

C2 +

A.P. (C_2^+).

9082 - ~~#~~ IV

1935

Tate J.T., Smith P.T., Vaughan A.L.
Phys.Rev. 1935, 48, 525-31

"A mass-spectrum-analysis of
the products of ionization by
electron impact in nitrogen,
acetylene, nitric oxide, cyanogen

C.A., 1935, 7174

C_2^+

номер 8016

1939

Mulliken R. S.

Иониз.
состоян.

Phys. Rev., 1939, 56,
778-81

77-1V

C (ΔH_s , A.P.); C^+ , C_2^+ (A.P.)

1953

Chupka W. A., Inghram M. G.

J. Chem. Phys., 1953, 21, N2, 371-372 (abbr.)

Investigation of the heat of vaporization
of carbon.

Б

● ✓ ф

1 + 3

P. M. X. 1953, N2, 1436.

4036 - IV

1955

A.P. ($C_2H_2^+$, C_2H^+ , C_2^+)

C_2H_2

Coats F.H., Anderson R.C.

J. Amer. Chem. Soc. 1955, 77, N 4,
895-896

Electron impact data on ...

M, J

11-2094

C_2H , CH , $C_2H_2^+$, C_2H^+ , C_2^+ , CH^+ , $C^+(H F)$ 1957

C_2H_2 , C_2H , CH , C_2 (D)

Coats F.H., Anderson R.C.

J. Amer. Chem. Soc., 1957, 79, N 6, 1340-1344

Термодинамические величины, ...

C_2^+



O_2^+
 O_2^{2+}
 O_2
 CO^{2+}
 Потенц. крив.

8Б38. Потенциальные кривые для двухзарядных положительных двухатомных ионов. Hurley A. C., Maslen V. W. Potential curves for doubly positive diatomic ions. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 6, 1919—1925 (англ.).—Исходя из теоремы вириала, авторы получают точное выражение для энергии связи мол. иона через интеграл от средней кинетич. энергии по масштабному параметру. Полученная ф-ла использована для расчета энергии двукратно заряженных положительных ионов. При расчете предполагается, что волновая функция иона отличается от функции соответствующей изоэлектронной нейтр. молекулы только масштабным преобразованием. При этом потенциальная кривая для иона выражается через такую же кривую для молекулы. Для ряда ионов (C_2^{2+} , O_2^{2+} , CO^{2+} и др.) рассчитана энергия ионизации и, где возможно, произведено сравнение с опытом. На двухэлектронной модели проверялась допустимость сделанных предположений.

Ю. Демков

х. 1962. 8

C_2^+

C_2^-

Herzberg G.

1987

Proc. Int. Conf. Spectrosc.
1st, Bombay 1967, 1, 158.

Molecular absorption spectra
in flash discharges.

H_2^+
● (see. ~~Herzberg~~
from ~~Herzberg~~)

C₂⁺

Hertzberg G.,
Lagerqvist A.

Can. J. Phys.
46, 2363-73

Впр - 3340a - XIV

мал. пост.

Новый спектр, связанный
с двухатомным углеродом.

● (сл. C₂) III

1968

231

6:15

C₂⁺

23037b Theoretical calculation of the electronic states of C₂⁺. Verhaegen, Georges (Univ. Libre Bruxelles, Brussels, Belg.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(10), 4696-705 (Eng). Results of ab initio calcns. are presented for a series of valence levels of C₂⁺ and for the two lowest states of C₂ ($x^1\Sigma_g^+$ and $X'^3\Pi_u$). Correlation energies of all the levels are estd. by a new scheme taking into account near-degeneracy effects in the mol. and in the constituent ion pairs. Results for C₂ are in close agreement with expt. for equil. internuclear distances, vibration frequencies, term energies, and disocn. energies. For C₂⁺ the calcns. show the ground state to be $^4\Sigma_g^-$ with relatively low-lying (~ 0.6 ev.) $^2\Delta_g$ and $^3\Pi_u$ levels. The electron-impact measurement for the appearance potential of C₂⁺ is interpreted as C₂($^3\Pi_u$, $v = 1$) $\rightarrow$ C₂⁺($^4\Sigma_g^-$, $v = 0$). The quartet transition $^4\Sigma_g^- \rightarrow ^4\Sigma_u^-$ is predicted to lie at 6000 Å. The major doublet transitions all lie in the ir.

RCJO

C.A. 1969. 70:6

C_2^+ кв.-мек.
расчет

5 Д90. Теоретический расчет электронных состояний C_2^+ . Vorhaegen G. Theoretical calculation of the electronic states of C_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 10, 4696—4705 (англ.)

1968

Представлены результаты неэмпирич. расчета ряда валентных уровней C_2^+ и двух низших состояний $C_2(x^1\Sigma_g^+$ и $X'^3\Pi_u)$. Оценены корреляционные энергии всех уровней. Равновесные межъядерные расстояния, колебательные частоты, энергии термов и энергии диссоциации C_2 хорошо согласуются с эксперим. данными. Результаты расчета C_2^+ свидетельствуют о том, что основным является $^4\Sigma_g^-$ -состояние с относительно низлежащими (около 0,6 эв) $^2\Delta_g^-$ и $^2\Pi_u$ -уровнями. Измеренный потенциал появления C_2^+ при электронном ударе отнесен к $C_2(^3\Pi_u, v=1 \rightarrow C_2^+(^4\Sigma_g^-, v=0)$. Предсказано, что квартетный переход $^4\Sigma_g^- \rightarrow ^4\Sigma_u^-$ расположен при 6000 Å. Все главные дублетные переходы расположены в ИК-области.

Резюме

ф. 1969. 5 Д

G⁺

Lathane W. a
at all

1941

coll.
cp - pa

J. Amer. Chem. Soc.
1941, 93, W4, 808-815



(Cis. H₂)at

C_2^+

Hinkley R.K.;
et al.

1972

расчет.

"Mol. Phys",

1972, 24, N5, 1095-102.

"Коммент. спин-орбит. взаимч. ...

● (см. Ветт; III)

C_2^+

этмск 3279

1972

✓ 9 Д353. Новая полоса, отнесенная к молекулярному иону C_2^+ . Meinel H. A new spectrum probably due to the C_2^+ ion. «Can. J. Phys.», 1972, 50, № 2, 158—164 (англ.; рез. франц.)

(ш.н) Исследован спектр поглощения, полученный при про-
свечивании излучением капиллярного разряда продук-
тов разложения C_2H_2 в импульсном разряде. В обла-
сти 2490 Å обнаружена новая полоса, предположительно
отнесенная к молекулярному иону C_2^+ . Масс-спектро-
метрич. анализ и вращательная структура спектра изо-
топов $^{12}C_2^+$ и $^{13}C_2^+$ подтвердили принадлежность поло-
сы переходу $^2\Sigma^- \rightarrow ^2\Pi_u$ C_2^+ . Определены молекулярные
константы и обсуждается электронная структура со-
стояний. Библ. 12. В. Александров.

ф. 1972. 92

C₂⁺

ommuek 3279

1972

105833w New spectrum probably due to the C₂⁺ ion. Meinel, H. (Div. Phys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1972, 50(2), 158-64 (Eng). A new spectrum assocd. with diat. C was obsd. in absorption in a flash discharge at 2490 Å. This spectrum was identified as a ²Σ_g⁻ - ²Π_u transition indicating that the absorber must be a C₂ ion, either C₂⁺ or C₂⁻. From a discussion of the exptl. conditions, the mol. consts. and the electronic structure, it appears very likely that the carrier is C₂⁺.

M.N.

C.A. 1972. Pb. 18

C₂⁺

Оттиски 3279

1972

17 Б176. Новый спектр, отнесенный к иону C₂⁺.
Meinel H. A new spectrum probably due to the C₂⁺ ion.
«Can. J. Phys.», 1972, 50, № 2, 158—164 (англ., рез.
(франц.))

В импульсном разряде в смеси He—C₂H₂ обнаружена
полоса поглощения в области 2490А, связанная с двух-
атомным углеродом. Полоса отнесена к переходу ²Σ_g⁺—
—²π_u ионов C₂⁺ или C₂⁻. Анализ вращательной структу-
ры дал B''=1,659 см⁻¹, B'=1,648 см⁻¹. Продукты разря-
да изучались также масс-спектрометрически. В резуль-
тате обсуждения условий эксперимента, молек. постоян-
ных и данных об электронном строении сделан вывод,
что за спектр ответственен ион C₂⁺. Резюме

М.Н.

X. 1972. 17

C_2^+

1974

A.P.

Naeda K., Suzuki J.H.,
Koyama Y.,
Int. J. Mass. Spectrom. and
Ion Phys., 1974, 14, N3,
273-83.

($cu-C_2H_2^+$; III)

φ. 1975. N2.

51007.1841

TC, Ch, Ph

C₂²⁻

96201

1975

3377

Ahlrichs Reinhart, Hartree-Fock theory for
negative ions.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 34, N 3, 570-
574

(англ.)

0463 пик

443 445

REINHART

50703.7561

Ch, Ph, MGU, TC

41125

 C_2^+

1975

4123

Čársky P., Kuhn J., Zahradnik R. Semiempirical all-valence-electron MO calculations on the electronic spectra of linear radicals with degenerate ground states. "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 55, N 1-3, 120-130
(англ.) (см. СН, III)

377 378

0393

0401

пиз

ВИНИТИ

Ca^+

Chaikovskii E.F., 1975
et al

масс-спектр.
испарен.

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

all C^+ ; III;

50318.7219
Ch, Ph, TC, MGU

C²⁺ 40892

1975
4-8338

K p. N 50318.7218

Day Orville W., Smith Darwin W.,
Morrison Robert C.

Extension of Koopmans' theorem. II.
Accurate ionization energies from
correlated wavefunctions for closed-shell
atoms.

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 1, 115-119

(англ.) 0323 пчк

292 297 8 " 5

ВИНИТИ

C_2^+

omnuch 5771

1977

Muntross W.T., Jr.

Astrophys. J. Suppl. Ser.,
1977, 22, (4), 495-514.

(AH^+, γ)

Recd. H^+, III

Co⁺

[OM. 27412]

1977

Tarafdar S. P.,

J. Quant. Spectrosc. Ra-
diat. Transfer. 1977,
17 (4), 537-42.



Ca^{2+}
2

1979.

Петкина Н.Н., Ребане Т.Р.

расчет
пометки,
кривых

Оптика и спектроскопия,
1979, 46, № 454-459.

● (см. He_2^{2+} , III)

C_2^+
u.h.

Brena P.J., Peyerimhoff
S.D., Buenker R.J. —
J. Chem. Phys., 1980, 72,
p. 5437.

4)

C_2^+

(Ommuck 13408)

1981

кв. мех.
расчет

Gollisch H.,

J. Phys. B: Atom and
Mol. Phys., 1981, 14, N23,
4457 - 4467.

C_2^+

Оттиск 11790 1981

1 Б27. Теоретическое предсказание потенциальных кривых низколежащих состояний молекулярного иона C_2^+ . Petrongolo Carlo, Bruña Pablo J., Peygimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. Theoretical prediction of the potential curves for the lowestlying states of the C_2^+ molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 8, 4594—4602 (англ.)

$E_i, m.p., D_0$

Рассчитаны энергии электронных состояний молек. иона C_2^+ , коррелирующих с первым диссоциац. пределом $C(^3P) + C(^2P)$. Использовано приближение конфигурац. взаимодействия (КВ) с построением одно- и двукратно возбужденных конфигураций по отношению к выделенному набору исходных конфигурац. ф-ций состояния, число к-рых составляло от 7 до 16 в зависимости от симметрии электронного состояния. Применялась процедура отбора конфигураций по энергии с последующей экстраполяцией. Вводились поправки на высшие возбуждения по методу Давидсона. Базисный набор составлен из функций $9s5p2d$, сгруппированных в $5s3p1d$, на каждом центре, дополненных связевыми ф-циями $1s1p$ (всего 44 АО). Для 16 низших

А

(+1)

X, 1982, 19AB, N1

СА на обороте

дублетных и кватретных состояний рассчитаны потенциальные кривые (для межъядерных расстояний от 2 до 4 ат. ед.), для остальных состояний определены только вертикальные энергии возбуждения. Подтверждено, что основным является состояние симметрии $^4\Sigma_g^-$ с энергией диссоциации 5,78 эВ, а первое возбужденное состояние симметрии $^2\Pi_u$ расположено выше на 0,84 эВ (T_e). На основании теор. расчетов C_2^+ и C_2 сделано заключение, что эксперим. значение потенциала ионизации C_2 (12 эВ) следует отнести к переходу $^3\Pi_u \rightarrow ^2\Pi_u$, тогда как переход между основными состояниями трудно замерить экспериментально. Теор. результаты противоречат отнесению системы полюс Мейнеля при 4,98 эВ к переходу $^2\Sigma_g^- \rightarrow ^2\Pi_u$.

А. В. Немухин

$C_2 (g)$

ВЛОБ
ону

C_2^+

Оттиск 11790

1981

 $E_i, D_0;$

12 Д60. Теоретическое предсказание для потенциальных кривых низлежащих состояний молекулярного иона C_2^+ . Theoretical prediction of the potential curves for the low-lying states of the C_2^+ molecular ion. Petrongolo Carlo, Bruna Pablo J., Peyserimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 8, 4594—4602 (англ.).

Методом конфигурационного взаимодействия с учетом конфигураций, соответствующих двукратному возбуждению, исследованы все электронные состояния иона C_2^+ , диссоциирующие на $C(^3P_g) + C(^2P_u)$. Для 16 состояний рассчитаны потенц. кривые в интервале межатомного расстояния от 2,0 до 4,0 а. е. Для остальных 8 состояний получены значения вертикальной энергии возбуждения T . В соответствии с более ранними расчетами C_2^+ основное состояние оказалось симметри $^4\Sigma_g^-$, а первое возбужденное — $^2\Pi_u$ с соответствующим

14
(+1)

Ф. 1981, 18, N 12.

 C_2 (м.п., Т)

ющим значением T , равным 0,84 эВ. Расчеты показали, что измеренный потенциал ионизации молекулы C_2 , равный примерно 12 эВ, должен соответствовать переходу $a^3\Pi_u(C_2) \rightarrow a^2\Pi_u(C_2^+)$, сопровождающемуся отрывом σ_g электрона и соответствующему принципу Франка—Кондона. Ионизация Π_u электрона в процессе $a^3\Pi_u \rightarrow X^4\Sigma_g^-$ требует 11,5 эВ. Отмечается, что полученная ранее на основании измеренных значений потенциала ионизации C_2 величина энергии диссоциации C_2^+ соответствует не основному $X^4\Sigma_g^-$, а первому возбужденному $a^2\Pi_u$ -состоянию. Найдено, что даже при средних расстояниях, вследствие почти вырожденности Π_u , Π_g - и $3\sigma_g$ -орбиталей, потенц. кривые лежат очень плотно и ниже 2 эВ, что приводит к сильному взаимодействию состояний и к сложной форме кривых из-за многочисленных квазипересечений. Отмечается также, что эксперим. отнесение Майнеля системы полос вблизи 4,98 эВ переходу $^2\Sigma_g^- \leftarrow ^2\Pi_u$ в C_2^+ не подтверждается полученными данными.

А. Зембеков.

C_2^+

Ommuck 11790

1981

Kb. mex.
pacer

M. M.

Cuenca

Meinel

$2\Sigma_g^- \leftarrow 2\Pi$
mp 4.98 eV

C.A. 1981, 24, N24

✓ 94: 197957n Theoretical prediction of the potential curves for the lowest-lying states of the diatomic carbon(1+) molecular ion. Petrongolo, Carlo; Bruna, Pablo J.; Peyerimhoff, Sigrid D.; Buenker, Robert J. (Univ. Bonn, 5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(8), 4594-602 (Eng). Ab initio MRD-CI (multiref. double excitation) potential curves were calcd. for C_2^+ in its first 16 electronic states and vertical transition energies T_v were computed for a no. of higher-lying species, all of which correlate with the first dissocn. limit $C(^3P_g) + Cj(^2P_u)$. The ground state of this mol. ion is $X\ ^4\Sigma_g^-$ while the first excited state is $1\ ^2\Pi_u$, with a calcd. T_0 value of 0.84 eV. On the basis of this work, the C_2 ionization potential value known exptl. is ascribed to the $a\ ^3\Pi_u \rightarrow 1\ ^2\Pi_u$ process while the transition involving both ground states appears to be difficult to detect exptl. A comparison with previous calcs. shows very large discrepancies, both in the transition energies themselves and in the ordering of these states. The assignment for the H. Meinel (1972) exptl. band system at 4.98 eV as a $2\Sigma_g^- \leftarrow 2\Pi_u$ transition in C_2^+ is not supported by the present study.

C_2^+ C. Petrongolo, P. J. Bruna, S. D. Peyezimhoff 1981
R. J. Buenker

log 1007.

J. Chem. Phys., 1981, 74, 4594

Теоретический расчёт потенциальных кривых
низколежащих состояний C_2^+ .

Новые построения $\rightarrow$
и энергии
возбуждённых
удовольно отличаются от принятых

обз. 11790
-см. 11790

	Te	We	
$X^1\Sigma_g^-$	0	1360	1360
$2\Pi_u$	6800	1630	1630
$4\Pi_g$	11000	1840	1840
$2\Delta_g$	11800	1230	1230
$2\Sigma_g^-$	14000	1265	1265
$2\Sigma_g^+$	15000	1090	1090
$2\Pi_u$	16500	1360	1360
$4\Sigma_g^-$	20200	1470	1470
$2\Pi_g$	24800	1660	1660
$2\Sigma_u^+$	30800	2330	2330

Ca^+
 Ca

[Ommuck 13368]

1982

Mayaishi T., Iwata S.,
et al.

спектр,
кв. мех.
расши.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1982, 15, N1,

● 79-92:

C_2^+

1982

Kühnel W., Gey E.,
et al.

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

ΔH_f ,
теорет.
структ.

● (сер. C_2 ; III)

C₂⁺

1983

Bruna Pablo J., Mirsch Gerhard,
et al.

J. u. R.,
Ei;

Mol. Ions: Geom. and Electron.
Struct. Proc. NATO Adv. Study
Inst., Isle of Kos, Sept. 30-Oct.
10, 1980. New York; London,
1983, 309-354.

(c.c. SH₂⁺; III)

C_2^{+}

Ion. 17658

1983.

Bruna P. F., Peyerimhoff S. D.,

теор.
расчет

Bull. Soc. Chim. Belg., 1983,
92, 16-7, 525-546.

Ca^+

Om. 16886

1983

Farnell L., Pople J. A.,
et al.

ab initio
pacrui

J. Phys. Chem., 1983,
87, N1, 79-82.

C_2^+
 C_2D^+

O'Keefe A. Deraï R.,
Bowers M. P.

1984

(Chem) Chem. Phys., 1984, 91 (1), 161-6

The first experimental observation
of electronic transitions in carbon
(C_2^+) and ethynyl (C_2D^+) ions.

↓
 $1\Sigma_g^- - X^4\Sigma_g^+$

High resolved. translational
energy spectroscopy (laser) was
carried out on 8-kV beams

CA 237.78 OW, 101, 1984

of C_2^+ and C_2D^+ .

1984

3 Л215. Первое экспериментальное наблюдение электронных переходов в C_2^+ и C_2D^+ . The first experimental observation of electronic transitions in C_2^+ and C_2D^+ . O'Keefe Anthony, Deraï Renée, Bowers Michael T. «Chem. Phys.», 1984, 91, № 1, 161—166 (англ.)

Методом спектроскопии кинетич. энергии ионов в пучке (8 кэВ), рассеянном на атомах He, с высоким разрешением (0,1 эВ) исследованы электронные переходы в ионах C_2^+ и C_2D^+ . Для обоих ионов обнаружены и идентифицированы электронные переходы различной мультиплетности. Для иона C_2^+ идентифицирована, в частности, полоса $^4\Sigma_u^- \rightarrow X^4\Sigma_g^-$, которая может быть использована для регистрации C_2^+ в межзвездной среде. Положение и ширина двух электронных переходов, обнаруженных у иона C_2D^+ , хорошо согласуются с предсказаниями теоретич. расчетов. Последнее может рассматриваться как подтверждение теоретич. вывода о том, что основным состоянием иона C_2D^+ является состояние $^3\Pi$.

В. С. Иванов

⊗
⊕

ср. 1985, 18, №3

Li, осн. сост.

C_2D^+

C_2^+

C₂⁺

[OM. 20239]

1984

5 Б1179. Первое экспериментальное наблюдение электронных переходов в C_2^+ и C_2D^+ . The first experimental observation of electronic transitions in C_2^+ and C_2D^+ . O'Keefe Anthony, Deraï Renée, Bowers Michael T. «Chem. Phys.», 1984, 91, № 1, 161—166 (англ.)

Методом спектроскопии поступательной энергии высокого разрешения исследованы электронные переходы в ионах C_2^+ и C_2D^+ . Приблизительно моноэнергетический (8 кэВ) пучок разделенных по массе ионов пропусклся через камеру заполненную нейтр. газом. При столкновениях, в результате переходов в ионах или молекулах (атомах) мишени происходили изменения в энергии ионного пучка, к-рые регистрировались с помощью электростатич. анализатора. Ионы C_2^+ получались при действии электронного удара на: I— C_2N_2 ; II— C_2H_4 , C_3H_6 и C_2D_2 ; ионы C_2D^+ —при действии электронного удара на C_2D_2 . Положение и отнесение (на основании результатов неэмпирических расчетов)

М.П., 2i

4

X. 1985, 19, N5

пиков: спектре C_2^+ (I): $0,5-2,0$ эВ $-1^2\Pi_u \rightarrow 2^1\Delta_g, 2^1\Sigma_g^-,$
 $2^1\Sigma_g^+; 2^2\Pi_u, 2,3$ эВ $-1^2\Pi_u \rightarrow 1^2\Pi_g; 3,0-4,0$ эВ $-1^2\Pi_u \rightarrow$
 $\rightarrow 1^2\Sigma^+, 1^2\Delta_u; 5,0$ эВ $-1^2\Pi_u \rightarrow 1^2\Sigma_u^-; 5,8$ эВ $-1^2\Pi_u (?) \rightarrow$
 $\rightarrow 2^2\Pi_g$. В спектре C_2^+ (II) др. пики интерпретированы
 как квартетные переходы: $0,5-2,0$ эВ $-1^4\Pi_g \rightarrow 1^4\Sigma_u^-,$
 $X^4\Sigma_g^- - 1^4\Pi_g, 2,50$ эВ $-X^4\Sigma_g^- - 1^4\Sigma_u^-, 5,0$ эВ $-1^4\Pi_g -$
 $1^4\Pi_u$. В спектре C_2D^+ наблюдались два широких пика
 при ~ 1 эВ (предварительное отнесение $^3\Pi \rightarrow ^3\Sigma^-$) и
 $\sim 3,4$ эВ (предварительное отнесение $^1\Delta - ^1\Sigma^+$).

В. М. Ковба

С (ионн)

1986

8 Д25. Численные расчеты энергетических и радиационных характеристик ионов углерода методом функционала плотности. Бодашко П. Г., Боровский А. В., Запрягаев С. А., Коробкин В. В., Могилев А. В., Файнштейн А. Г. «Ин-т общ. физ. АН СССР. Препр.», 1986, № 47, 36 с.

теор. расчёт

ср. 1986, 18, N 12

C_2^+

1986

потенс крив.
низких 10
состояний

/ 106: 92652x Multireference CI calculations of radiative transition probabilities between low lying quartet states of the diatomic carbon monopositive ion. Rosmus, P.; Werner, H. J.; Reinsch, E. A.; Larsson, M. (Fachbereich Chem., Univ. Frankfurt, D-6000 Frankfurt/Main, Fed. Rep. Ger.). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1986, 41(3-4), 289-96 (Eng). Potential energy functions for the 10 lowest electronic states of the C_2^+ ion were calcd. from correlated CASSCF and MC-CI electronic wave functions and used for derivation of the spectroscopic consts. The predicted values are expected to be accurate within 0.01 Å for R_e , 20-30 cm^{-1} for ω_e , and 0.05-0.1 eV for T_e . For the 3 lowest quartet states, the electronic transition moment functions were also calcd. For the transitions among these states, radiative lifetimes and absorption oscillator strengths are given which should be accurate within about 15%.

с. А. 1987, 106, № 12

C_2^{K+}

Wells B.H., Wilson S.

1986

Расчет
мезо-
элемент.
электро-
состав.

J. Phys. B: Atom.
and Mol. Phys., 1986,
19, N1, 17-32.

(ср. H_2^+ ; III)

C₂⁺

CM 28693

1987

6 Л237. Электронные спектры поглощения C₂⁺:
: B⁴Σ_u ← X⁴Σ_g⁻. An electronic absorption spectrum of
C₂⁺: B⁴Σ_u → X⁴Σ_g⁻. Forney Daniel, Althaus Hart-
wig, Maier John P. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 26,
6458—6461 (англ.)

При т-ре 5 К исследованы спектры поглощения и
люминесценции в области 435—560 нм молекулярных
центров C₂⁺ (I), изолированных в матрицах твердо-
го Ne. Центры I создавались с помощью фотолиза и
последующей фотоионизации излучением из области
вакуумного УФ молекул C₂H₂, C₂D₂, C₂N₂, C₂HF₃,
C₂HCl, C₂OCl, C₂Cl₂, C₂HBr. Спектры содержат серии
электронно-колебательных линий, сопровождаемых фо-
нонными крыльями и отнесенных к переходу B⁴Σ_u ←
→ X⁴Σ_g⁻ в центрах I. Исследовано влияние изотопич.
замещения по углероду на положение чисто электрон-
ных линий и колебательные частоты. На основании
полученных данных определены параметры колебатель-
ного потенциала центров I. Библ. 20. К. Э. М.

М.П.

Ф. 1988, 18, № 6

C₂⁺

0M.28693

1987

12 B1182. Электронный спектр поглощения C₂⁺.
·B⁴Σ_u⁻ ← X⁴Σ_g⁻. An electronic absorption spectrum of
C₂⁺. ·B⁴Σ_g⁻. Forney Daniel, Althaus Hart-
wig, Maier John P. «J. phys. chem.», 1987, 91, № 26,
6458—6461 (англ.)

Измерены спектры поглощения и лазерной флуорес-
ценции продуктов вакуумного УФ фотолиза и фото-
ионизации ацетилена, дейтероацетилена и хлорацетиле-
на в Ne матрице (T=5 K). В видимом диапазоне
идентифицированы полосы 0—0, 1←0, 2←0 и 1→1
перехода B⁴Σ_u⁻—X⁴Σ_g⁻ молек. ионов ¹²C₂⁺ (соотв.,
505,8; 470,3; 439,8; 502,4 нм) и ¹²C¹³C⁺ (полосы 0—0
и 1—0, соотв., 505,8 и 471,6 нм). В качестве источни-
ков при фотолизе использовались: α — лаймановское
излучение водорода, 121,6 нм, излучение XeI, 147,0 нм.
или и то и другое одновременно. Последующая фото-
ионизация образующихся фотофрагментов осуществля-

M.A.

X. 1988, 19, N 12

лась излучением NeI, 73,6 нм. Рассчитаны молек. постоянные C_2^+ : $\nu_{00}=19\,765$, $\omega_e'=1507$, $\omega_e'x_e'=8$, $\Delta G''_{1/2}=1359\text{ см}^{-1}$. В том же диапазоне наблюдались также полосы 0—0, 1—0 и 2—0 системы $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+ + C_2^-$. Наиболее интенсивные спектры получены в случае хлорацетилена. В. М. Ковба

C₂⁺ [PM 28693] *copying*

1987

108: 13275. An electronic absorption spectrum of carbon ion (C₂⁺): B⁴Σ_u⁻ ← X⁴Σ_g⁻. Forney, Daniel; Althaus, Hartwig; Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Phys. Chem.* 1987, 91(26), 6458-61 (Eng). The B⁴Σ_u⁻ ← X⁴Σ_g⁻ electronic transition of C₂⁺ in a 5 K Ne matrix was identified. The 0-0, 1-0, and 2-0 bands are obsd. in absorption when ¹²C₂⁺ and ¹³C₂⁺ are produced in the matrix by photolysis followed by photoionization of various precursors, the most favorable one being chloroacetylene. The carrier and symmetry of the transition are assigned on the basis of spectroscopic and chem. evidence and by comparison to recent calcs. The 1-1 band was also obsd. in the wavelength-dispersed fluorescence spectrum of C₂⁺, subsequent to laser excitation of the 1-0 absorption transition. The derived spectroscopic consts. (in Ne matrix) are $\nu_{00} = 19,765$ (4) cm⁻¹, $\omega_e' = 1507$ (4) cm⁻¹, $\omega_e x_e' = 8$ (4) cm⁻¹, and $\nu''(1-0) = 1359$ (6) cm⁻¹.

(B⁴Σ_u⁻ - X⁴Σ_g⁻)
M.N.

C.A. 1988, 108, N2

C₂⁺

(DM-28864)

1987

Hirsch G., Buerker R. J.,

U.N.,
neop.
pavem

J. Chem. Phys., 1987,
87, N10, 6004-6011.

C_2^+

1987

Kraemer Wolfgang P.
Roos Björn O.

u. n.

Chem. Phys., 1987,
118, N3, 345-355.

( C_2 ; III)

Ca^+

[Om. 25777]

1987

O'Keefe A., McElvany S.,
et al.,

Chem. Phys., 1987, 111, N2,
327-338.

Ion-molecule chemistry
of Ca^+ : Evidence for the

production of excited state
dicarbon cation.

C_2^{2+}

10т. 26574

1987

Темкина М.М., Ребане Т.Р.,

Расчет
потен-
циальн.
кривых

Оптика и спектроско-
пия, 1987, 62, №3,
514-518.

C₂⁺ (with C₃⁻) (Om. 28270) 1987

108: 46181m Matrix studies of the products of laser vaporization of graphite. Rasanen, M.; Liu, J. Y.; Dzuga, T. P.; Bondybey, V. E. (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). Chem. Phys. Lett. 1987, 142(5), 308-12 (Eng). C₂⁻ and other ions were produced by laser vaporization of graphite and studied in a matrix. A new spectrum characterized by $T_c = 19732 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_c = 1507 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$, and $\omega''_c = 1360 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ was detected and assigned to C₂⁺ or, less probably, to C₃⁻. An efficient vibrational energy transfer between C₂ and C₂⁻ was obsd.

Значит
есть
соединение.

C.A. 1988, 108, N 6

C_2^+

OM-28741

1987

7 Л488. Спектр возбуждаемой лазером флуоресценции $\tilde{B}^4\Sigma_u^- - \tilde{X}^4\Sigma_g^-$ иона C_2^+ . $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ laser excitation spectrum of C_2^+ . Rösslein M., Wyttenbach M., Maier J. P. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6770—6772 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера получены с разрешенной вращательной структурой спектры возбуждения флуоресценции $\tilde{B}^4\Sigma_u^- - \tilde{X}^4\Sigma_g^-$ ионов $^{12}C_2^+$ и $^{13}C_2^+$ из разряда. Проведено отнесение вращательной структуры различных электронно-колебательных полос и вычислены молекулярные постоянные состояний $^{12}C_2^+$ $\tilde{B}^4\Sigma_u^-$ и $\tilde{X}^4\Sigma_g^-$. Обнаружены возмущения ряда вращательных уровней состояния $\tilde{B}^4\Sigma_u^-$. Согласно проведенным оценкам время жизни состояния $\tilde{B}^4\Sigma_u^-$ составляет 100—200 нс. Е. Н. Т.

(М.П.)

Ф. 1988, 18, № 7

C₂⁺

0m 28741

1987

13 Б1303. Спектр лазерного возбуждения $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^- - C_2^+$. $\tilde{B}^4\Sigma_u^- - \tilde{X}^4\Sigma_g^-$ laser excitation spectrum of C_2^+ . Rösslein M., Wyttenbach M., Maier J. P. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6770—6772 (англ.)

Методом спектроскопии лазерного возбуждения исследован переход $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ ($v', v'' \leq 3$, обл. 500 нм) молекул $^{12}C_2^+$ и $^{13}C_2^+$. Измерена и проанализирована вращат. структура полос 1—0, 0—0 и 0—1. Ионы C_2^+ получались при пеннинговской ионизации молекул ацетилена или дейтероацетилена метастабильными атомами He. Во всех полосах отмечены возмущения вращат. уровней верхнего состояния. Получены след. значения молек. постоянных $^{12}C_2^+$ (в см⁻¹): состояние $X^4\Sigma_g^- - \omega_e = 1351,5$, $\omega_e x_e = 12,1$, $B_0 = 1,417$, $B_1 = 1,401$ ($R_0 = 1,408$ А); состояние $B^4\Sigma_u^- - T_e = 19652,9$, $\omega_e = 1507,0$, $\omega_e x_e = 12,3$, $B_0 = 1,537$, $B_1 = 1,519$ ($R_0 = 1,352$ А).

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1988, 19, N 13

C_2^+

Om. 28741

1987

108: 65040f $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ laser excitation spectrum of carbon diatomic monocation. Roesslein, Matthias; Wyttenbach, Martin; Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4057 Basel, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(11), 6770-2 (Eng). The $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ transition of C_2^+ was obsd. in the gas phase using laser excitation spectroscopy; its rotational structure was resolved and mol. consts. were calcd. The anal. of the vibronic bands, using also ^{13}C isotopes, proved the identity of the species and the symmetry of the transition. The results open the way for identifying C_2^+ in various media.

$(B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-)$

c.A. 1988, 108, N8

C_2^+

(OM 32 752)

1988

111: 204463y Electronic spectroscopy of cations at reduced temperatures. Danis, Paul O.; Evard, Dwight D.; Forney, Daniel; Roesslein, Matthias; Wyttenbach, Thomas; Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 1988, 86(Spectrosc. Low Temp.), 85-94 (Eng). The application of the techniques of matrix-absorption, laser-excitation and laser-absorption spectroscopies of mass-selected ion beams to the study of small open-shell cations at reduced temps. is described. The spectroscopic characterization of the $B^4\Sigma_u^- \leftarrow X^4\Sigma_g^-$ transition of C_2^+ was carried out 1st in a Ne matrix, then at high-resoln. using laser-excitation spectroscopy. Two-photon ion-absorption experiments which are being developed to characterize cations spectroscopically were demonstrated on N_2O^+ . The instrument used is a triple-quadrupole mass spectrometer designed to select primary ions, constrain them for photon absorption and to detect fragment ions.

$B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$

C.A. 1989, 111, N22

C_2^+

1988

7 Б1308. Генерация и изоляция ион-радикалов в неоновых матрицах при 4 К. Исследования методом ЭПР F_2CO^+ и C_2^+ . Radical-ion generation and trapping in neon matrices at 4 K. Electron spin resonance investigations of F_2CO^+ and C_2^+ / Knight L. B., Ott J. // Faraday Discuss. Chem. Soc.— 1988.— № 86.— С. 71—83.— Англ.

Изучены спектры ЭПР ионов C_2^+ и F_2CO^+ , изолированных в матрицах из Ne при 4 К. Ионы C_2^+ генерировали посредством фотоэлектронной ионизации молекул C_2 , образующихся в газовой фазе при лазерном испарении графитовых мишеней. Ионы F_2CO^+ получали двумя способами: 1) фотоионизацией газ. F_2CO с последующей изоляцией с матрицей или 2) со-конденсацией молекул F_2CO и атомов Na с избытком N_2 или Ar. Выполнен анализ спектров ЭПР и подтвержден вывод, полученный на основании данных электронной спектроскопии, что основным состоянием

М.П.

(11)

X. 1990, N 7

F_2CO^+

ионов C_2^+ является состояние $^4\Sigma_g^-$. Приняты след. значения параметров $^{13}C_2^+$: $D=3668(3)$ МГц, $g_{\perp}=2,0018(5)$, $g_{\parallel}=2,0023(5)$, $A_{\parallel}=99,4(8)$, $A_{\perp}=95,2$ МГц. Показано, что в анионе F_2CO^- атом С является центральным ($A_{\text{изо}}=715$ МГц), а симметрия аниона отличается от C_{2v} , что приводит к усложнению спектра из-за неэквивалентности ядер ^{19}F . Определенные значения элементов тензоров A для ^{19}F и ^{13}C согласуются с рассчитанными теоретически. Выполнен предварит. анализ спектра ЭПР иона F_2CO^+ . С. Б. Осин

ния
ща: r

2+

От 30/79

1988

24 Б1448. Изучение методом ЭПР $^{12}\text{C}_2^+$ и $^{13}\text{C}_2^+$ в неоновой матрице, подтверждение $^4\Sigma_g^-$ основного электронного состояния. Neon matrix ESR investigation of $^{12}\text{C}_2^+$ and $^{13}\text{C}_2^+$: confirmation of a $^4\Sigma_g^-$ ground electronic state. Knight L. B., Jr., Cobranchi S. T., Earl E. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 12, 7348—7356 (англ.)

М.А.

Катион-радикалы C_2^+ и $^{13}\text{C}_2^+$ получены путем фотоионизации газ. C_2 , образующегося при лазерном испарении графитовой мишени и послед. осаждения в неоновой матрице при 4 К. Высокотемпературная печь позволяет проводить отжиг графитовой мишени при 2100 К в высоком вакууме и послед. лазерное испарение без доступа атмосферного воздуха, что сильно снижает кол-во фоновых радикалов, образующихся из адсорбированных графитом примесей. На основе независимого анализа спектров ЭПР C_2^+ и $^{13}\text{C}_2^+$ ($S=3/2$), определения тензора СТВ с ^{13}C , влияния фотоотжига видимым светом и особенностей эксперим. получения

Х. 1988, № 24

радикалов установлено, что сигналы ЭПР принадлежат изолированным катион-радикалам C_2^+ и $^{13}C_2^+$ в основном электронном состоянии $^4\Sigma_g^-$. Определены магнито-резонансные параметры $^{13}C_2^+$ в неоновой матрице: $D=3668$, $|A_{||}|=99,4$, $|A_{\perp}|=95,2$ МГц, $g_{||}=2,0023$, $g_{\perp}=2,0018$. В спектрах ЭПР $^{13}C_2^+$ обнаружены интенсивные линии дополнит. поглощения с необычной СТС и запрещенные переходы (с $\Delta M_s > 1$) в низких магн. полях.

Е. Н. Дегтярев

C_2^+

Om. 29627

1988

№ 10 Л203. Электронный спектр C_2^+ ($B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$).
The $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ electronic spectrum of C_2^+ . Maier
John P., Rösslein Matthias. «J. Chem. Phys.», 1988,
88, № 8, 4614—4620 (англ.)

Методом индуцированной лазером флуоресценции ис-
следована система полос $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ иона C_2^+ . Вы-
полнен вращательный анализ 10 колебательных полос
иона $^{12}C_2^+(v', v'' \leq 13)$ и семи полос иона
 $^{13}C_2^+(v', v'' \leq 2)$. Определены спектроскопич. постоян-
ные T_e , B_e , ω_e , $\omega_e x_e$, α_e для состояний X и B обеих
изотопич. молекул. Для ряда уровней $C_2^+(B^4\Sigma_u^-)$ из-
мерены времена жизни. Определена сила осциллятора
для перехода $B-X$, $f_{0-0} = 0,023$ (3). Библ. 32.
В. С. Иванов

М.П.

ф. 1988, 18, N 10

62

1988

Om. 29627

109: 159328d The $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ electronic spectrum of carbon diatomic monocation. Maier, John P.; Roesslein, Matthias (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(8), 4614-20 (Eng). The $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ electronic transition of C_2^+ was studied in the gas phase by laser excitation spectroscopy. The rotational anal. of 10 vibronic bands of $^{12}C_2^+$ ($v', v'' \leq 3$) and 7 of $^{13}C_2^+$ ($v', v'' \leq 2$) was carried out. The spectroscopic consts. T_e , B_e , α_e , ω_e , $\omega_e x_e$ were obtained for $^{12}C_2^+$ and $^{13}C_2^+$ in the $X^4\Sigma_g^-$ and $B^4\Sigma_u^-$ states. The lifetimes of C_2^+ in selected levels of the $B^4\Sigma_u^-$ state were measured, and the oscillator strength $f_{0-0} = 0.023$ was derived.

$(B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-)$

C.A. 1988, 109, N 18

C⁺
2

OM 29627 1988

19 Б1195. Электронный спектр $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ C_2^+ .
The $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ electronic spectrum of C_2^+ . Ma-
ier J. P., Rösslein M. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 8,
4614—4620 (англ.)

С использованием возбуждения при помощи лазер-
ного излучения в обл. частот $17\,100 - 22\,800\text{ см}^{-1}$ с
разрешением $0,04 - 0,1\text{ см}^{-1}$ измерены спектры возбуж-
дения электронно-колебательных полос (ЭКП) $^{12}C_2^+$
($v', v'' \leq 3$) и 7 ЭКП $^{13}C_2^+$ ($v', v'' \leq 2$) электронного
перехода $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$. Из анализа полученных спект-
ров с учетом колебательно-вращат. взаимодействия и
ангармонизма определен полный набор молекулярных
постоянных для двух ионов в состояниях $X^4\Sigma_g^-$ и
 $B^4\Sigma_u^-$. По спаду сигнала флуоресценции для избран-
ных вращат. уровней определены времена жизни для
состояния $B^4\Sigma_u^-$ ($v' \leq 2$) C_2^+ и силы осцилляторов для
перехода $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ ($v' \leq 2, v'' \leq 3$) C_2^+ . Полученные
результаты представляют интерес для оптич. исследо-
ваний хвостов комет, межзвездной среды, плазмы и
пламен.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1988, 19, N 19.

C_2^+

Om 32939

1989

111: 243132j High-resolution spectrum of the $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ electronic system of diatomic carbon molecular ion($1+$) using fast-ion beam-laser spectroscopy. Carie, M.; Alikacem, A.; Larzilliere, M. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Claude Bernard Lyon I, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1989, 40(6), 3450-2 (Eng). A highly resolved spectrum is given of the transitions of C_2^+ . To avoid the difficulty of the observation of the $B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$ emission spectrum of C_2^+ by conventional methods, a technique was used based on fast-ion-beam laser spectroscopy which presents a very-high-resoln. performance (± 120 MHz). Spin-spin and spin-rotation coupling parameters were detd. for the 1st time for both involved states.

$B^4\Sigma_u^- - X^4\Sigma_g^-$

M.N.

C.A. 1989, 111, N26

C⁺₂

1989

III:243191c A spectroscopic study of the $\tilde{X}^4\Sigma_g^-$ ($v = 4-7$) levels of diatomic carbon cation (C_2^+) using the stimulated emission pumping technique. Celii, F. G.; Maier, J. P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, Basel, Switz.). *AIP Conf. Proc.* 1988 (Pub. 1989). 191(Adv. Laser Sci.-4), 472-4 (Eng). Stimulated emission pumping spectroscopy was used to characterize vibrationally excited levels ($v = 4-6$) of the $\tilde{X}^4\Sigma_g^-$ ground electronic state of C_2^+ . Transitions were detected by decreased total fluorescence from laser-excited $B^4\Sigma_u^-$ levels. To obtain the 2-photon spectra a modulation scheme which discriminated against 1-photon fluorescence signals was used.

$X^4\Sigma_g^-$

($v = 4-7$)

u.n.

C.A. 1989, 111, N 26

C_2^+

(Om 32216)

1989

110: 124267b Absorption spectroscopy of mass-selected ions in neon matrixes. Forney, Daniel; Jakobi, Michael; Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(1), 600-1 (Eng). A technique is described for obtaining spectral information on mass-selected ions embedded in a Ne matrix by direct absorption spectroscopy. The gas phase method of ion prodn. and mass selection with matrix isolation technique are combined. Thus, Ne matrixes contg. the ion of choice can be prepd. and then subjected to already available spectroscopic methods. In this case it is the measurement of the electronic absorption spectrum of the ion. The 220-1200 nm wavelength region can be scanned to locate the transition and this in turn provides the necessary information for the application of high resolu. laser techniques in the gas phase. The potential of the technique is illustrated by results given for C_2^+ , $C_2N_2^+$ and $Cl_2Cl_2^+$ ions.

спектр в
Ne матрице

(+2) 



c.A. 1989, 110, N 14

C_2^+

(DM 34168)

1989

Weltner W., Jr., Van Zee R. J.,

Chem. Rev. 1989, 89, N8,
1713-1747.

и.п.,
теорет.

и экперим.
данные

Carbon Molecules,
Ions, ● and Clusters.

G_2^+

[Om. 35084]

1990

Celi F.F., Maier J.P.,

u.h.,

$\tilde{X}^{4-}_{2g}$
cccm.

g. Opt. loc. Amer. B 1990,
Z, N 9, 1944-1949

Stimulated ● - emission

pumping spectroscopy of molecular ions.

C_2^+

(Am 33772)

1990

112: 225973a A spectroscopic study of the $\bar{X}^4\Sigma_g^-(v = 4-6)$ levels of the carbon diatomic monocation using the stimulated emission pumping technique. Celii, F. G.; Maier, J. P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 166(5-6), 517-22 (Eng). Stimulated emission pumping (SEP) spectroscopy was used to characterize vibrationally excited levels ($v = 4-6$) of the $\bar{X}^4\Sigma_g^-$ ground electronic state of C_2^+ . Rotationally resolved $B^4\Sigma_u^- \rightarrow \bar{X}^4\Sigma_g^-$ transitions were detected by observation of a decrease in the total laser-excited fluorescence (LEF) signal from the $B^4\Sigma_u^- (v' = 2)$ level. In order to obtain the SEP spectra, a modulation scheme which discriminated against one-photon fluorescence signals was successfully employed. The SEP line positions were used together with those from a previous LEF study to improve the mol. consts. of the $\bar{X}^4\Sigma_g^-$ state of C_2^+ .

$B^4\Sigma_u^- - \bar{X}^4\Sigma_g^-$

M.A. 6 $\bar{X}^4\Sigma_g^-$

C.A. 1990, 112, N 24

C_2^+

1990

Klobukowski M.,
Dingle T. W. et al.

раствор
и.н.,
Ti.

Theor. Chim. Acta 1990,
77(3), 191-205.

(see  C_2 ; III)

C_2^+

1990

$B^2\Sigma_u - X^2\Sigma_g$

115: 122519q Spectroscopic characterization of cations via their electronic transitions. Maier, John P. (Inst. Phys. Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *Int. Rev. Phys. Chem.* 1990, 9(3), 231-306 (Eng). A review with 87 refs. is given on recent studies and developments undertaken aimed at spectral characterization of open-shell cations. The analyses of the rotational structure in the laser excitation spectra of the halocyanide and diacetylene cations have enabled their complete r_e geometries to be inferred. These should serve as a benchmark for calcs. in open-shell cations contg. either a heavy atom or many atoms. A new direction pursued aims at spectral characterization of fragment ions. The first success is the identification of the $B^4\Sigma_u - X^4\Sigma_g^-$ transition of C_2^+ , which was obsd. initially in absorption in a 5 K Ne matrix and then in the gas phase by laser excitation. The stimulated emission pumping approach was also used to probe higher vibrational levels of the $X^4\Sigma_g^-$ state. In the studies of new ions by laser methods, 2 obstacles are encountered. One concerns the uncertainty in the energy region of the transitions sought and the other is the identification of the carrier. Methods are discussed to provide such information.

C.A. 1991, 115, ~12

C_2^+

1990

Weltner W., Jr., Van Zee R. J.

J. Mol. Struct. 1990,
222 (1-2), 201-7.

примеры
в молеку-
лах,
однако

(сер.  C_2 ; iii)

C_2^+
 C_2
 C_2^{2+}
 C_2

(Un. 35549, 35550)

1991

Bruna P.F., Wright J.S.,

J. Mol. Struct. - Theochem.

1991, 280, 213-218.

Doubly excited states of C_2 ,
 C_2^+ and C_2^{2+} .

C_2^{2+}

PM-35549, 35550

1991

Buena P.F., Wright Y.S.,

J. Mol. Struct. Theochem.
1991, 280, 213-218.

Doubly excited $\bullet$ states of
 C_2 , C_2^+ and C_2^{2+} .

C_2^+

[OM. 36455]

1991

Sowa M.B., Mintz P., et al,

J. Chem. Phys. 1991, 95, N6,
4719-4720.

Dissociation energies for carbon
cluster ions
(C_{2-15}^+): A

A system where photodissociation is misleading.

C_2^+

1992

Bruna P. J., Wright
J. S.

J. Phys. Chem. 1992.

ser. n. 96, N.Y.C. 1630-1640.

(cell  C_2 ; III)

C_2^+
 C_2

1992

McLean A.D.; Liu, B.; et al.,

Ф-мел
пометки. J. Chem. Phys. 1992, 97(11),
8459-64.

Жерни,

Ge, We,

I, De, расем

(all. B_2^+ ; III)

C_2^+

1992

17 Б1015. Расчеты молекулы C_2 и молекулярных ионов C_2^+ и C_2^- методом связанных кластеров. Coupled-cluster calculations on the C_2 molecule and the C_2^+ and C_2^- molecular ions /Watts John D., Bartlett Rodney J. //J. Chem. Phys. —1992. —96, № 8. —С. 6073—6084. —Англ.

Различными вариантами метода связанных кластеров с учетом вплоть до трехкратных возбуждений рассчитаны энергии низших электронных состояний молекулы C_2 и ионов C_2^+ и C_2^- . Рассмотрены две группы базисов: на основе двухэкспонентного набора с поляризац. АО и базисы Даннинга для корреляц. подходов с включением

М.П.

④ ④

Х. 1993, № 17

ф-ций вплоть до g-типа. Определены энергии и молек. постоянные r_e , ω_e , D_e , T_e для связанных состояний. Отмечено, что отклонения от эксперим. величин находятся в пределах 0,002 Å для r_e , 20 см⁻¹ для ω_e и 0,1 эВ для D_e . Для энергий возбуждения результаты не столь хороши, как для других св-в. При расчетах сродства к электрону молекулы C₂ отмечено существенное влияние корреляц. вкладов, в частности, роль трехкратных возбуждений. Различие между рассчитанным и эксперим. значением сродства в наилучшем варианте составляет 0,3 эВ. Для потенциалов ионизации C₂ результаты лучше, расхождения с эксперим. величинами около 0,2 эВ. А. В. Н.

C_2^+

1993

122: 145824u Study of laser-induced fluorescence spectra of C_2^+ and N_2^+ by the FIBLAS method. Boudjarane, Khaled (Univ. Laval (Canada), Can.). 1993. 243 pp. (Eng). Avail. NLC Order No. DANN85619. From *Diss. Abstr. Int. B*, 1994, 55(3), 968.

лазерное
флуорес.

(+) $\boxtimes$



N_2^+

C. A. 1995, 122, N 12

C_2^+

1993

Liu Lei.

Wuli xuebao. Acta
phys. sin. 1993. 42, N4.
C. 563-567.

u. n.

● (see C_2 ; III)

C⁺
d

1993

119: 169520f A high-resolution study of the (0, 1) $B^1\Sigma_u^- - X^1\Sigma_g^-$ transition of dicarbon monocation. Zackrisson, M.; Royen, P. (Dep. Phys., Stockholm Univ., S-113 46 Stockholm, Swed.). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 161(1), 1-6 (Eng). The velocity modulation laser absorption technique was employed to obtain the spectrum of the (0, 1) band of the $B^1\Sigma_u^- - X^1\Sigma_g^-$ system of C_2^+ . These states were rotationally analyzed and a study of the $B^1\Sigma_u^- \sim 2^1\Pi_u$ interaction was performed. The wavenumbers of the rather broad rotational lines and of overlapping lines were detd. using a computer program for line profile fitting and decompn. Deperturbed consts. and interaction parameters were derived.

($B^1\Sigma_u^- - X^1\Sigma_g^-$)

trans. array
(0,1) nonoch

C-A. 1993, 119, N 16

C_2^+

1995

123: 300362h Sub-Doppler laser spectroscopy of small molecular ions. Boudjarane, K.; Larzilliere, M. (Laboratoire de Physique Atomique et Moléculaire, Université Laval, Sainte-Foy, PQ Can. G1K 7P4). *Proc. Int. Conf. Lasers* 1994. (Pub. 1995). 17th, 520-7 (Eng). Fast ion-beam laser spectroscopy (FIBLAS) is a powerful high-resoln. spectral technique for studying the structure of at. and mol. ions. A large no. of different at. and mol. species can be systematically probed using FIBLAS methods in several ways. The FIBLAS methods are more efficient and powerful to study ions than conventional spectroscopy techniques using conventional discharges. Laser-induced fluorescence (LIF) when combined with FIBLAS technique is 1 method than can be used for detecting resonances. The kinematic compression of axial velocities occurring in fast beam was exploited to reduce the Doppler broadening and to produce extremely narrow absorption lines. This technique was applied to C_2^+ and N_2^+ .

лазер

спектроскопия



⑦ N_2^+

C. A. 1995, 123, N 22

C_2^+

1995

123: 211901r High-resolution laser-induced fluorescence spectrum of the B $^4\Sigma_u^-$ -X $^4\Sigma_g^-$ transition of C_2^+ . Boudjarane, K.; Carre, M.; Larzilliere, M. (Laboratoire de Physique Atomique et Moleculaire, Universite Laval, Sainte-Foy, Quebec, Can.). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 243(5,6), 571-8 (Eng). We have used

laser-induced fluorescence on a fast ion beam to study the B $^4\Sigma_u^-$ -X $^4\Sigma_g^-$ system of the homonuclear mol. ion C_2^+ . We have obsd. rotational lines of the (1, 1) band by using a Doppler tuning technique and the high resolu. obtained has permitted a detailed study of spin splitting. Mol. consts. and interaction parameters were evaluated including revised results for the (1, 0) band.

(B $^4\Sigma_u^-$ -X $^4\Sigma_g^-$)

C. A. 1995, 123, N 16

C_2^{2+}

1995

Hogreve H.

J. Chem. Phys. 1995,
102(8), 3281-91.

расчёт
энергии
и.с.с.

● (ан. C_3^{2+} ; III)

C₂²⁺

1996

Heizke
 M. COCM
 Meop. pacu

124: 130199m Theoretical study of the low-lying electronic spectrum of C_2^{2+} . Hogreve, H. (1098 SJ Amsterdam, Neth.). *Chem. Phys.* 1996, 202(1), 63-80 (Eng). Electronic states assocd. with the low-lying Born-Oppenheimer spectrum and crucial for the stability and exptl. observability of C_2^{2+} are studied by ab initio methods. This includes computation of potential energy curves and transition moments by multireference CI methods, and a study of the corresponding vibrational resonance levels and lifetimes. By analogy with the electronic ground state $X\ ^3\Sigma_g^-$ of the isoelectronic neutral mol. B_2 , the lowest potential energy curve of C_2^{2+} that supports quasibound vibronic motion belongs to the state $1\ ^3\Sigma_g^-$. In case of C_2^{2+} , this state is destabilized by a crossing with the repulsive potential energy curve of $1\ ^3\Pi_u$, and the induced electronic transitions represent the major decay channel of C_2^{2+} ($1\ ^3\Sigma_g^-$). The quintet state $1\ ^5\Sigma_u^-$ is quasibound; whereas most of its vibronic levels are practically stable against dissociative tunneling, interactions with other electronic states furnish the principal decay mechanism for $1\ ^5\Sigma_u^-$. Addnl. bonding and stability properties of C_2^{2+} are exposed by monitoring the behavior of potential energy curves while rising the nuclear charge from the neutral to the doubly pos. charged situation.

C. A. 1996, 124, N 10

C⁺
2

1996

Xi, Xiangzhu;
Palanis, Josef

неопит.
А. А. А. А.
Микрон.
Сосновск.

J. Chem. Phys., 1996,
104(23), 9555-62

1998

F: C2(+2)

P: 3

18Б184. Теоретическое изучение [неэмпирическими методами] низлежащих электронных состояний C{2+}[2]. Theoretical study of the low-lying electronic spectrum of C{2+}[2] / Hogreve H. // Chem. Phys. - 202, 1. - С. 63-80. - Англ.

$\mathbb{Q}^{d+}$

Wang, Hongyan; et al.; 1998

равнестр.
стр-ра,
теорет.
расчет

Yuanzi Yu Fenzi Wu-
li Xuebao 1998,
15 (4), 468-472

$(\text{un. } \mathbb{Q}'; \text{III})$ ●

$\mathbb{Q}^+$

Wang, Hongyan; et al.,¹⁹⁹⁸

равновес.
стр-ра,
теорет.
раств

Yuanzi Yu Fenzhi Wuli
Xuebao 1998, 15(4),
468 - 472

(all. $\mathbb{Q}^+$, III)

F: C2

P: 3

131:357473 Rotational temperature measurements
of excited and ground stat C2(d 3.PI.g-a 3.PI.u)
transition in a H2/CH4 915 MHz microwave pulsed pla

Duten, Xavier; Rousseau, Antoine; Gicquel,
Alix; Leprince, Philippe Laboratoire
d'Ingenierie des Materiaux et des Hautes Pressions,
Universi Paris Villetaneuse F93430, Fr. J.

Appl. Phys., 86(9), 5299-5301 (English)1999 The
rotational temp. of a low energy (0.09 eV), C2 Swan band
state (a 3.PI.u), obtained by white light absorption, is
compared to the rotationa temps. of three electronic
excited states [C2(d 3.PI.g), CH(A2.DELTA.) and
2.SIGMA.+)] in a high power, H2/CH4 microwave plasma
used for diamond deposition. All temps. are measured at
50 mbar, and both continuous (as function of microwave
power) and pulsed (as a function of time after the modes
of operation were studied. The rotational temp. of C2's

1999

excited st higher than that of the low energy state (assumed equal to the gas temp.) indicating that the excitation of C2 is to a large extent the result of c reactions (chemiluminescence) rather than electronic excitation. The rot temps. of CH(A 2.DELTA.) and CN(B 2.SIGMA.+) excited states are also high that for C2's low energy state temp. rotational temp ground state carbon dimer; hydrogen methane microwave plasma carbon dimer; excitation dimer chemiluminescence electronic state Luminescence, chemiluminescence, mecha rotational temp. measurements of excited and ground states of C2(d 3.PI.g 3.PI.u) transition in a H2/CH4 915 MHz microwave pulsed plasma; Plasma, microwave; rotational temp. measurements of excited and ground states of 3.PI.g-a 3.PI.u) transition in a H2/CH4 915 MHz microwave pulsed plasma;

C⁺₂

[OM. 40162]

1999

Toshi-Ichi Suzuki,

Internat. J. Quant. Chem.
Chem., 1999, 72, N6, 597-604

Structure of Energy Levels • Molecular of Homonuclear

Diatom. Molecules.



C_2^+

1999

Suzuki, Yoshi - Ichi;

ниансы
электрон
сост.,

мор.
панем

Int. J. Quantum. Chem.
1999, 72(6), 597-604

(all. C_2 ;



III)

2000

F: C2

P: 3

133:325879 Analytical representations of high level
ab initio potential energy curves of the C2 molecule.

Boggio-Pasqua, M.; Voronin, A. I.; Halvick, P.;

Rayez, J.-C. UMR 5803/CNRS, Laboratoire de Physico-
Chimie Moléculaire, Université Bordeaux 1 Talence

33405, Fr. THEOCHEM, 531, 159-167 (English) 2000.

Realistic anal. representations of the twelve
lowest singlet and triplet electronic adiabatic
potential energy curves of C2 mol. are given. The

corresponding electronic states are correlated with C atoms both in their 3P state. A new set of high level MRCI calcns. coupled with a double many-body expansion anal. fitting based on the extended Hartree-Fock approx. correlation energy model were used in this work. Using RKR data available in the literature, comparison is made between our results and RKR turning points concerning the four lowest singlet states X1.SIGMA.+g, A1.PI.u, B1.DELTA.g and B'1.SIGMA.+g of C2. The agreement is very satisfying.

Ca⁺

[Om. 40709]

2004

Connor P Ballance and
Brendan M. McLaugh-
lin,

J. Phys. B: At. Mol.
Opt. Phys. 2001, 34, N7
1201-1212

Valence configuration interaction
study of the C_2^+ cation

C_2^+

(DM-41328)

2001

Wang[†] et al.,

J. Mol. Struct. (Theochem),
2001, 571, 133-138.

Study on the analytical potential energy
for C_2 , C_2^+ and C_2^- .

C₂ **A. Tanabashi^a and T. Amano^b**
**New Identification of the Visible
Bands of the C₂ Swan System**

2002

Journal of Molecular Spectroscopy

Volume 215, Issue 2, October 2002, Pages 285-294

The well known Swan system ($d^3\Pi_g - a^3\Pi_u$) of C₂ has been observed in absorption in a hollow cathode discharge in a mixture of C₂H₂ and helium. Three bands, (v', v'')=(5, 7), (6, 8), and (7, 9), of the Swan system have been identified and rotationally analyzed. However, the transition wavenumbers are found not to be quite consistent with the literature values compiled by Phillips and Davis. The (7, 9) band has been observed and identified for the first time. New identifications of the (5, 7) and (6, 8) bands are presented. The observed wavenumbers are fit to the effective Hamiltonian derived by Brown and Merer for $^3\Pi$ states. The molecular constants for both the upper and lower electronic states have been determined from the least squares fitting.