. расчет

C.A. 1980. 92, N2

ВФ - XIV - 9478 1979

C_3

4 Д154. Неэмпирический расчет эффекта Реннера в молекуле C_3. Ab initio investigation of the Renner effect in the C_3 molecule. Perić Miljenko, Radić-Perić Jelena. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 1, 138—141 (англ.)

Предложен метод расчета энергии и волн. ф-ций для электронно-колебательных уровней трехатомных молекул с учетом эффекта Реннера. Метод основан на представлении потенц. ф-ции в виде полинома, вычислены коэф. этого полинома по способу конфигурац. взаимодействия и путем численного решения вибронного ур-ния Шредингера вариац. методом. Численный расчет энергии первых 11 колебательных уровней электронного состояния $^1\Pi$ молекулы C_3 дает удовлетворительное согласие с эксперим. данными. М. Р. Алиев

Кв. мех. расчет

Ф. 1980 № 4

C3

1979

90: 212521d **Carbon's high-temperature behavior. Comments.** Strauss, Herbert L. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, Calif.). *Science (Washington, D. C.)* **1979,** 203(4386), 1266 (Eng). A polemic concerning a paper by A. G. Whittaker (*ibid.* **1978,** 200, 763) is given concluding that the gas phase spectra provide no evidence for new forms of C_3.

Mercury.
configuration

C.A. 1979, 90 N26

C_3

1979

2 Б3. Новый подход к записи гамильтониана для нежестких молекул. Sørensen Georg Ole. A new approach to the hamiltonian of nonrigid molecules. «Top. Curr. Chem.», 1979, 82, 97—175 (англ.)

расчет молекул

Получены общие выражения для эффективных постоянных, входящих в модельные гамильтонианы, применяемые для описания колебательно-вращательных состояний молекул с большими амплитудами колебаний. Рассмотрение проведено в рамках приближения Борна Оппенгеймера. Обсужден общий подход к выбору координат, а также общий формализм решения квантовомех. задачи. Основу метода составляет непосредственное преобразование кинетич. энергии к обобщенным импульсам. В кач-ве примера изучен гамильтониан Вильсона-Говарда, рассмотрены возможные обобщения, возникающие при замене условий Эккарта условиями Сейвица. Построен общий вид гамильтониана для нежесткой молекулы, из к-рого с помощью преобразования Ван-Флека получен эффективный полужесткий вращательный оператор. Развитый подход проиллюстрирован конкретным расчетом молекулы C_3. Библ. 85.

Б. И. Жилинский

(4) метод

Х 1980, №2

1979

C3

90: 212522e Carbon's high-temperature behavior. Reply to comments. Whittaker, A. Greenville (Woodland Hills, Calif.). *Science (Washington, D. C.)* **1979**, 203(4386), 1266 (Eng). A reply to a polemic by H. L. Strauss (*ibid.* **1979**, 203, 1226).

K N 212522e

Молекул. структура

C.A. 1979 90 N26

C_3

оттиск 9861 1980

12 Д147. **Аналитические функции для потенциальных поверхностей основных состояний $C_3(X^1\Sigma_g^+)$ и $HCN(X^1\Sigma^+)$.** Analytical functions for the ground state potential surfaces of $C_3(\tilde{X}^1\Sigma_g^+)$ and $HCN(\tilde{X}^1\Sigma^+)$. Carter S., Mills I. M., Murrell J. N. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 81, № 1, 110—121 (англ.)

Получены аналитич. выражения для ф-ций потенц. энергии молекул C_3 и HCN в основных электронных состояниях $X^1\Sigma_g^+$ и $X^1\Sigma^+$, соответственно необходимые постоянные в потенц. ф-циях, включая квартичные члены, получены методом наименьших квадратов на основе экспериментально определенных геометрич. конфигураций и основных частот колебаний молекул, а также точек на потенц. поверхности, полученных в неэмпирич. расчетах. Найденные ф-ции потенц. энергии с высокой точностью воспроизводят доступные экспериментальные и теоретич. данные по геометрии, силовым постоянным в стабильных конформациях, а также данные по различным продуктам диссоциации молекул. С помощью аналитич. ф-ций потенц. энергий построены энергетич. контурные карты, отвечающие различным конформациям C_3 и HCN.

А. Дементьев

м.п; геометрия сил. пост. потенц. пов.

Ф. 1980 № 12

XIV-ряд

C3

HCN

Chemical 986f 1980

93: 34085s Analytical functions for the ground state potential surfaces of $C_3(\tilde{X}^1\Sigma_g^+)$ and hydrogen cyanide $(\tilde{X}^1\Sigma^+)$. Carter, S.; Mills, I. M.; Murrell, J. N. (Dep. Chem., Univ. Reading, Reading, Engl. RG6 2AD). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 81(1), 110-21 (Eng). Analytic functions were obtained to represent the potential energy surfaces of C_3 and HCN in their ground electronic states. These functions closely reproduce the available data on the energy, geometry, and force consts. in all stable conformations, as well as data on the various dissocn. products, and ab initio calcns. of the energy at other conformations. The form of the resulting surfaces are portrayed in various ways and discussed briefly.

nomenclat. qp-yus

1980-1984

(71) [X]

CA 1980 93 N4

Оттиск 9861 1980

C_3

HCN

1 Б64. Аналитические функции для потенциальных поверхностей основных состояний $C_3(X^1\Sigma_g+)$ и HCN-($X^1\Sigma+$). Carter S., Mills I. M., Murrell J. N. Analytical functions for the ground state potential surfaces of $C_3(X^1\Sigma_g+)$ and HCN($X^1\Sigma+$). «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 81, № 1, 110—121 (англ.)

Получено аналитич. представление поверхностей потенциальной энергии для основных электронных состояний линейных трехатомных молекул $C_3(X^1\Sigma_g+)$ и HCN-($X^1\Sigma+$). Параметры использованной функциональной формы подбираются в каждом случае так, что точно воспроизводятся энергия, геометрия и силовые постоянные стабильных конформаций, а также энергии диссоциации по всем возможным каналам. Воспроизводятся также данные неэмпирич. расчетов для специальных конфигураций, например для переходных состояний. Приведены различные графич. представления полученных поверхностей потенциальной энергии.

А. И. Маергойз

поверхн. потенц. энергии.

(+1) ☒

XIV - 1984

Х. 1981 N 1

C_3

1980

SiC
SiC_2

93: 194686s **Laboratory spectroscopy of silicon dicarbide, triatomic carbon and related species.** Gilra, D. P. (Dep. Space Res., Univ. Groningen, Groningen, Neth.). *Spectres Mol. Simples Lab. Astrophys., Commun. Colloq. Int. Astrophys., 21st* 1977 (Pub. 1980), 389 (Eng). Univ. Liege, Inst. Astrophys.: Cointe-Sclessin, Belg. In a spectral study (~2500–6500 Å and ~600–3300 cm^{-1}) of C_3 in a King furnace after the addn. of Si, the blue continuum reported by Kleman was obsd. and its wavelength dependence detd. As the temp. was increased the continuum became stronger and finally condensation of small solid crystals (identified as SiC from x-ray powder spectra) required aborting the expt. From IR spectra, however, these crystals were ruled out as the source of this blue continuum. SiC_2 vibration-rotation was seen at ~1740 cm^{-1}. Strong unidentified features were seen at 1100–1200 cm^{-1}. Electronic bands of SiC_2 were weakly obsd. It is suggested that IR spectra of Si–C species in a King furnace can lead to a detn. of vibrational-rotational consts., in particular of SiC_2.

Ч. К. Ивнер

(+1) ☒

C. A. 1980, 93 n 20

C_3^-
C_3^+

1980

6 Б88. Информация о структуре молекул из экспериментов по кулоновскому взрыву ионов C_3^- и C_3^+. Molecular structure information from the coulomb explosion of C_3^- and C_3^+ ions. Goldring G., Thieberger P., Wegner H. E. «Mol. Ions, Mol. Struct. and Interaction Matter. Proc. 38 Bat—Sheva Semin., Haifa». Bristol; New York, 1980, 53—55 (англ.)

геометр., структ.

Методом кулоновского взрыва исследована структура ионов C_3^- и C_3^+. Ионы ускоряли до энергии 4,67 МэВ, после чего их электронные оболочки обдирались в углеродной фольге (1 мг/см$^{-2}$). Ионы, образующиеся после разлета ядер многократно ионизированных обдиркой исходных ионов, регистрировали с помощью сцинциляц. экрана, установленного на входе телевизионной камеры. Телевизионное изображение фотографировали и анализировали вручную, после чего производилось преобразование в цифровую форму отобранных изображений, их передача в ЭВМ и последующий анализ с восстановлением геометрии расположения атомов в исходном ионе. Установлено, что межъядерные расстояния в ионе C_3^+ больше, чем в ионе C_3^-.

Е. Николаев

(4) ☒

Х, 1983, 19, № 6

оттиск 9844 1980

C_3

12 Д146. Орбитальный угловой момент в трехатомных молекулах. IV. Состояние $\tilde{A}^1\Pi_u$ молекулы C_3. Orbital angular momentum in triatomic molecules. IV. The $\tilde{A}^1\Pi_u$ state of C_3. Jungen Ch., Merer A. J. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 1, 95—114 (англ.)

Д

Х

С учетом недиагональных матричных элементов электронного орбитального углового момента L и квартичного члена ангармоничности в потенц. энергии изгибного колебания выполнен расчет энергии первых трех вибронных уровней электронного состояния $\tilde{A}^1\Pi_u$ молекулы C_3. Отмечено, что для получения удовлетворительного согласия с экспериментом следует учесть зависимость среднего значения $\langle L_z \rangle$ от величины валентного угла C—C—C и зависимость длины связи C—C от величины угла C—C—C. Вычислены также значения вращательной постоянной B_v для различных вибронных состояний и факторы Франка — Кондона для полос системы $A^1\Pi_u$—$X^1\Sigma_g^+$ и сопоставлены с эксперим. данными. Ч. III см. реф. 12Д145. М. Р. Алиев

Ф-1980 №12

[оттиск 9844] 1980

C_3

24 Б59. Орбитальный угловой момент трехатомных молекул. IV. $\tilde{A}^1\Pi_u$-состояние C_3. Jungen Ch., Merer A. J. Orbital angular momentum in triatomic molecules. IV. The $\tilde{A}^1\Pi_u$ state of C_3. «Mol. Phys.», 1980, **40**, № 1, 95—114 (англ.)

На примере описания $\tilde{A}^1\Pi_u$-состояния линейной молекулы C_3 продемонстрирована возможность строгого рассмотрения эффектов, связанных с угловым моментом трехатомных молекул, характеризующихся большой амплитудой деф. колебаний. В рамках развитой общей теории описание уровней проведено с точностью в ~20 раз превышающей точность описания, достигнутую ранее при использовании станд. модели малых колебаний. Отмечено, что значит. улучшение результатов достигнуто при учете зависимости $\langle L_z \rangle$ от валентного угла. Для перехода $\tilde{A}^1\Pi_u$—$\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ рассчитаны также факторы Франка — Кондона. Проведено сравнение энергетич. уровней линейной и нелинейной молекулы в орбитально вырожденном электронном состоянии. Сообщ. III см. пред. реферат. Б. И. Жилинский

Мп.

Х. 1980 N 24

1980

C_3

93: 34209k Triatomic carbon radical production, vibrational relaxation and chemical kinetics following IR photolysis of allene. Lesiecki, M. L.; Hicks, K. W.; Orenstein, A.; Guillory, W. A. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 71(1), 72-6 (Eng). IR multiple photon photolysis of allene (C_3H_4) is used to produce $C_3(^1\Sigma_g^+)$ which is probed by dye laser induced fluorescence. A kinetic anal. is presented which considers vibrational relaxation and reaction with NO and O_2 as added oxidants.

образов. из C_3H_4

CA 1980 93 N 4

1980

C_3

16 Б191. Теоретическое исследование структуры спектра поглощения C_3. Perić M., Radić-Perić J. Theoretical investigation of the structure of the C_3 absorption spectrum. «Глас. Хем. друшт. Београд», 1980, 45, № 1—2, 145 (англ.)

Проведено теор. исследование колебательной структуры электронного спектра поглощения радикала C_3 (переход Π_u—$X^1\Sigma_g{}^+$) на базе полиномиального представления потенциала для первого возбужденного электронного состояния $^1\Pi_u$ молекулы, полученного методом ab initio ССП и КВ. Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом. В. М. Ковба

спектр, м.п.

Х 1980 № 16

C_3

1980

спектр поглощ.

8 Б183. Спектральная непрозрачность трехатомного углерода, измеренная в графитовой трубчатой печи в области длин волн 280—600 нм. Snow Walter L., Wells William L. The spectral opacity of triatomic carbon measured in a graphite tube furnace over the 280 to 600 nm wavelength range. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2547—2551 (англ.)

В области 280—600 нм измерен спектр поглощения молекулы C_3 (графитовая трубчатая печь с параболическим полем т-р, т-ра центральной зоны 2720—3060 К). Приведена электронно-оптич. блок-схема установки. Результаты измерений представлены графически в виде значений $-\ln T$ (T — пропускание) при т-рах 2720, 2915, 2980, 3015 и 3060 К с интервалом 10 нм. В. М. Ковба

Х. 1981 № 8

C_3

1980

спектр поглощ.

Ф·1981 N 3

3 Д726. **Спектральное поглощение трехатомного углерода, измеренное с помощью графитовой трубчатой печи в диапазоне длин волн 280—600 нм.** The spectral opacity of triatomic carbon measured in a graphite tube furnace over the 280 to 600 nm wavelength range. Snow Walter L., Wells William L. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2547—2551 (англ.)

В спектральной области 280—600 нм измерено поглощение паров углерода при т-рах 2720—3060° К. Измерения проведены в электрич. графитовой печи, продуваемой потоком Ar. На основе полученных данных определено спектральное распределение опт.ч. плотности паров углерода, обусловленной поглощением линейных трехатомных молекул C_3. При вычислениях особое внимание обращено на корректный учет потерь света в ближней УФ-области спектра за счет рассеяния на микрочастицах с радиусом около 200 Å. Библ. 15.

С. Литке

C_3

1980

Спектр

93: 176472q The spectral opacity of triatomic carbon measured in a graphite tube furnace over the 280 to 600 nm wavelength range. Snow, Walter L.; Wells, William L. (Langley Res. Cent., NASA, Hampton, VA 23665 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(6), 2547-51 (Eng). The opacity of linear C_3 was measured in a graphite tube furnace from 280 to 600 nm. Data are presented for a max. centerline temp. range of 2720-3060 K.

C. A. 1980, 93 N 18

ССС

оттиск 12815

1981

Bohm M. C., Gleiter R.

обзор, теорий. расчет. молекул. орбиталей, геометрия

Theor. chim. acta, 1981, 59 (2), 153 - 179.

C_3

1981.

Bershikov A. G., Spiridonov V. P.

структура. анализ 3х ат. мол.

J. Mol. Structure, 1981, 75, 291-301.

C_3^0 +

1981

Goldring G., et al.

Ann. Isr. Phys. Soc.

1981, 4, 53-55.

шоч.
структ.

(см. C_3^-; III).

C_3

1981

Hartford A., et al.

спектроскоп. свободных радикалов

Electro-Opt. Syst. Des., 1981, 13, N 7, 51-54.

(см. MS ; III)

1981

C_3

S_2O

94: 129590n **Molecular constants of S_2O and C_3 molecules.** Prabhavathy, V.; Nivedita Devi, R.; Ramasamy, R.; Venkateswarlu, K. (Dep. Phys., PSGR Krishnammal Coll., Coimbatore, 641 004 India). *Curr. Sci.* 1981, 50(4), 170-2 (Eng). For S_2O and C_3, the force consts., centrifugal distortion consts., and mean square vibrational amplitudes were calcd. by using the available exptl. vibration frequencies. The free energy, enthalpy, entropy, and heat capacity of S_2O and C_3 at 300-1000 K were calcd. by using the results.

Ш, Н -

Т-дин. ф-ции

(+3) ☒

С.Х. 1981, 24, N16

$C_3(X^1\Sigma_g^+ \to {}^1\Sigma_u^+)$ в УФ.

1981

3 Б1664. **Поглощение излучения с длинами волн 135—220 нм углеродом и углеводородными радикалами в ударно нагретых ацетилене и метане.** Shinn J. L. Optical absorption of carbon and hydrocarbon species from shock heated acetylene and methane in the 135—220 NM wavelength range. «AIAA Pap.», 1981, № 1189, 6 pp., ill. (англ.)

Исследовано поглощение излучения в диапазоне длин волн 135—220 нм углеродом и радикалами, образующимися при распаде C_2H_2 и CH_4 за ударной волной. Измерения проводились за проходящей ударной волной при т-рах 3000—4400 К. Проведен расчет равновесного состава продуктов распада C_2H_2 и CH_4. При 3750± ±100 К основное поглощение происходит на C_3. При уменьшении длины волны от максимума поглощения (при 158 нм) поглощение уменьшается. Исследованные линии поглощения соответствуют переходу $X^1\Sigma_g^+ \to {}^1\Sigma_u^+$.

С. В. Хомик

Х. 1982, 19, N3.

C_3 Оттиск 11851 1981

11 Д120. Циклические структуры C_3. Cyclic C_3 structures. Whiteside Robert A., Krishnan Raghavachari, Frisch Michael J., Pople John A., Von R. Schleyer Paul. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, № 3, 547—551 (англ.)

геометр.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах гауссовых ф-ций ОСТ-3ГФ, -3-21ГФ и -6-31*ГФ (с учетом поляризационных *d*-ф-ций), а также с учетом электронной корреляции в четвертом порядке теории Мёллера—Плессета исследовано электронное строение систем C_3—C=C=C: (I) и циклических — трикарбена (II), в котором на каждом атоме C находится неподеленная электронная пара (НЭП), циклопропинилидена (III), в котором НЭП только на одном атоме C, и циклич. триплета (IV) — циклопропенилидена, в котором на каждом из формально связанных двойной связью атомов C находится по неспаренному электрону (симметрия II и IV — D_{3h} и III — C_{2v}). Приведены

Ф. 1981, 18, N11.

равновесная геометрия, энергетич. характеристики, гармонич. частоты. Во всех случаях наиболее стабильной найдена **I** с конфигурацией $(\sigma_g)^2(\sigma_u)^2(\sigma_g)^2(\sigma_u)^2(\pi_u)^4$, $^1\Sigma_g{}^+$, остальные структуры существенно менее стабильны. Структура **IV** в триплетном состоянии является локальным минимумом на поверхности потенц. энергии; **III** является седловой точкой вырожденной изомеризации **I**; энергия активации такой изомеризации оценена в 29 ккал/моль (с учетом поправки на разность энергий нулевых колебаний). Отмечено сходство поверхностей потенц. энергии для C_3 и C_3H_2.

В. Л. Лебедев

Отписк 11851 1981

C3

(кв. мех расчет)

22 Б78. **Циклические структуры** C_3. Whiteside Robert A., Krishnan Raghavachari, Frisch Michael J., Pople John A., Schleyer Paul von R. Cyclic C_3 structures. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, № 3, 547—551 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты поверхности потенциальной энергии (ППЭ) синглетного и триплетного состояний C_3; исследованы стационарные точки этих ППЭ. Предв. вычисления выполнены с использованием ОСТ—3ГФ и 3—21ГФ базисов с последующей оптимизацией геометрии на 6—31ГФ* базисе. Корреляция электронов учитывалась до 4-го порядка теории возмущений Меллера—Плессета. Силовые константы и гармонич. частоты колебаний вычислены аналитич. дифференцированием. Наиболее устойчивой на синглетной ППЭ найдена линейная структура C_3. Структура циклопропинилидена отвечает переходному состоянию вырожденной изомеризации линейной структуры (энергия активации ~29 ккал/моль). Предв. вычисления для триплет-

Х. 1981 № 22, 19 А5

ного состояния указывают на то, что линейная и цикличч. структуры имеют сравнимые энергии. Отмечена чувствительность силовых постоянных к выбору базиса. Вычисл. значения частот сравниваются с экспериментальными.

Н. А. Аникин

жны
ал-

C_3 (Ст. 15798) 1982

[illegible] vacuum UV spectrum of triatomic carbon trapped in argon at 8 K. Chang, Kok Wai; Graham, W. R. M. (Dep. Phys., Texas Christian Univ., Fort Worth, TX 76129 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(9), 4300–3 (Eng). The vacuum UV absorption spectrum to 1200 Å was obtained for the products from the evapn. of graphite at 2700°, trapped in Ar at 8 K. Based on correlations with the $^1\Pi_u$–$X^1\Sigma_g^+$ transition of C_3 in the near UV, the results of ^{13}C substitution, and other observational evidence, it is proposed that a band system originating at 1890 Å be assigned to the $^1\Sigma_u^+$–$X^1\Sigma_g^+$ transition of C_3. Vibrational anal. yields $\nu_1' \simeq 1080$, $\nu_2' \simeq 300$, and $\nu_3' \simeq 780$ cm^{-1} for the $^1\Sigma_u^+$ state.

$^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$

спектр

матрице

С. А. 1982, 97, N 26

C_3

Ат. 15798 1982

9 Б170. Вакуумный УФ-спектр C_3 изолированного в аргоне при 8 К. Vacuum UV spectrum of C_3 trapped in argon at 8 K. Chang Kok Wai, Graham W. R. M. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 9, 4300—4303 (англ.)

М. П.

Измерены спектры поглощения в УФ- и вакуумной УФ-области продуктов испарения графита (Та-ячейка, T ~2700°), изолированных в аргоновой матрице (T=8 К). Наблюдались две системы полос (одновременно исчезающие при отжиге матрицы) в области 1700—1900 А и 4102 А, отнесенные, соотв., к переходам $-X^1\Sigma_g^+$ и $^1\Pi_u-X^1\Sigma_g^+$ молекулы C_3. В системе $^1\Sigma_u^+-X^1\Sigma_g^+$ выделены три прогрессии полос, одна интенсивная и две более слабые. Приведены максимумы полос колебательной структуры для $^{12}C_3$ и $^{13}C_3$ и их отнесение. Наиболее интенсивная прогрессия связана с симм. вал. кол. ν_1' ~1080 см$^{-1}$. Из анализа распределения интенсивности полос в этой прогрессии сделан вывод, что межъядерное расстояние С—С молекулы в возбужденном электронном состоянии выше, чем в ос-

Х. 1983, 19, N9

новном. Вторая прогрессия с интервалом ~600 см$^{-1}$ интерпретирована как $2\nu_2'$. Третья прогрессия связана с колебанием ν_3', но однозначно не интерпретирована. В зависимости от отнесения, значение ν_3' либо ~780 см$^{-1}$, либо 1320 см$^{-1}$. В спектре наблюдался также ряд полос, не принадлежащих C_3: широкие полосы 1730 и 1693 А, система полос в области 1660 А. Обсуждается их происхождение. На основе значений ν_1' и ν_3' вычислены валентная силовая постоянная K_{11} и силовая постоянная взаимодействия связей K_{12}. В зависимости от выбора ν_3' получены след. два набора значений ($\times 10^5$ дн/см): $K_{11}=4{,}85$, $K_{12}=3{,}41$ (ν_3' ~780 см$^{-1}$) и $K_{11}=6{,}18$, $K_{12}=2{,}07$ (ν_3' ~1320 см$^{-1}$).

В. М. Ковба

of
n s

$^{12}C_3$

Ат. 15798 1982

4 Д553. Вакуумный УФ-спектр C_3 в Ar-матрице при 8 К. Vacuum UV spectrum of C_3 trapped in argon at 8 K. Chang Kok Wai, Graham W. R. M. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 9, 4300—4303 (англ.)

В области длин волн 1900—1200 Å исследованы спектры поглощения продуктов испарения (T=2700 K) графита, изолированных в Ar-матрице при T=8 K. Система полос, расположенная в области 1890—1700 Å, приписана переходу $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1\Sigma_u^+$ молекулы $^{12}C_3$. Определены колебательные частоты ν_1', ν_2' и ν_3' для состояния $^1\Sigma_u^+$ молекулы $^{12}C_3$ в Ar-матрице (~1080, 300 и 780 см$^{-1}$ соответственно). Библ. 31. А. В. Н.

Vi, м-п;

Ф. 1983, 18, N4.

C_3

1982

Ewing D. W., et al.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 86, N 4, 365-
-368.

геометр.,
структ.,
D_0

(см. C_2; III)

$C_3^{+,0,-}$

1982

97: 79239u **Triatomic carbon (C_3) and NCO(+,0,-) molecular-ion structure studies by Coulomb explosion.** Goldring, G.; Eisen, Y.; Thieberger, P.; Wegner, H. E.; Filevich, A. (Weizmann Inst. Sci., Rehovot, Israel). *Phys. Rev. A* 1982, 26(1), 186-98 (Eng). Coulomb-exploded fragments of $C_3^{+,0,-}$, C_4^-, C_5^-, C_6^-, and $NCO^{+,0,-}$, following stripping of high-energy mol. ions in a thin C foil, were recorded, 1st in plastic sheet detectors, and in later expts. with a new image-intensifying and digitizing system. All of the ions studied in detail, C_3 and $NCO^{+,0,-}$, appear to be formed in states of high bending excitation perhaps close to the dissocn. limit. The intranuclear sepns. for the C_3 species were found to be similar to that of normal neutral C_3, 2.5(1) Å; and for the NCO species, rather small, 2.0(1) Å.

структ. парам., свеч, теор. расчёт

(+4) C_4^-, C_5^-, C_6^-, $NCO^{+,0,-}$

C.A. 1982, 97, N10

C_3

Ст. 15455 1982

6 Б1560. Динамика колебательной релаксации состояния $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ C_3. Gu Y., Lesiecki Michael L., Bialkowski Stephen E., Guillory William A. Vibrational relaxation dynamics of the $\tilde{X}\Sigma_g^+$ state of C_3. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 4, 443—448 (англ.)

Методом разрешенной во времени оптич. спектроскопии флуоресценции C_3 ($C_3{}^1\Sigma_g^+$ получали путем ИК-многофотонной диссоциации аллена светом 9,55 мкм в колебательной моде ω_9), возбуждаемой светом перестраиваемого лазера на красителе в полосе перехода $\tilde{X}^1\Sigma_g^+ \rightarrow \tilde{A}^1\Pi_u$, изучена динамика колебательной релаксации $C_3\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ в присутствии Ar, He, N_2, O_2, C_2H_2 (общее давл. $\sim$20 Торр). Установлено, что C_3 имеет колебательную т-ру 850±100 К через $\approx$2 мкс и 280±50 К через 500 мкс после ИК-фотолиза аллена. Перенос энергии между валентными и деформационными колебаниями происходит значительно медленнее, чем установление равновесия в пределах каждого из них. Константы скорости гибели колебательных состояний C_3-($^1\Sigma_g^+$, 110) в присутствии Ar, He, N_2, O_2, C_2H_4, C_3H_4

спектр

Х. 1983, 19, № 6

равны $(1{,}57\pm0{,}06)\cdot10^4$, $(1{,}45\pm0{,}16)\cdot10^4$, $(1{,}78\pm0{,}07)\cdot10^4$, $(1{,}84\pm0{,}43)\cdot10^4$, $(4{,}64\pm0{,}10)\cdot10^4$, $(2{,}0\pm0{,}7)\cdot10^6$ $c^{-1}\cdot Торр^{-1}$ соотв. Константа скорости р-ции $C_3(\tilde{X}\Sigma_g{}^+, 000)+C_2H_2$ равна $(2{,}2\pm0{,}2)\cdot10^{-14}$ $см^3/(молекула\cdot с)$.

Ю. И. Дорофеев

C_3 Ст. 15455 1982

3 Д684. Динамика колебательной релаксации состояния $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ радикала C_3. Vibrational relaxation dynamics of the $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ state of C_3. Gu Y., Lesiecki Michael L., Bialkowski Stephen E., Guillory William A. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 4, 443—448 (англ.)

Исследованы процессы колебательной релаксации радикалов C_3 ($\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ v_1, v_2, v_3). Радикалы C_3 получались многофотонной диссоциацией аллена в поле CO_2-лазера. С целью получения элементарных констант скорости релаксации измерялись временные зависимости поглощения излучения пробного лазера в вибронных полосах системы C_3 ($^1\Pi_u \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$). Разрешение по времени составляло 10—20 нс. Построена кинетич. модель, включающая 4 колебательных уровня, связь между которыми зависит от рода тушащего газа. Определены константы скорости релаксации C_3 ($^1\Sigma_g^+$ 100 и 110) в Ar, He, N_2, O_2 и C_2H_4, а также константа скорости реакции C_3 ($^1\Sigma_g^+$, 000) с C_2H_4.

Е. П. Смирнов

колебательн. релаксации сост. $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ ~~радикала~~ ф. 1983, 18, N 3

C_3

C_3^-, C_3^+

ΔH_f,
теоретр.
структ.

1982

Kühnel W., Gey E.,
et al.

Z. Phys. Chem. (DDR),
1982, 263, N3, 641-645.

(см. C_2 ; III)

C_3

1982

Немухин А.В., Степанов Н.Ф. и др.

Ei, м.п., расчёт

Теор. и эксперим. химия, 1982, 18, N5, 608–612.

(см. C_2; III)

C_3

1982

Sauer J., Čársky P., Zahradník R.

Collect. Czech. Chem. Commun., 1982, 47, N 4, 1149-1168.

(см. SiH_2; III)

расчёт структуры

C_3 1982

Yoshimine M., Kraemer W. P.

Chem. Phys. Lett., 1982, 90, N2, 145-148.

м.н.,

(см. CCN^+; III)

C_3

1983

3 Б1187. Вакуумная УФ-спектроскопия малых молекул углерода и кремния при 10 К. Vacuum UV spectroscopy of small carbon and silicon molecules AT 10 K. Bhepherd Richard A., Chang Kok Wai, Graham W. R. M. «Bull. Soc. chim. belg.», 1983, 92, № 6—7: 16th Int. Symp. Free Radicals, Lauzelle-Ottignies, Sept. 12—16, 1983, 671 (англ.)

Сообщается об исследовании вакуумных УФ-спектров поглощения малых молекул углерода и кремния, изолированных в Ar-матрице ($T=10$ К). В спектре продуктов испарения графита наблюдалась система $(\sigma_g^2\sigma_u^2\pi_u^3\pi_g^1)\,^1\Sigma_u^+ - (\sigma_g^2\sigma_u^2\pi_u^4)\,X^1\Sigma_g^+$ молекулы C_3 в области 1890 А ($\nu_1' \approx 1080$, $\nu_2' \approx 300$, $\nu_3' \approx 780$ см$^{-1}$). Аналогичная система полос перехода $^1\Sigma - X^1\Sigma$, как предполагается, должна наблюдаться и в спектре молекулы SiC_2.

В. М. Ковба

М.Л., Vi;

Х. 1984, 19, N 3

C_3

1983

Kafafi Zakya H.,
Hauge Robert H., et al.

молекр.,
структ.

J. Phys. Chem., 1983,
87, N5, 797-800.

(см. Si_2C; III)

C_3

1983

6 Д474. **Исследование спектров углеродсодержащих соединений за фронтом ударной волны. Определение силы осциллятора $A^1\Pi—X^1\Sigma$ перехода молекулы C_3.** Монякин А. П., Кузнецова Л. А. «Оптика и спектроскопия», 1983, 54, № 1, 79—84

За фронтом ударной волны (УВ), распространяющейся в смеси (C_3F_6+Ar) или (CH_4+Ar), исследованы спектры поглощения углеродсодержащих соединений. Как за падающей, так и за отраженной УВ наблюдались полосы системы Свана молекулы C_2 и псевдоконтинуум $A^1\Pi—X^1\Sigma$-перехода молекулы C_3, которые накладывались на непрерывное поглощение, увеличивающееся в коротковолн. области. Показано, что непрерывное поглощение обусловлено конденсированным углеродом, образующимся в пристеночном слое. Установлено также, что конденсированный углерод может существовать и в ядре потока за отраженной УВ вследствие отсутствия в системе химич. равновесия. На основании колич. измерений интенсивности псевдоконтинуума определена сила осциллятора перехода $A^1\Pi—X^1\Sigma$ молекулы C_3 $f_e=0{,}044\pm0{,}020$. Резюме

Сила осциллятора $A^1\Pi-X^1\Sigma$ перехода

Ф. 1983, 18, N 6

C_3

1983

$A^1\Pi - X^1\Sigma$, fmn

98: 134579c **Spectra of carbon-containing compounds behind a shock wave front. Determination of oscillator strengths of the $A^1\Pi$-$X^1\Sigma$ transition of the carbon C_3 molecule.** Monyakin, A. P.; Kuznetsova, L. A. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1983, 54(1), 79-84 (Russ). The oscillator strength of the $A^1\pi$-$X^1\Sigma$ transition of the C_3 mol. was detd. as $f_e = 0.044 \pm 0.020$ by the anal. of the electronic absorption spectra which were studied over the wavelength range 300-500 nm behind a shock-wave front propagating in mixts. of hexafluoropropylene and methane with Ar. The spectra consisted of a Swan band system of the C_2 mol., a pseudocontinuum of the $A^1\pi$-$X^1\Sigma$ transition of the C_3 mol., CN and CH band systems, and a continuum absorption increasing towards the short-wave region. The latter was ascribed to a condensed C formed in a boundary layer at the shock tube walls. Alternatively, the C can be formed in a gas flow core behind the reflected shock wave due to a lack of the chem. equil. in the system.

C. A. 1983, 98, N 16.

C_3

1983

Perić Miljenko, Peyerimhoff Sigrid D.

расчёт м.п.

Mol. Phys., 1983, 49, N2, 379-400.

(см. BH_2; III)

C3 Ommuck 16322 1983

Rakshit A.B., Bohme DK

Ам

Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys., 1983, 49, N2, 275-277.

C3

[Ст. 16943]

1983

Römelt J.B.,

теор. расчёт

Phys. Bl., 1983, 39, N 7, 226-232.

C3 Ом. 17621 1983

Shepherd R.A., Chang K., et al.,

Бакунин. ИР спектр

Bull. Soc. Chim. Belg., 1983, 92, N6-7, 671.

C_3

1984

1 Б1072. Пересечения потенциальных поверхностей для трехатомных молекул. Potential energy surface intersections for triatomic molecules. Carter S., Mills I. M., Dixon R. N. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, **106**, № 2, 411—422 (англ.)

Рассмотрены различные типы пересечений потенциальных поверхностей, появляющихся при переходе к линейным конфигурациям трехатомных молекул: обсужден эффект Реннера — Теллера для состояний симметрии П, Δ, Φ и др., а также пересечения поверхностей типа Σ и П, Σ и Δ, П и Δ. Представлен общий метод моделирования пересекающихся поверхностей по аналогии с ранее развитым методом для случая непересекающихся поверхностей. На примере ряда состояний C_3 и NH_2 отмечены основные этапы применения этого метода.

Н. Ф. Степанов.

пересечение потенц. поверхн.

(4) ☒

Х. 1985, 19, N1.

С3 (ОТ. 20303) 1984

Kraemer W. P., Bunker P. R., et al.

теорет. исследов. колебат. вращат. уровней энергии, ф-ии дипольн. момента — J. Mol. Spectrosc., 1984, 107, N1, 191–207.

C_3

Оп. 19672 1984

1 Д96. Теоретическое изучение вертикального сродства к электрону и потенциалов ионизации для C_3. Theoretical study of the vertical electron affinity and ionization potentials of C_3. Sunil K. K., Orendt Anita, Jordan Kenneth D., Defrees Doug. «Chem. Phys.», 1984, 89, № 2, 245—256 (англ.)

Вертикальные потенциалы ионизации и сродство к электрону для C_3 рассчитаны с помощью методов ССП МО ЛКАО, МК ССП и конфигурац. взаимодействия. Использованы различные базисные наборы из сгруппированных гауссовых ф-ций с включением разного числа диффузных и поляризационных ф-ций. При небольших базисных наборах результаты метода конфигурац. взаимодействия сравнены с результатами применения теории возмущений Меллера—Плессета. Показано, что при учете эффектов корреляции состояния $^2\Sigma_u$ и $^2\Sigma_g$ положит. иона C_3^+ лежат ниже по энергии, чем состоя-

расчет ε_i, E_i

Ф. 1985, 18, N1.

ние $^2\Pi_u$. Единственным стабильным при данной геометрич. конфигурации состоянием аниона C_3^- является основное состояние $^2\Pi_g$. Полученная для этого электронного состояния оценка энергии (2,0 эВ) прекрасно согласуется с эксперим. оценкой (2,05 эВ), найденной на основании экспериментов по фотоприсоединению электрона к молекуле C_3. Е. А. Ж.

C_3

Ом. 19672 1984.

1 Б1033. Теоретическое изучение вертикальных сродства к электрону и потенциалов ионизации молекулы C_3. Theoretical study of the vertical electron affinity and ionization potentials of C_3. Sunil K. K., Orendt Anita, Jordan Kenneth D., Defrees Doug. «Chem. Phys.», 1984, 89, № 2, 245—256 (англ.)

Рассчитаны сродство к электрону (основное состояние $^2\Pi_g$ отриц. иона) и потенциалы ионизации (состояния $^2\Sigma_g^+$, $^2\Sigma_u^+$ и $^2\Pi_u$ положит. иона) молекулы C_3 при фиксированной геометрич. конфигурации ядер, равновесной для основного состояния C_3 в приближении ССП. Исследована зависимость результатов от выбора орбитального базиса и метода расчета волновой функции. Использован базис сгруппированных гауссовых функций 6—31Г, а также базисы 6—31ГХ, 6—31ГХ* и 6—31ГХ+ (Х означает включение в базис дополни-

расчет Ae, J, геометр., структуры, Si

Х. 1985, 19, N 1.

и 4
асче

тельных диффузных s и p функций, * — однокомпонентных поляризац. d-функций, + — двухкомпонентных d-функций). Расчет проведен методом ССП, методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратно возбужденных конфигураций по отношению к хартри-фоковскому детерминанту, многоконфигурац. методом ССП и методом конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями (КВ НИК). Отмечено, что при использовании теоремы Купменса и при расчете методом ССП основным состоянием C_3^+ оказывается $^2\Pi_u$, тогда как при учете корреляции более низкую энергию имеют состояния $^2\Sigma_u^+$ и $^2\Sigma_g^+$. Получена величина сродства к электрону 1,74 эВ. Не обнаружено возбужденных связанных состояний C_3^- при геометрии, равновесной для C_3. Рассчитаны также энергии ряда возбужденных состояний C_3. Сделан вывод, что почти вырожденность занятых орбиталей $3\sigma_u$, $4\sigma_g$ и $1\pi_u$ и низкая энергия виртуальной орбитали $1\pi_g$ приводят к тому, что корреляц. эффекты более важны в процессах ионизации и возбуждения, приводящих к образованию дырки на σ-орбитали, чем при образовании дырки на π-орбитали. Для учета корреляции использована также теория возмущений Мёллера — Плессета; при учете одно-, двух- и четырехкратных возбуждений в четвертом порядке теории возмущений получены результаты, близкие к результатам метода КВ НИК.

А. А. Сафонов

C_3

Dm. 19672

1984

/ 101: 177865r **Theoretical study of the vertical electron affinity and ionization potentials of carbon (C_3).** Sunil, K. K.; Orendt, Anita; Jordan, Kenneth D.; Defrees, Doug (Dep. Chem., Univ. Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 USA). *Chem. Phys.* 1984, 89(2), 245-56 (Eng). The electron affinity and first 3 ionization potentials of C_3 are calcd. using the MC-SCF and CI methods and by Moeller-Plesset perturbation theory. Whereas Koopmans' theorem and SCF calcns. indicate that the first cation state is $^2\Pi_u$, upon inclusion of correlation effects both the $^2\Sigma_u$ and $^2\Sigma_g$ cation states are found to lie lower in energy. CI calcns. indicate that the ground state ($^2\Pi_g$) anion is stable by 1.74 eV. Allowing for the error in the calcd. electron affinity of the carbon atom, C_3^- is estd. to be stable by 2.0 eV, in excellent agreement with the 2.05 eV value detd. from recent photodetachment measurements. No excited anion states are bound at the equil. geometry of the neutral mol.

(Ae)

C.A. 1984, 101, N20

C 3

1985

Bunker P. R.

Mol. Astrophys.: State Art and Future Dir. Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Bad Windsheim, 8-14 July, 1984. Dordrecht e. a., 1985, 491-496.

e. n.

(Cur. CH_2; III)

С3

1985

Jones R.O.,

Энергетич. поверхн., теор. расчет, длина связи.

Phys. Rev. A: Gen. Phys., 1985, 32, N5, 2589–2594.

C_3

Ом 31093 1985

У 23 Б1042. Поверхности энергии низколежащих состояний C_3. Energy surfaces of low-lying states of C_3. Jones R. O. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 11, 5078—5083 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом функционала локальной спиновой плотности рассчитаны сечения Пв потенциальной энергии основного и ряда возбужденных состояний молекулы C_3. Результаты в целом хорошо согласуются с данными расчетов методами ССП и конфигурац. взаимодействия. В частности, воспроизводится низкая частота деф. кол. в основном состоянии молекулы, порядок следования возбужденных электронных состояний, зависимости орбитальных энергий от валентного угла молекулы (диаграммы Уолша). Обсуждены особенности строения двух- и трехатомных молекул, содержащих связи С—С.

А. В. Немухин

(М.П.)

Х. 1986, 19, N23

C_3

Ом 31093

1985

103: 27528k **Energy surfaces of low-lying states of triatomic carbon.** Jones, R. O. (Inst. Festkoerperforsch., Kernforschungsanlage Juelich, D 5170 Juelich, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(11), 5078-83 (Eng). D. functional calcns. were performed for the energy surface of the ground state [$^1\Sigma_g^+(^1A_1)$] and low-lying excited states [$^3\Pi_u(^3B_1,^3A_1)$, $^3\Pi_g(^3B_2, ^3A_2)$, $^1\Pi_u$, $^1\Pi_g$] of the C_3 mol. The exptl. geometries and sym. stretch frequencies of $^1A_1$ and $^1\Pi_u$ states are reproduced well, and there is good agreement with CI calcns. for the triplet states. The energy surface of the ground state is described qual. better than by CI calcns. and does not show the unusual square-well form found in Hartree-Fock calcns. The splitting of the Born-Oppenheimer surfaces in the Π states (Renner-Teller effect) is discussed, and the qual. features of the bonding presented in terms of the geometry dependence of the one-electron eigenvalues (Walsh diagrams). Together with earlier results for C_2, the calcns. provide insight into the unique features of the C-C bond.

нижние эл. состоян., потенц. поверхности

С. А. 1985, 103, N 4

C3

[ОП 24345]

1985

Perić M., Peyerimhoff S.D., et al.,

Int. Rev. Phys. Chem., 1985, 4, N2, 85–124.

ab initio расчет эффекта Реннер-Теллера

C3

Отписк 20828

1985

Winnewisser M.,

J. Mol. Struct., 1985,

126, 41–66.

уровни энергии

C3 (ОП·26247) 1986

Beardsworth R., Bunker P.R. et al.,

Кол. вращ. уровни

J. Mol. Spectrosc., 1986, 118, N1, 50-63.

C_3

1986

105: 51000u **Rotation-vibration energy levels of water and triatomic carbon calculated using the nonrigid bender Hamiltonian.** Beardsworth, R.; Bunker, P. R.; Jensen, Per; Kraemer, W. P. (Max Planck Inst. Astrophys., D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 118(1), 50–63 (Eng). A new computer program was written for diagonalizing the nonrigid bender Hamiltonian, and the program was based entirely on the theory as reviewed by P. Jensen (1983) and P. Jensen and P. R. Bunker (1986). By using this program, the rotation-vibration energy levels can be calcd. for a triat. mol. from the potential energy function. The program is an improvement over an earlier version, particularly in the systematic treatment of all singular terms, and in the allowance made for the dependence of all perturbation energy denominators on the bending quantum no. v_2 and rotation quantum no. K. The new program can be used for sym. and unsym. triat. mols. The program was tested by applying it to the calcn. of the rotation-vibration energy levels of C_3 from an ab initio potential surface, and of H_2O from ab initio and exptl. potential surfaces.

(уровни кол. вр. программа расчета)

(+) H_2O

C.A. 1986, 105, N 6

C3 Ст. 23776 1986

Chabalowski C.F.,
Buenker R.J., et al.,

J. Chem. Phys., 1986,
84, N1, 268-274.

Изучение
эл. сост.,
ab initio

C_3^+ 1986

Geusic M.E., McIlrath T.J., et al.

Do; J. Chem. Phys., 1986, 84, N4, 2421-2422.

(cw. C_n^+; III)

C_3^+

(Оп. 28695)

1987

12 Б1124. Геометрическая структура C_3^+. Geometrical structure of C_3^+. Faibis A., Kanter E. P., Tack L. M., Bakke E., Zabransky B. J. «J. Phys. Chem.», 1987, **91**, № 26, 6445—6447 (англ.)

геометрич. структура

Методом кулоновского взрыва установлено нелинейное строение кластера C_3^+. Молек. ионы C_3^+, а также $C_3H_3^+$ и $C_3H_4^+$ получены бомбардировкой газа C_3H_4 электронами. Сделаны выводы о циклич. строении $C_3H_3^+$ и линейном строении $C_3H_4^+$. А. В. Немухин

(42) (X)

Х. 1988, 19, N 12.

C_3^+

Ст. 28695

1987

6 Д53. Геометрическая структура C_3^+. Geometrical structure of C_3^+. Faibis A., Kanter E. P., Tack L. M., Bakke E., Zabransky B. J. «J. Phys. Chem.», 1987, **91**, № 26, 6445—6447 (англ.)

С помощью метода кулоновского взрыва исследована фрагментация ионов C_3^+, $C_3H_3^+$ и $C_3H_4^+$ с энергией 4,5 МэВ при столкновениях с фольгами. По данным о распределении фрагментов по величине и направлению скорости установлена геометрич. структура углеродного кластера. Показано, что основное состояние иона C_3^+ имеет изогнутую структуру, в то время как внутри $C_3H_3^+$ он имеет преимущественно циклич. структуру, а в $C_3H_4^+$ характеризуется линейной геометрией.

Г. Н. Огурцов

М.П.

+2

Ф. 1988, 18, N6

C_3 1987

Kraemer W. P.

Struct. / React. and Thermochem. Ions: Proc. NATO Adv. Study Inst., Les Arcs, June 30-July 11, 1986. Dordrecht etc., 1987. С. 247-260.

м.п.

(см. HOC^+; III)

C3 — (OM. 28270) 1987

Rasanen M., Liu J. Y.,
et al.,

см. R.

Chem. Phys. Lett., 1987,
142, N5, 308–312.

C_3

1987

108: 194898r **A theoretical and experimental study of the lowest excited singlet and triplet states of triatomic carbon.** Peric, Miljenko; Radic-Peric, Jelena (Fac. Sci., Univ. Belgrade, YU-11001 Belgrade, Yugoslavia). *J. Serb. Chem. Soc.* 1987, 52(6-7), 389-98 (Eng). The lowest excited singlet and triplet electronic states of the C_3 radical ($1^1\Pi_u$, $1^3\Pi_u$) were investigated by means of the ab initio multiref. double-excitation-CI method. The vibronic energy levels and wave functions are computed by matrix soln. of the corresponding Schroedinger equation. The calcd. probabilities for the transitions between vibronic levels of the electronic ground state ($1^1\Sigma_g^+$) and the $1^1\Pi_u$ state are compared with exptl. obtained intensity distributions.

($1^1\Pi_u$, $1^1\Pi_u$)

C.A. 1988, 108, N 22

ССС [от. 27553] 1987

Зюбина Т.С., Царкин О.П.,
Зюбин А.С.,

структура и стабилен.

Ж. неорган. химии,
1987, 32, N 11, 2616–
–2624.

C3 1988

Burdett Jeremy K.,
Marsden Colin J.

New J. Chem. 1988. 12,
N10. c. 797–809.

u.n.

(C_{4h} Si_3 ; III)

C_3 om.30490 1988

Jacox M.E.,

Ti,Di; J. Phys. and Chem. Ref. Data, 1988, 17, N 2, 308

C_3 (ОМ. 29313) 1988

Jensen P., Kraemer W.P.,

расчет колебательной энергии

J. Mol. Spectrosc., 1988, 129, N1, 172–185.

A comparison of Perturbative and Variational Rotation-Vibration Energies Calculated

for HOC^+ and C_3 using the Nonrigid Bender and MORBID Hamiltonians.

C_3 Om. 30583 1988

109: 179403c Infrared diode laser kinetic spectroscopy of the ν_3 band of the triatomic carbon molecule. Matsumura, Keiji; Kanamori, Hideto; Kawaguchi, Kentarou; Hirota, Eizi (Seinan Gakuin Univ., Fukuoka, Japan 814). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(6), 3491–4 (Eng). IR diode laser kinetic spectroscopy was applied to reaction intermediates generated by the photolysis of diacetylene and allene at 193 nm. A strong band was obsd. around 2040 cm^{-1} and was assigned to the ν_3 band of C_3. The obsd. spectrum was analyzed by using an energy level expression for a linear mol.; higher-order centrifugal distortion terms were necessary to be included in the least-squares fit. The band origin was detd. to be 2040.0198 (8) cm^{-1}. The rotational and centrifugal distortion consts. obtained suggest the presence of a potential barrier at the linear configuration in both the ground and ν_3 states.

(ν_3)

C.A. 1988, 109, N 20

C_3

ОМ 30583 1988

6 Б1336. Инфракрасная полупроводниковая лазерная кинетическая спектроскопия полосы ν_3 C_3. Infrared diode laser kinetic spectroscopy of the ν_3 band of C_3. / Matsumura K., Kanamori H., Kawaguchi K., Hirota E. // J. Chem. Phys.— 1988.— **89**, № 6.— С. 3491—3494.— Англ.

М.П.

Методом кинетич. полупроводниковой лазерной спектроскопии измерена вращат. структура полосы ν_3 молекулы C_3 в обл. 1900—2100 см$^{-1}$. Молекулы C_3 получались при фотолизе ацетилена, дейтероацетилена, диацетилена или аллена излучением эксимерного ArF лазера (193 нм). Начало полосы при 2040,0198 см$^{-1}$. Значения (в см$^{-1}$) вращат. постоянных и постоянных центробежного искажения (линейная модель молекулы): основное состояние — $B=0{,}430445$, $D=7{,}42\cdot10^{-7}$, $H=-9{,}43\cdot10^{-10}$; состояние (001) — $B=0{,}435565$, $D=3{,}633\cdot10^{-6}$, $H=1{,}11\cdot10^{-13}$, $L=-2{,}214\cdot10^{-13}$, $M=2{,}176\cdot10^{-17}$. Полученные данные и, в частности, отриц. величина параметра колебательно-вращат. взаимодействия $\alpha_3=-0{,}005120$ см$^{-1}$, указывают на то, что потенциальный барьер линейности в состоянии $v_3=1$ выше, чем в основном состоянии. В. М. Ковба

Х.1989, N6

C_3

Ом 30583 1988

2 Л187. ИК-диодно-лазерная кинетическая спектроскопия полосы ν_3 C_3. Infrared diode laser kinetic spectroscopy of the ν_3 band of C_3 / Matsumura Keiji, Kanamori Hideto, Kawaguchi Kentarou, Hirota Eizi // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 6.— С. 3491—3494.— Англ.

Методом диодно-лазерной кинетич. ИК-спектроскопии получен спектр промежуточных продуктов газофазной реакции фотолиза диацетилена и аллена излучением с длиной волны 193 нм. В области 2040 $см^{-1}$ обнаружена полоса простой структуры, интерпретированная как полоса ν_3 молекулы C_3. Частоты зарегистрированных линий приведены в таблице. Анализ структуры наблюдаемой полосы указывает на линейную форму молекулы C_3. По полученным данным методом наименьших квадратов определены вращательные постоянные C_3 в основном состоянии и состоянии ν_3, а также частота колебательного перехода ν_3, равная 2040,0198(8) $см^{-1}$.

Н. Н. Ф.

М.П.

сф. 1989, N 2

C_3 1988

Smith R. Seth,
Anselment M., et al.

cnekmp J. Chem. Phys. 1988,
89 (4), 2591.

(см. $C_4H_4O^+$; III)

C_3

1988

16 Б1094. **Получение нежесткого гамильтониана для вращения и внутреннего движения большой амплитуды произвольной молекулы.** Derivation of the nonrigid rotation — large-amplitude internal motion Hamiltonian of the general molecule. Szalay V. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 24—61 (англ.)

Для произвольной молекулы предложен метод построения эффективного гамильтониана, описывающего вращение молекулы как целого и внутр. движение большой амплитуды. Метод применим как в случае одной, так и в случае нескольких степеней свободы для движений большой амплитуды и основан на использовании контактных преобразований разл. гамильтониана по борн-оппенгеймеровскому параметру малости. Обсуждены три различных способа введения координат для таких движений. В кач-ве конкретного примера рассмотрена молекула C_3, для к-рой построен эффективный Пт для деф. кол. по лит. данным полного неэмпирич. расчета. Б. И. Жилинский

М.П.

Х. 1988, 19, N 16

C3

1989

Bernath P.,

High Resolut. Fourier Transform Spectrosc: Sum, Pap.

M.N. High Resolut. Fourier Transform Spectrosc. Top. Meet., Santa Fe, N.M, Feb. 13-15, 1989. — Washington (DC),

1989, – С. 92–93.

(Сер. SiC; III)

C_3 1989

Jensen P.,

Does the C_3 Molecule Have a Bent Equilibrium Structure?

равновес. структура

Eleventh Colloquium On High Resolution Mol Spec

lecular Spectroscopy, Giessen,
September 18-22, 1989, A1, J25.

C_3

1989

20 Б1092. Поверхность потенциальной энергии для молекулы C_3, определенная по эскперименталь ным данным. Свидетельство угловой равновесной структуры. The potential energy surface for the C_3 molecule determined from experimental data. Evidence for a bent equilibrium structure / Jensen P. // Collect. Czechosl. chem. Commun.— 1989.— **54**, № 5.— С. 1209—1218.— Англ.

С предложенным авторомом (//J. Mol. Spectr.— 1988. — **128**.— С. 478) модельным гамильтонианом MORBID трехатомной молекулы (приближение жестких длин связей для деформац. движения) и ряда по переменным Морзе для вал. кол. интерпретированы новые эксперим. данные по спектрам лазерной флуоресценции молекулы C_3. Потенциальная ф-ция при определенных по этим данным параметрах отвечает нелинейной равновесной геометрии молекулы с валентным углом $162{,}5 \pm 1°$. Барьер перехода через линейную форму оценен в $16{,}5 \pm 3{,}6$ см$^{-1}$. Отмечено, что в целом результаты согласуются с данными неэмпирич. расчетов Крэмера, Бюнкера и Иошимине. А. В. Немухин

М.П.

Х.1989, N20

C_3

1989

111: 140979m The potential energy surface for the carbon triatomic molecule determined from experimental data. Evidence for a bent equilibrium structure. Jensen, Per (Phys. Chem. Inst., Justus-Liebig-Univ., D-6300 Giessen, Fed. Rep. Ger.). *Collect. Czech. Chem. Commun.* 1989, 54(5), 1209-18 (Eng). The Morse oscillator-rigid bender internal dynamics (MORBID) Hamiltonian for triat. mols. was used to refine the potential energy function for the $X^1\Sigma_g^+$ electronic ground state of C_3 by fitting to exptl. data. In accordance with previous ab initio calcns., C_3 was found to have a bent equil. structure. The MORBID calcn. reported yields a barrier to linearity of 16.5 (3.6) cm^{-1} and an equil. bond angle of 162.5° (1.9°) with one std. error given in parentheses.

структура

C.A. 1989, 111, N 16

C_3

ОП 32077

1989

11 Д67. Поверхность потенциальной энергии для молекулы C_3, найденная из экспериментальных данных. Доказательство изогнутой равновесной структуры. The potential energy surface for the C_3 molecule determined from experimental data. Evidence for a bent equilibrium structure / Jensen Per // Collect. Czechosl. chem. Commun.— 1989.— 54, № 5.— С. 1209—1218.— Англ.

Данные по флуоресцентному эмиссионному спектру, индуцированному лазерным излучением (Smith et al. // J. Chem. Phys.— 1987.— 87.— С. 4435). Использованы для определения поверхности потенц. энергии основного электронного состояния молекулы C_3. Подтверждено наличие у C_3 изогнутой равновесной структуры. Найдено, что равновесный угол изгиба равен 162,5°, а потенц. барьер для линейной структуры равен 16,5 $см^{-1}$.

А. П. Калинин

М.П.

Ф. 1989, N 11

C3

ОМ 32938 1989

9 Б1322. **Диодная лазерная спектроскопия C_3: Полосы $\nu_2+\nu_3-\nu_2$, $2\nu_2+\nu_3-2\nu_2$ и $2\nu_2+\nu_3$.** Diode laser spectroscopy of C_3: The $\nu_2+\nu_3-\nu_2$, $2\nu_2+\nu_3-2\nu_2$, and $2\nu_2+\nu_3$ bands / Kawaguchi K., Matsumura K., Kanamori H., Hirota E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 4.— С. 1953—1957.— Англ.

На ИК-диодном лазерном спектрометре в обл. частот 1920—2100 см$^{-1}$ измерены спектры полосы (001)Σ—(000)Σ, горячих полос (011)Π—(010)Π, (021)Δ—(020)Δ, (021)Σ—(020)Σ и комбинац. полосы (021)Σ—(000)Σ молекулы C_3. Образец получен в результате пиролиза аллена или в ВЧ-разряде циклопропана или фурана. Анализ ИК-спектров выполнен с учетом квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения и *l*-резонанса. Из данных по *l*-резонансу оценены частоты ν_2 для состояний (010) и (011), соотв., 66 и 45 см$^{-1}$. Полученные результаты представляют интерес для астрофизики и зондирования атмосферы. С. Н. Мурзин

М.П.

Х.1990, N 9

C_3 Om 32938 1989

111: 143174f Diode laser spectroscopy of the carbon triatomic molecule: the $\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, $2\nu_2 + \nu_3 - 2\nu_2$, and $2\nu_2 + \nu_3$ bands. Kawaguchi, Kontarou; Matsumura, Keiji; Kanamori, Hideto; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Myodaiji, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(4), 1953-7 (Eng). The ν_3 hot bands (011)-(010), (021)-(020), and the combination band (021)-(000) of C_3 were obsd. by a diode laser spectroscopic method. The C_3 mol. was produced by the photolysis of allene or by the discharge in cyclopropane or furan. Anal. gave mol. consts. in each vibrational state and also the energy differences between (020) and (000). The derived vibrational frequencies were compared with the result of a Morse oscillator-rigid bender internal dynamics (MORBID) calcn.

$\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$
$2\nu_2 + \nu_3 - 2\nu_2$
$2\nu_2 + \nu_3$

C.A. 1989, 111, N 16

C_3

1989

24 Б1399. Новые электронные системы полос охлажденного в струе C_3 266—302 нм. New electronic band systems of jet-cooled C_3: 266—302 nm / Lemire G. W., Fu Z., Hamrick Y. Mi, Taylor S., Morse M. D. // J. Phys. Chem.— 1989.— 93.— С. 2313—2319.— Англ.

В области 266—302 нм наблюдались новая сложная или новые сложные системы полос в спектре резонансной двухфотонной ионизации молекул C_3 охлажденных в сверхзвуковой струе. Испарение в-ва с графитовой Пв (^{12}C или смесь ^{12}C и ^{13}C) осуществлялось лазерным нагревом. Анализ вращат. структуры показал, что полосы принадлежат переходу $\Sigma_u^+ — \Sigma_g^+$ с общим началом для всех полос (уровень 00^00 состояния $X^1\Sigma_g^+$). Измерены времена жизни (τ) для ряда полос (τ меняются в пределах 0,4—2,5 мкс). Эти данные согласуются с отнесением верхних уровней к состояниям $\ldots 4\sigma_g(3\sigma_u^2 1\pi_u^4 1\pi_g(^1\Pi_g)$ или $\ldots 4\sigma_g^2 3\sigma_u^2 1\pi_u^3 1\pi_g(^1\Delta_u)$. В любом случае переход индуцирован за счет вибронного взаимодействия Герцберга — Теллера с электронным состоянием $^1\Sigma_u^+$, переход в к-рое разрешен. По границе обрыва спектра (в красную сторону) оценен верхний предел адиабатич. Пт ионизации молекулы C_3; 12,0 эВ. В. М. Ковба

М.П.

Х.1989, N24

C_3

1989

110: 144060g New electronic band systems of jet-cooled carbon trimer: 266–302 nm. Lemire, George W.; Fu, Zhenwen; Hamrick, Yoon Mi; Taylor, Scott; Morse, Michael D. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Phys. Chem.* 1989, 93(6), 2313–19 (Eng). A complicated new band system or systems was obsd. in jet-cooled C_3 a 266–302 nm with use of resonant 2-photon ionization. Rotational anal. showed the bands to be of $\Sigma_u^+ - \Sigma_g^+$ vibronic structure, with all bands originating from the 00^00 vibronic level of $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ C_3. Lifetimes of 0.4–2.5 μs are reported for several bands. These observations are consistent with an assignment of the upper state as either ... $4\sigma_g 3\sigma_u^2 1\pi_u^4 1\pi_g$, $^1\Pi_g$, or ... $4\sigma_g^2 3\sigma_u^2 1\pi_u^3 1\pi_g$, $^1\Delta_u$. In either case, the transition is induced by Herzberg–Teller vibronic coupling to a $^1\Sigma_u^+$ electronic state, for which the $^1\Sigma_u^+ \leftarrow \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ transition is strongly allowed. An abrupt cutoff of the spectra toward the red provides evidence of an adiabatic ionization potential for C_3 of 12.0 eV, which is in any case an upper limit. Vaporization of mixed ^{12}C and ^{13}C powders produces mixed isotopomers of C_3, demonstrating that C_3 is not solely produced by intact ejection that the laser-heated C surface.

$(^1\Sigma_u^+ - \tilde{X}^1\Sigma_g^+)$

(9)

C.A. 1989, 110, N 16

C_3

1989

9 Л177. Лабораторные наблюдение колебательно-вращательного спектра C_5 в газовой фазе. Laboratory observation of the rotation-vibration spectrum of gas-phase C_5 / Moazzen-Ahmadi N., McKellar A. R. W., Amano T. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— **157**, № 1-2.— С. 1—4.— Англ.

Самое высокочастотное асимметричное фундаментальное валентное колебание ν_3 цепей C_3 и C_5 наблюдалось в лабораторных условиях в смесях C_2H_2+He и C_2H_4+ +He (1 : 100), помещенных в полый катод для создания разряда. Исследования, проводимые с использованием спектрометра на перестраиваемом диодном лазере, предварялись экспериментами по матричной изоляции и астрономическими наблюдениями. Всего измерено 59 линий с γ от 0 до 72. Наблюдались небольшие локальные возмущения в области $\gamma=41$. На основе анализа результатов измерений получены точные значения положения полосы 2169 см$^{-1}$ C_5 и вращательные параметры основного и возбужденного колебательных уровней. И. Г.

М.П.

(4)

ф. 1989, N 9

C3

1989

24 Б1425. Наблюдение спектров вынужденной лазерной флуоресценции молекул NCS и C_3, охлажденных в сверхзвуковой струе. Observation of stimulated emission pumping spectra of jet-cooled NCS and C_3 / Northrup F. J., Sears T. J. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— **159**, № 5—6.— С. 421—425.— Англ.

Сообщается о наблюдении спектров вынужденной лазерной Фл охлажденных в сверхзвуковой струе молекул C_3 и NCS, к-рые образовывались при лазерном УФ-Фт молекул фурана и C_2H_5NCS, соотв. Отдельные вращат. линии в спектрах обычной лазерной Фл и стимулированной лазерной Фл возбуждались с помощью двух лазеров на красителях, накачиваемых одним эксимерным (XeCl) лазером. Для основного $\tilde{X}^1\Sigma_g^+$ состояния молекулы C_3 получены колебат. и вращат. постоянные. Отмечается, что рассматриваемая методика позволяет изучать вибронные уровни основного состояния малых свободных радикалов с высокими колебат. квантовыми числами.

А. В. Столяров

М-П.

(71) (X)

Х.1989, N24