

1968

CO

1968

5 Д154. Релаксация распределения заряда в молекуле и колебательная силовая постоянная. Bader R. F. W.

Bandrauk A. D. Relaxation of the molecular charge distribution and the vibrational force constant. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 4, 1666—1675 (англ.)

При помощи теоремы Геллмана — Фейнмана (ГФ) и литературных данных по хартри-фоковским волн. ф-циям вычислены квадратич. k_2 и кубич. k_3 силовые постоянные молекул N₂, CO, BF, BeO и LiF. Результаты сопоставлены с эксперим. данными и показано, что разность вычисленных и опытных значений k_2 и k_3 зависит от использованного при расчете значения равновесного межъядерного расстояния R_e , причем при использовании опыт-

(+4)



(см. также N₂) III

IX

9. 1969. 58

ного значения R_e вместо хартри-фоковского R_e это расхождение минимально. Анализированы вклады градиента эффективного статич. поля и релаксации распределения заряда при смещениях ядер в k_2 . Отмечено, что ф-ла для k_2 , полученная при помощи теоремы ГФ, содержит разности больших чисел, что приводит к большим ошибкам при расчете. Построены кривые распределения заряда и рассмотрена связь между отдельными электронными вкладами в k_2 и этими кривыми, а также корреляция между действующими на ядра силами и распределением заряда.

М. Р. Алиев

CO

B9 - XIV - 614

1968

u. u.

~~60700~~ Molecular constants of carbon monoxide. Bouanich, Jean Pierre; Levy, Armand; Haeusler, Claude (Lab. Infra-rouge, Fac. Sci., Paris, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1968, 29(7), 641-5 (Fr). The band $\nu_0 \rightarrow 1$ of CO was measured at 10.8, 21.3, and 60 cm. Hg. These data, extrapolated to 0 pressure, give a value for $\Delta\nu$ of 6350.432 cm^{-1} . New values of the vibration-rotation consts., the dipole moment function, $M = 0.48 \text{ D.}$, and of the quadrupole moment, $Q = 2.4 \times 10^{-26} \text{ esu. cm}^2$ were calcd. and gave a theoretical curve which follows the exptl. values of the half-widths of the lines. Janet E. Austin

C.A. 1969. 70. 12

CO

спектр

м.ч.

УД 294. Молекулярные константы окиси углерода. Bouanich Jean-Pierre, Lévy Armand, Haessler Claude. Constantes moléculaires de l'oxyde de carbone. «J. phys.», 1968, 29, № 7, 641—645 (франц.; рез. англ.)

Получены спектры поглощения окиси углерода в области колебательного перехода $3 \leftarrow 0$ с разрешением около $0,1 \text{ см}^{-1}$ в слое 20 м при давлениях 10—60 мм рт. ст. Произведен вращательный анализ колебательно-вращательной полосы и определены вращательные постоянные B_0 , B_3 , D_0 , D_3 , B_e и D_e и ангармоничности $x_e \omega_e$ и $y_e \omega_e$. Анализ интенсивности спектра позволил определить 4-й член разложения ф-ции дипольного момента $M(r)$ молекулы по колебательной координате. Авторы приводят ф-цию $M(r)$ с точностью до 4-го члена разложения. Расчеты полуширины колебательно-вращательных линий показывают, что наилучшее согласие с опытными данными может быть получено, если положить квадрупольный момент CO $Q = 3 \cdot 10^{-26}$ ед. CGSE. Библ. 20.

М. В. Тонков

1968

ф. 1969.

49A

ВФ-ХIV-214

CO

1968

8 Д410. ИК-поглощение в области 21μ окиси углерода, адсорбированной на платине, нанесенной на подложку кремнезема. Clarke J. K. A., Farrer G. M., Rubalcava H. E. Infrared absorption at 21μ of carbon monoxide adsorbed on silica-supported platinum. «J. Phys. Chem.», 1968, 72, № 1, 327—330 (англ.)

Исследован спектр CO, хемосорбированной на Pt, нанесенной на Кабосил. Давление CO в кювете составляло ~ 1 мм рт. ст., т-ра обработки 250°C . В области $\sim 476 \text{ см}^{-1}$ обнаружена слабая диффузная полоса поглощения, идентифицированная как вал. кол. C—Pt. Получены значения силовых постоянных с учетом взаимодействия C—O и C—Pt-связей: $F_{\text{CO}}=17,16$, $F_{\text{CM}}=3,51$ и $f=1,34 \text{ мдн/\AA}$. Значение F_{CO} больше, а F_{CM} меньше, чем полученные для аналогичной системы без учета взаимодействия связей. Обсуждаются детали эксперимента. Библ. 11. Э. В. Б.

90. 1968. 8А

CO

1968

3 Д170. Силовые постоянные CO и CO—CO-взаимодействия в карбонилах металлов.—Ответ Джонсу. Cotton F. A. CO force constants and CO—CO interaction constants of metal carbonyls: a reply to L. H. Jones. «Inorgan. Chem.», 1968, 7, № 8, 1683 (англ.)

см. пост.

Автор, отвечая на письмо Джонса (реф. 3Д169), обсуждает три основных положения, критикуемых Джонсом: 1) о практичности поля Коттона — Крайханцеля, 2) об удовлетворительности его, 3) о близости даваемых им результатов к экспериментальным. Утверждается, что доводы Джонса не опровергают ни один из этих пунктов и что этот метод применим для определения относительных значений силовой постоянной растяжения CO и CO—CO-взаимодействия. Условие $1 < k_t/k_c < 3$ выполняется для большого числа карбониллов металлов. Е. И. Креденцер

ф. 1969. 3А

CO

1968

Чаркин О.П.,
Деткина М.Е.

(У)

Ж. Струков. Желуди,
1968, 9, ~ 5, 867

(См. ЛиЧ,
обр. егор.) III

CO

γ

1968

Havies A. W.

Chem. Phys. Lett., $\text{N}^2(3)$,
173.

Ionization potentials by
the complete neglect of
diffe-rential overlap

(Chem. BF_3) III

I968

CO

Dowling J.M.

J.Quant.Spect.Rad.Trans., 9,
1613

Line widths in the pure rotational spectrum of CO.

CO

BCP-A115B -

1968

Empedocles P.

coll.
room

Theor. chim Acta 1968, 10(4)

331-6

1968

CO

8 Д272. Определение полуширин линий чистой CO с высокой разрешающей силой. Hunt Robert H., Toth Robert A., Plyler Earle K. High-resolution determination of the widths of self-broadened lines of carbon monoxide «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 9, 3909—3912 (англ.)

Измерены полуширины линий вращательной структуры первого обертона чистой CO (комнатная т-ра, $P = 1 \div 2$ атм.). Использование спектрографа с разрешением $0,045 \text{ см}^{-1}$ позволило повысить точность ранее известных результатов до $\pm 3\%$ и измерить значения полуширин линий вплоть до $|m| = 31$. Значения полуширин γ_m^0 изменяются от $0,088 \text{ см}^{-1} \text{ атм}^{-1}$ при $|m| = 1$ до $0,6044 \text{ см}^{-1} \text{ атм}^{-1}$ при $|m| = 31$. Отмечается, что результаты прямого измерения γ_m^0 и ее определения по пиковым интенсивностям линий (аппроксимация лорентцевским контуром) совпадают с точностью $\sim 2\%$.

А. П. Коузов

09. 1969

89

1968

CO

3 Д169. Силовые постоянные CO и CO—CO-взаимодействия в карбонилах металлов. Jones Llewellyn H. CO force constants and CO—CO interaction constants of metal carbonyls. «Inorgan. Chem.», 1968, 7, № 8, 1681—1682 (англ.)

Обсуждается применимость приближения Коттона—Крайханцеля (РЖФиз, 1968, 6Д405) для вычисления силовой постоянной растяжения CO-связи и постоянной CO-CO-взаимодействия в соединениях типа $\text{CF}_3\text{Mn}(\text{CO})_5$. Для проверки этого приближения сделаны расчеты силовых постоянных в системе общего валентно-силового поля для молекулы $\text{Mn}(\text{CO})_5\text{Br}$.

Сил. конст.

ф. 1969. 39

Приводятся таблицы наблюдаемых фундаментальных частот и комбинационных полос СО; фундаментальных частот растяжения СО и ангармонич. поправок. Полученные значения силовых постоянных обсуждаются и сравниваются с приближенными. Делается заключение, что приближение Коттона—Крайханцеля и предположение $k_t/k_c=2$ неприемлемы и что совпадение вычисленных и наблюдаемых частот не является доказательством его правильности.

Е. И. Креденцер

CO

1968

9 Д101. Изучение электронной структуры окиси углерода улучшенным методом ЛКАО. Julg André, Pellégatti Alain. Structure électronique de l'oxyde de carbone: méthode L.C.A.O. améliorée. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1968, 65, № 2, 242—246 (франц.; рез. англ.)

Методом ЛКАО исследована электронная структура молекулы CO. Рассмотрена делокализация σ -электронов в молекуле. Соответствующим подбором σ -орбитали удалось добиться хорошего совпадения вычисленных электронных переходов с экспериментальными. Вычисленный постоянный дипольный момент оказался завышенным.

И. С. Милевская

ф. 1968 - 92

1968

 $M(CO)_5X$ $O=C \equiv C$ (ν_i)

23276h The b_1 carbonyl stretching mode in the infrared spectra of $M(CO)_5X$ complexes. Kettle, S. F. A.; Paul, I. (Univ. Sheffield, Sheffield, Engl.). *Inorg. Chim. Acta* 1968, 2(1), 15-16 (Engl.). The observation of a peak in the ir spectra of $M(CO)_5X$ complexes (C_{4v} symmetry) attributable to the b_1 $C \equiv O$ stretching mode is discussed. A mechanism is suggested whereby this formally forbidden mode becomes active. The mechanism involves excitation of the b_1 mode in mols. which are not in the vibrational ground state. RCPY

C.A. 1968. 69.6

CO

Krupenie P.H.,
Benesch W.

1968

J. Res. NBS, 72A, 495

Electronic transition moment integrals for first ionization of CO and the A-X transition in CO^+ . Some limitations on the use of the x -centroid approximation.

CO

1969

6 Д210. Константа спин-вращательного взаимодействия и вращательный магнитный момент $C^{13}O^{16}$. Ozier Irving, Сгаро Lawrence M., Ramsey Norman F. Spin rotation constant and rotational magnetic moment of $^{13}C^{16}O$. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 5, 2314—2321 (англ.)

ф. 1969. 68

CO

12 Д127. Электронные переходы молекул CO, N₂ и NO, помещенных в твердые матрицы инертных газов: качественное обсуждение. Roncin Jean — Yves. Electronic transitions of CO, N₂ and NO molecules trapped in solid rare gas matrices: Qualitative discussion. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 1, 105—110 (англ.) 1968

Дана качеств. интерпретация сдвига и уширения электронно-колебательных полос поглощения молекул CO, N₂ и NO, помещенных в твердые матрицы Ne, Ar, Kr и Xe, основанная на относит. размерах молекулы и кристаллич. ячейки и симметрии ячейки. Отмечено, что величина возмущения полос сильно зависит от размеров орбит возбужденных электронных состояний. Сдвиг и уширение полос переходов на низкие электронные уровни незначительны, а ридберговые серии, соответствующие переходам на высоковозбужденные состояния, подвержены весьма сильному воздействию кристаллич. поля. Обсуждается также вклад заторможенного вращения молекул в кристалле на ширину полос. М. Р. Алиев

ф. 1968. 127

CO

1968

3 Б39. Электронные переходы молекул CO, N₂ и NO в твердых матрицах из инертных газов. — Качественное обсуждение. Roncin Jean-Yves. Electronic transitions of CO, N₂ and NO molecules trapped in solid rare gas matrices: Qualitative discussion. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 1, 105—110 (англ.)

Обсуждение сообщенных ранее эксперим. данных. Изменения в энергиях переходов связываются с влиянием размеров возбужденных орбит, на которые происходит переход. Эти изменения велики для ридберговых и малы для валентных переходов. Обсуждается проблема вращения в твердых матрицах. Из спектров предсказана ориентация N₂ в неоновой матрице. Резюме.

X. 1969. 3

$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$

Bp-4505-X 1968
Roy R. S.

Proc. Phys. Soc., London,
At. Mol. Phys., [2] 1 (2),
320.

An empirical relation-
ship between bond
length and frequency
(see. Chy) III

CO

Rothe D. E.
McLara D. F.

1868

check

U.S. At. Energy Comm.
CAZ-TR-165, 70 pp.

(see. N₂) III

CO

Синдр

1968
/ 9 Д242. О полосах Ангстрема в электронном спектре молекулы $C^{12}O^{18}$. Rytel M. Note on the Angström Bands of the $^{12}C^{18}O$ Molecule. «Acta phys. polon.», 1968, 34, № 5, 953 (англ.)

Предварительное сообщение об исследовании спектра испускания молекулы $C^{12}O^{18}$ (с 18%-ным обогащением) в видимой области. Начало полос Ангстрема найдено равным (все — в $см^{-1}$): (0,1) — 20714,5; (0,2) — 19301,6; (0,3) — 17920,5; (0,4) — 16572,8. С. Ф. Б.

ф. 1969. 98

CO

1968

Setzer D. W.

Stedman D. H.

recup.

checkup

J. Chem. Phys., 49(1), 467

(coll. CO₂) III

1968

CO

7 Д290. Спектр поглощения высокого разрешения в вакуумной УФ-области переходов $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma$, $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ и $j^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ окиси углерода. Tilford S. G., Vanderslice Joseph T. High resolution vacuum ultraviolet absorption spectra of the $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, and $j^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transitions in carbon monoxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 4, 419—431 (англ.)

М. И.

Получен спектр поглощения при высоком разрешении в вакуумной УФ-области (1060 Å) переходов $C-X$ и $B-X$ у $C^{12}O^{16}$ и $C^{13}O^{16}$. Проведен анализ структуры полос 1—0 и 0—0 обеих систем. Результаты сведены в таблицу. Сделана попытка отождествить некоторые $B-X$ -переходы с $j^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ -переходом. Библ. 19.

Е. Рыльцев

ф. 1969. 7Д

1968

CO

14°Б146. Вакуумные ультрафиолетовые спектры поглощения высокого разрешения переходов $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ и $j^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ в окиси углерода. Tilford S. G., Vanderslice Joseph T. High resolution vacuum ultraviolet absorption spectra of the $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, and $j^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ transitions in carbon monoxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 26, № 4, 419—431 (англ.)

м. и.

Сняты УФ-спектры поглощения высокого разрешения $C^{12}O^{16}$ и $C^{13}O^{16}$ в области вплоть до 1060 Å. Выполнен анализ вращательной структуры полос (O—O) и (1—O) в переходах $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ и $Z^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ для обеих молекул. Система полос в $C^{12}O^{16}$ в области 1099 и 1073 Å, ранее отнесенная к типу B—X, связывается с дополнительной системой, предварительно идентифицированной как $j^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$. Вычислены молек. константы $C^{12}O^{16}$ для всех трех состояний $B^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+$ и $j^3\Sigma^+$. Б. В. Рассадин.

X. 1969. 14

Co

1968

Review

55949 High-resolution vacuum ultraviolet absorption spectra of the $B^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$, and $j^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ transitions in carbon monoxide. Tilford, S. G.; Vanderslice, Joseph T. (Nav. Res. Lab., E. O. Hulburt Center for Space Res., Washington, D.C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 26(4), 419-31 (Eng). The C-X and B-X transitions in $^{12}C^{16}O$ and $^{13}C^{16}O$ were studied under high resolu. Rotational analyses were performed on the (1-0) and (0-0) bands of both systems. Bands previously thought to be part of the B-X system have been assigned to an addnl. system, tentatively identified as $j^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$. 19 references.

RCKP

C.A. 1968. 69. 14

CO

1968

9 Д287. ИК-спектры CO. Young Lee A. CO infrared spectra. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1968, 8, № 2, 693—716 (англ.)

Вычислены значения интенсивностей линий в колебательно-вращательных полосах молекулы CO, соответствующих переходам типа $v \rightarrow v+n$ при значениях n от 1 до 3 (основная полоса и первые два обертона) и различных значениях v (переходы с основного уровня при $v=0$ и соответствующие им «горячие» полосы). Вычисления проведены для т-р от 300 до 9000° К. Представлены кривые средних значений спектральных коэф. поглощения оптически тонких слоев CO в рассматриваемой области спектра, полученные из усредненных по интервалам от 1 до 10 см^{-1} значений интенсивностей линий.

К. Василевский

09. 1968. 9Д

1968

CO

L.K.

22 Б277. Инфракрасные спектры CO. Young Lee A.
CO infrared spectra. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat.
Transfer», 1968, 8, № 2, 693—716 (англ.)

Вычислены интегральные коэф. экстинкции ИК-полос поглощения CO, соответствующих как основным колебаниям, так и первым двум обертонам. Расчеты произведены с использованием соответствующих матричных элементов переходов. Из полученных значений коэф. экстинкции рассчитаны спектральные коэф. поглощения, усредненные для нескольких линий. Особое внимание уделено рассмотрению физ. условий, при которых эти усредненные коэф. могут быть использованы для определения поглощения или эмиссии. Резюме

X. 1968. 22

1968

CO

спектр

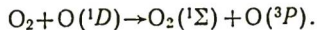
12 Д680. Излучение в области 4000—8000 Å при вакуумном УФ-фотолизе N_2O , NO, NO_2 , CO, CO_2 и O_2 .
 Young R. A., Black G., Slinger T. G. 4000—8000-Å emission from far-ultraviolet photolysis of N_2O , NO, NO_2 , CO, CO_2 and O_2 . «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 5, 2067—2070 (англ.)

Наблюдено появление люминесценции в видимой области спектра (4000—8000 Å) при фотолизе некоторых простых газов под действием далекого УФ-излучения Ar- Kr- и Xe-резонансных ламп. Анализ спектров флуоресценции CO и NO, подвергшихся фотолизу при $\lambda=1470$ Å, дает основание полагать, что исходными состояниями в излучении в случае CO является $d^3\Delta v=7$ (переход $d^3\Delta—a^3\pi$), а в случае NO—ряд мало известных высших состояний, из которых происходят переходы в $A^2\Sigma$ -, $B^2\pi$ -, $C^2\pi$ - и $D^2\Sigma$ -состояния. Фотолиз CO_2

ф. 1968-1247



приводит к появлению линии 5577 Å $O(^1S)$ при возбуждении всеми длинами волн от 11048 до 11470 Å; при более длинноволн. возбуждении состояние $O(^1S)$ образуется в результате вторичных процессов. При 11470 Å фотолиз N_2O приводит к появлению $O(^1S)$ и NO β-полос ($B^2\pi \rightarrow X^2\pi$). $O(^1S)$ образуется непосредственно в процессе фотодиссоциации: $N_2O \rightarrow N_2(X^1\Sigma) + O(^1S)$. Измеренный квантовый выход $O(^1S)$ равен 0,02. $NO(B^2\pi)$ образуется, вероятно, при бомбардировке N_2O атомами О. Облучение Кг-лампой (11165 и 1236 Å) вызывает появление первой положит. системы полос ($B^3\pi \rightarrow A^3\Sigma$) N_2 . При фотолизе O_2 излучающими центрами оказываются $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, образующиеся предположительно в результате дезактивации $O(^1D)$:



Фотолиз NO_2 при $\lambda = 1470$ Å сопровождается появлением сплошного континуума, как это имеет место при реакции $O + NO$. Библ. 14.

А. М. М.

1968

CO

NO

O₂Cuep
u.g.

118287f The 4000-8000-A. emission from far-ultraviolet photolysis of N_2O , NO , NO_2 , CO , CO_2 , and O_2 . R. A. Young, G. Black, and T. G. Slinger (Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *J. Chem. Phys.* 48(5), 2067-70(1968)(Eng). Luminescence has been observed in the 4000-8000-A. region during the uv photolysis of a no. of simple gases with Ar, Kr, and Xe resonance lamps. CO and NO photolyzed at 1470 A. give fluorescence spectra, emission being produced from the $d^3\Delta_{1-7}$ state of CO and from a no. of little-known upper states of NO. CO_2 photolysis gives the 5577-A. line of $\text{O}(^1\text{S})$ at all wavelengths from 1048 to 1470 A.; at the longer wavelengths the $\text{O}(^1\text{S})$ is formed in a secondary process, as there is insufficient energy available during the initial disocn. The N_2O photolysis produces the N_2 first pos. bands, the NO β -bands, and $\text{O}(^1\text{S})$, depending on the photolyzing wavelength. In O_2 photolysis, the only emitting species is $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+)$, presumably formed during $\text{O}(^1\text{D})$ deactivation.

RCJQ

(t2u)

C.A. 1968. 68. 26

☒