1952

CO

Herzberg G.

Trans. Roy. Soc. Can.,

46, 1 (1952)

1952

CO

Kistiakowsky, Knight H., Malin M

J. Chem. Phys., 1952, 20, 876

Энергия диссоциации N_2 и CO

D_0

$D = 9{,}76$ Расчет скоростей детонации

CO

C. Rovera Nuovo Cimento 9, 541-3 (итальян) /1952

Колебательные частоты 2х атомных молекул, образ. атомами 4, 5, 6 и 7 гру.

см C_2.

V

CO

ИК

1952

Plyler E.K., Benedict W.S., Silverman S.

J. Chem. Phys, 1952, 20, 175

Прецезионные измерения в ИК-спектре CO

пламя $C_2H_2 + O_2$; $CO + O_2$

$\pm 0{,}02$ см$^{-1}$ 2-0; 3-0; - испускание

2-0; 3-1; 4-2; 5-3 - поглощение

$\omega_e = 2169{,}81$

$\omega_e x_e = 13{,}284$

$\omega_e y_e = 0{,}010$

$B_e = 1{,}93130$ $B_0 = 1{,}92253$

$\alpha = 0{,}017543$

$\gamma = 4{,}5 \cdot 10^{-6}$

$\delta_e = 5{,}95 \cdot 10^{-6}$

$\beta = 0$ $H_e = 5{,}8 \cdot 10^{-2}$

2-0 ($\nu_0^1 = 4263{,}84$ R)

ν_0 2-0 + ν_0 4-2 = 8414,44

ν_0 4-0 = 8414,46

В полосах наблюдается ν_0 4-0 = 8414,40

	ν_0	$B'+B''$	$B'-B''$	$2(D'+D'')$	$D'-D''$
2-0	4260,063	3,81000	- 0,035060	$2,38 \cdot 10^{-5}$	0
3-1	4207,17	3,77495	- 0,035042	— " —	0
4-2	4154,38	3,73992	- 0,035024	— " —	0
5-3	4101,73	3,70491	- 0,035006	— " —	0
3-0	6350,47	3,79249	- 0,052576	— " —	

10452,20

$y_v - y_0$

	расч.	Наблю
v=1	2143,27	2143,38 (Lagerquist, Nielsen, Dickey; Phys. Rev, 1947, 72, 28
2	4260,07	2143,16 (Rao Astrophys. J. 110, 304 (1949))
3	6350,44	4260,06 (изм)
4	8414,44	6350,47 (изм)
5	10452,18	8414,16 (Herzberg, Rao J. Ch. Ph, 1949, 17, 1099)

CO

/1952

C. Rovera, Nuovo Cimento 9, 541-3 (итальян)

Колебательные частоты 2х атомных молекул, образ. атомами 4, 5, 6 и 7 гру.

см C_2.

V

CO 33

ИК исслед

1952

Plyler E.K., Bull J.J.

J. Chem. phys., 1952, 20, 1178

ИК эмиссионный спектр OH, CO и CO_2 от 3 до 5,5 μ

1952

CO

D_0

Rosen B.

Mem. soc. roy. sci. Liège, 1952, 12, 317

Энергия диссоциации NO

F. Bedard. IV-190 1953.

J. Gallagher Phys. Rev. 92, 1440.

C. Johnson

? Микроволн. измерение $D_0(CO)$.

$D_0(C^{12}O^{16}) = 189.0 \pm 0.7$ ккал/моль.

$D_0(CO)$

CA. 9.59.

7747-IV

1953

Ar, Kr, N_2, CO (I)

Fox R.E., Hickam W.M., Kjeldaas T., Grove D.J.
Natl.Bur.Standards (U.S.,), 1953, Circ.No.522
211-16.

Direct measurement of appearance potential and ionization probability using a mass spectrometer.

Ch.A., 1953, 10342 h

J

Semb q.r.

СО отпуск 3168 г 1953 ~~1952~~

Фо

Фауст

книга, часть IX и X

Энергия диссоциации

V

CO 39 Goldberg L., Müller E.A. 1953

$X^1\Sigma_g^+$

Astrophys. J., 118, 397 (1953)

в спектре солнца

Окись углерода в солнце

		$B_{v+2} + B_v$
2-0	4260,05	3,81029
3-1	4207,14	3,77527
4-2	4154,37	3,74027
5-3	4101,73	3,70527
6-4	4049,24	3,67029
7-5	3996,88	3,63532

$\omega_e = 2169,83$

$\omega_e x_e = 13,297$

$\omega_e y_e = 0,0115$

$B_e = 1,93141$

$\alpha_e = 0,017520$

$\gamma_e = 2,96 \cdot 10^{-6}$

$\delta_e = 6,18 \cdot 10^{-6}$

$\beta_e = -1,76 \cdot 10^{-9}$

[redacted]

2149,27
4207,14
4101,73
52-14

1963,66
14149,07

Вор-229-IV

ВФ-III-5352; 500 — IV-ВФ

1953

H_2, HJ, JBr, J_2, N_2, NO, OH, O_2, P_2, S_2, SO, Se_2

As_2, Br, CH, ClBr, Cl_2, ClF, ClJ, CO, HBr (De, ωe, Xe)

Lippincott E.R.
J.Chem.Phys., 1953, 21, 2070-I.
A new relation between potential energy and internuclear distance.

Ch.A., 1954, 174ᵘf.

Ems gp.r.

10

v

CO

ЧТ

1953

McCubbin, Yoshiber Y.

Phys. Rev., 1953, 89, 145-7

Электронный спектр $C^{13}O^{16}$

Вращ. анализ 0-1, 0-2, 0-3, 0-4 и 0-5 и 1_x-1 полос Ангстрема

	$C^{12}O^{16}$	$C^{13}O^{16}$		$C^{12}O^{16}$	
ω_e =	2169,84 ;	2121,47	A		B
$\omega_e x_e$ =	13,301 ;	12,712	T_e =	65076,5;	86927,6
$\omega_e y_e$ =	0,0123 ;	0,0115	ω_e =	1515,61;	2160,7
			$\omega_e x_e$ =	17,250;	39,3
			$\omega_e y_e$ =		

Постоянные $C^{12}O^{16}$ получены пересчетом, с учетом верхних уровней (Ч.ч.ö....), где были отмечены постоянная ошибка на ~2 см$^{-1}$

IV-244

265-IV 1953

CO (B', B'', B_e, D', D'', ω_e, $x_e\omega_e$, ν_i)

Mills I. M., Thompson H. W.

Trans. Faraday Soc., 1953, 49, N3, 224-227 (англ.)

The fundamental vibration-rotation bands of $^{13}C^{16}O$ and $^{12}C^{18}O$.

PZhX, 1954, N11, 28452

2

ХН 1953

CO 34

Plyler E.K., Blaine L.R., Bauer J.A

J. Opt. Soc. Am., 1953, 43, 822

Молекулярные постоянные CO

Кр. обл. от 4,5 до 5,2 μ [illegible] CO.

В полосу с исчезнувшим колебательно-вращательное пламя: 1-0, 2-1, 3-2

значения пост. нет.

CO (Y). 291 – IV 1953

Sahni R. C.

Trans. Faraday Soc., 1953, 49, N11, 1246-1253 (angl)

The structure of carbon monoxide.

PNCX, 1954, N12, 30202. 10 2 ✓ ϕ

M. S. Sodha

$D_0(CO)$
субл. C

1953.

Science and Culture (India) 19, 45–6.

$D_0^0(CO)$, энергия субл. C, атомная энергия образ. тепла и сод. атома C в молекуле метана

$L = D_0(CO) - 85.78$ ккал; $D_0(CH_4) = L + 222.47$ ккал.

Наилучшее знач. $D_0(CO) = 256.19$ ккал/м.

$L(C) = 170.4$ ккал/моль

$D_0(CH_4) = 392.8$ ккал. ϵ в $CH_4(^1D)$

X-55-8-13373

CA. 0.5 %.

Bop-156-IV 1953

Ao Singh Sodha M.

Sci and Culture
Do 1953, 19, N1, 45,46

PX. 1955, 13373

L(c)
C

Sodhe M.S.,
Science and Culture (India) 1953, 19, 45
, Теплота диссоциации CO, L(c),
D(CH4) и сродство атома C в
молекуле CH4

ΔHмол:
170

$L = D_0(CO) - 85,78$

$D_0(CH_4) = L + 222,47$

Авторы 4* приводимых величин
D(CO) [redacted] могут быть принятые

X-55-8-13373

C.A. 1954-3134d

величины Гайфона 256,18. Тогда
$L = 170{,}4$ и $D(CH_4) = 352{,}8$ и атом C в
CH_4 находится в 1D состоянии.

C CH_4

теплота сублимации, CO энергия диссоциации CH_4 энергия диссоциации

Sodha

Mahendra Singh Sodha | 1953

Science and Culture (India) 19, 45-6 (1953)

Теплота диссоциации молекулы углерода; скрытая теплота сублимации углерода, теплота образования углеводов метана и содержание атома углерода в молекуле метана.

C.A. 1954 - 3134 d, e

CO

(7)

BD-291-10	1953

Sahni R.C.

Trans. Faraday Soc.,
1953, 49, N11,
1246-1253

V

CO

$D_0 = 6{,}9$ v.

1953

Valatin J.Y.

Proc. phys. Soc., 1953, A66, 1185

Предиссоциация и энергия диссоциации CO.

Автор полемизирует с Гейдоном относительно D_0(CO), защищая данные Yerö и Schmidt'a.

РЖХ-55-13-25579

РФР - 318-IV

954

CO

Aroeste H.

J.Chem.Phys.,22,1273

Correlation between infrared intensities,dissociation energies,and equilibrium intermolecular distance for diatomic molecule.

V

1954

CO

ИК

Dalby F.W., Dickey F.P., Williams D.

Phys. Rev., 1954, 93, 36 A

ИК эмиссионный спектр CO в области 2,4 μ

Кр. сообщ.

Источн. пламя O_2-C_2H_2 и O_2-CO

~~III - 122~~

CO (I) 7746 - IV 1954

CO^+ (Ie)

N_2 (I)

N_2^+ (Ie)

Fox R.E., Hickam W.M.
J.Chem.Phys., 1954, 22, N 12,
2059-2063 (англ)
Study of carbon monoxide,
nitrogen, propylene, and benzene
ionization probability
curves

РЖ., 1956, 6112

10

1954

CO

W. Gordi

J. Phys radium 15, 521-3

Спектроскопия в области длин волн 1-5 мм.

Результаты для CO.

CO (D)

C (ΔH_s)

A.P. (CO^+, O^+, C^+)

Вр- IV-264 1954

Lindholm E.

Arkiv.fys., 1954, 8, N 5, 433-440( )

Ionization and frágmentation of CO by bombardment with atomic ions. Dissociation of CO.

PX, 1956, 38675

Begin p. r.

Б, Б, Ю, М

1954

CO

Vincent-Yeisse J.

Compt. Rend., 1954, 239, 251

Измерение плотности и ширины линий в ИК-спектре газов и паров

N0, CH4, N2O

СХН

V

1955

CO

ИК

Blaine L.R., Plyler E.K., Tidwell E.D.

J. Res. Nat. Bur. Stand. USA, 1955, 55, 183

ИК спектр поглощения и излучения

CO в обл. 4-6μ

$\nu_0 = 2143{,}274 \pm 0{,}003$

$B_1 = 1{,}904994 \pm 0{,}000036$

$B_0 = 1{,}922523 \pm 0{,}000037$

$D_0 = 6{,}26 \pm 0{,}025 \times 10^{-6}$

$D_1 - D_0 = -2{,}99 \cdot 10^{-9}$

Разрешение линий 0,2-0,3 см⁻¹

2-1 $\nu_0 = 2116{,}80$ см⁻¹

3-0 $\nu_0 = 6350{,}42$ (а не 6350,47 как у Plyler,... J. Ch. Ph 20, 175 (1952))

Хорошее совпадение с результатами Goldberg, Müller Astrophys. J. 118, 397 (1953) наблюд. CO в спектре солнца

г. нет

Пост.	Goldberg Müller	Наросиц. работа
ω_e	2169,83	2169,830 ± 0,004
$\omega_e x_e$	13,297	13,297 ± 0,012
$\omega_e y_e$	0,0115	0,01150 ± 0,00014
B_e	1,93141	1,93130 ± 0,00005
α_e	0,017520	0,017520
γ_e	$2,96 \cdot 10^{-6}$	$4,5 \cdot 10^{-6}$
D_e	$6,18 \cdot 10^{-6}$	$6,26 \cdot 10^{-6}$
β_e	$-1,76 \cdot 10^{-9}$	$-2,99 \cdot 10^{-9}$

CO

HCl, HF
спектр

Coulon R., Vodar B. 1955

Nuovo Cimento 1955, suppl N3, al2, 670-674.

Вращ.-колеб. спектр HCl, HF и CO возбуждаемые посторонними газами под большим давлением.

✓ перевод

1955

N_2, (CO)

$D_0 = 9{,}756$

Douglas A.E

J. Phys. Chem., 1955, 59, 109–110

Новые спектрален. исследования простых молекул.

D_0(CO) не может быть определена однозначно из спектр. данных

ВФ-211-IV

ВФ-1268-III

РЖХ.55.33812

☒

CO

Do.

предиссоциация в спектре.

A. E. Douglas, C. K. Møller 1955

Canad. J. Phys. 33, №3-4, 125

Предиссоциация в спектре $C^{12}O$ и $C^{13}O$.

Полосы Ангстрема $C^{12}O$ и $C^{13}O$ фотографировались на спектрографе с большой дисперсией 0,7 А/мм и заново изучалось предиссоциация.

(35 ф.) решетка

Вар-219-IV

предиссоц. дает хорошие док-ва для гр диссоциации предел $C^{12}O$ лежит на $89595 \pm 30 см^{-1}$ выше над уровнем $v=0$ основного состояния. Для положительной полосы ($A'\Pi - X'\Sigma$) исследовалась снова и показано гр предиссоц. в $A'\Pi$ состоянии не наблюдается. (Особенность наб. в 3 см порядке 35ft ширина 0,23Å/мм).

Канты Ингрема:

	ν_0	B'	D'
0-1	20712.50	1.863	$5.4 \cdot 10^{-6}$
0-2	19297.00	1.863	
1-1	22719.76	1.837	

Наблюденному диссоц. пределу молек. СО(С) различные ($q(89595$ до $73684 см^{-1}$) в зависимости от сост. атомов-продуктов диссоциации

V ВФ-219-IV 1955

CO

D_0

предиссоц

Ангстрема $A^1\Pi - B^1\Sigma^+$

IV полосы $X^1\Sigma^+ - A^1\Pi$

Douglas A., Møller C.

Canad. J. Phys., 1955, 33, 125

Предиссоциация в спектре $C^{12}O$ и $C^{13}O$ ~~и возможное значение D_0~~

Решетка 21 ст

$D_0 = 89595 \pm 30$ см$^{-1}$ шк. Ангстрема 0,7 Å/мм

IV полосы 0,23 Å/мм

Полосы Ангстрема $C^{13}O$

	ν_0	B'	δ'	D'
0-1	20712,50	1,863		$5,4 \cdot 10^{-6}$
0-2	19297,00	1,863		—//—
1-1	22749,76	1,837		—//—

Диссоц. предел может соотв. значение от 89595 до 73684 см$^{-1}$ в зависимости от атомов - продуктов диссоциации.

РЖХ. 55.54406

CO ? 1955

D. Hadzi, A. Novak

Trans. Farad. Soc. 51, 1614-20.

И.к. спектр окси графита

V

IV-246 [1955]

CO 58

Хопфилда-Барьера

Herzberg G., Hugo T. J.

Canad. J. Phys., 1955, 33, 757

Запрещенные переходы в 2-атомных молекулах. IV. $a'^3\Sigma^+ \leftarrow X^1\Sigma^+$ и $e^3\Sigma^- \leftarrow X^1\Sigma^+$ полосы поглощения CO

$r_e = 1{,}351_8$ (a)
$1{,}393_3$ (e)

0,63 и 0,50 Å/мм

$B_0'' = 1{,}92265$

$D_0'' = 6{,}4_5 \cdot 10^{-6}$

$a'^3\Sigma^+$ $\nu_0 = 55823{,}0_7 + 1230{,}65_1(v'+\frac{1}{2}) - 11{,}013_0(v'+\frac{1}{2})^2 + 0{,}07378(v'+\frac{1}{2})^3 - 0{,}00115(\ )^4 - 1081{,}74$

$B_v = 1{,}3453 - 0{,}0187_2(v'+\frac{1}{2}) + 0{,}00020_5(v'+\frac{1}{2})^2 - 0{,}000005_1(v'+\frac{1}{2})^3$

нулевые энергии $X^1\Sigma^+$

$\lambda + \frac{1}{2}\gamma = -1{,}1_3$, $+0{,}8_4$

$\nu_0 = 65340{,}0_5 + 1093{,}9_{93}(v'+\frac{1}{2}) - 9{,}5_{78}(\ )^2 + 0{,}005_{82}(\ )^3 - 1081{,}74$

$e^3\Sigma^-$

РЖХ 56.67622 $B_v = 1{,}266_3 - 0{,}0179(v+\frac{1}{2}) + 0{,}0001(v+\frac{1}{2})^2$

$a'^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$			$e^3\Sigma^- - X^1\Sigma^+$	
v'-v''	ν_0	B_v	ν_0	B_v
0-0	55353,91	1,3360	64802,91	1,2574
1-0	56562,77	1,3177	65877,82	1,2399
2-0	57750,16	1,2995	66933,26	1,2221
3-0	58916,49	1,2823	67970,31	1,2048
4-0	60062,64	1,2658	68987,86	1,1878
5-0	61187,65	1,2478	69986,39	1,1720
6-0	62293,64	1,2307	70966,21	1,1542
7-0	63379,44	1,2140	71926,47	1,1360
8-0	64446,9	1,1950	72868,84	1,1214
9-0	65492,28	1,1816	73792,28	$1,105_2$
10-0	66520,39	1,1655	74696,06	1,0894
11-0	67529,5	$1,147_0$	75581,47	[illegible]
12-0	68519,71	1,1334	76448,12	1,0737
13-0	69491,25	$1,117_6$	77296,07	1,0582 1,0429
14-0	70444,37	1,1014	78125,33	1,0278
15-0	71378,91	1,0854	78935,95	1,01[illegible]
16-0	72295,14	1,0692	79727,95	0,9982
17-0	73192,54	1,0532	80501,38	0,9837
18-0	74071,60	1,0369		
19-0	74932,04	1,0206		
20-0	75773,91	1,0037		
21-0	76597,06	0,9869		
22-0	77401,27	0,9698		
23-0	78184,8	$0,95_8$		

0 (A) ВФ 241-IV 1955

ВФ-2209а-III

NO, N_2, O_2, CO (D)

Hagstrum H.D.
J.Chem.Phys., 1955, 23, N 6, 1178-1179
(англ.)

Новая интерпретация опытов по электронному угару в CO, N_2, NO и O_2.

РЖХ, 1957, № 9, 29554

10

1953

CO

Jarmain W. Fraser P.,
Nicholls R.
Astrophys. J. 122, 55-61

Вероятности переходов
в колеб. спектре
N_2, NO, O_2, O_2^+, OH, CO
и CO^+.

CO

Кнipe R.H., D.S. Gordon 1955

J. Ch. Ph., 23, 2097.

Спектр CO – O_2 взрыва

I видимая область.

Уширение линий
неизвестн.

Penner S.S., Drayse H. 1955

J. Ch. Ph. 23, 2244

Determination of absolute intensities from single from single- and multiple-path absorption measurement

U.K. map CO.

✓ Blaine, Connor W.S. 1955

CO 35 Plyler E.K., ~~и др.~~

J. ~~Am~~ Opt. Soc. Am., 1955, 45, 102

Определение скорости света по молекулярным постоянным CO.

$\nu_0 = 2143,274 \pm 0,0016$ В обл 4,67μ

$B_1 = 1,904994 \pm 0,000036$

$B_0 = 1,922523 \pm 0,000037$

$b_0 = 6,26 \pm 0,025 \cdot 10^{-6}$

IV-Стр-11

CO

Plyler E. K., Blaine L. R., 1955
Tidwell E. D.

J. Res. Natl. Bur. Std., 55, 183.

Infrared absorption and emission spectra of carbon monoxide in the region from 4 to 6 microns.

CO

Sun H., Weissler G. L., 1955

J. Chem. Phys., 23, 1625, 1955

Абсорбция поглощения света в вакуумном ультрафиолете от 955 до 1306 Å

Библ. Черенкова

v

O_2 Tinkham M., Strandberg M.W.P.,

1955

Phys. Rev. 97, (4) 937-951.

Тонкая структура невозмущенного состояния молекулы O_2.

CO

Varshni Y.P.,
Majumdar K.

1955

Спектроскопич. постоянные мол-л.

(См. SiO) III

ВФ-195-IV/1956

L(C) Bracchetti T. E.

D(CO) J. Ch. Ph., 1956, 24, 1103

Энергия диссоциации окиси углерода

Теперь хорошо установлено, что D(CO) = 11,126 и L(C) = 170 ккал

Неправильные величины ~~L(C)~~ = D(CO) = 9,6 эв получены по данным Langer и др. (C. A., 49, 2182h), есть их объяснение и приведены

C. A., 1956, 10507g

$e^- + CH_4 \rightarrow C^+ + 4H + 2e^-$. Но если рассматривать процесс $e^- + CH_4 = C^+ + 2H^- + 2H$, то тогда можно вычислить $D(CO) = 11,12$ эВ.

CO

D_0.

$D_0 = 11.1$ эв.

Т.Е. Вгаскей [ВФ-195-IV] 1956

J. Ch. Ph. 24, №5, 1103

Энергия диссоциации CO.

Возможно расширить противоречие между результатами последней работы (8055/1955) показывающей, что $D_0(CO) = 11.1$ eV. и результатами, полученными

методом электронного удара $D_0(CO) = 9.6$ эв (Р.А. 1011/1955).

Предполагалась реакция:

$$e^- + CH_4 \rightarrow C^+ + 4H + 2e^-;$$ если же вместо нее взять

$$e^- + CH_4 \rightarrow C^+ + 2H^- + 2H,$$ то энергия диссоц. CO должна соотв. $D(CO) = 11.1$ эв, в согласии с результатами первой работы

Д

ВФ-188-IV

CO

Barrow R.F., Gretzer W.B.

Malherbe J.F. R.Ph.Soc. 69A, 574

1956

Интенсивности полос системы $b^3\Sigma^+ - a^3\Sigma$

$D_0(CO) \leq 10{,}94$?

Гдр. V, 24-25

Энергия диссоциации

ВФ – 188 – IV

CO

Изучение предела предиссоциации

Barrow R.F., Gratzer W.B., Malherbe J.F. [1956]
Proc. Phys. S. 1956, 69A, 574

Интенсивность полос $b^3\Sigma^+ - a^3\Pi$ системы CO

$D_0(CO) \leq 10{,}95$ эв.? Гейдон в 1953 (монография) обратил, что если обнаружение полос с $v' \geq 2$ в системе $b^3\Sigma^+ - a^3\Pi$ обусловлено предиссоциацией диссоциационным пределом CO лишь ниже 10,95

Хотя нельзя утверждать, что прогрессия полос вообще не возбуждается, изучение

Пр. V, 24.

интенсивности полос системы показывает что их интенсивности очень малы..

CO | R.F. Barrow, W.B. Gratzer, | 1956
J.F. Malherbe.

$D_0 \leq 10$, 947 | Proc. Phys. Soc. A69, 574-6.

. | 887-1288 — 11

. | Исслед. интенсивности полос в системе $b^3\Sigma^+ - a^3\Pi$ окиси углерода

Полоса с $v'=2$ в системе $b^3\Sigma^+ - a^3\Pi$ если вовсе не отсутствует,

Ph. Abs. 60 | значительно слабее, чем мы ожидали. Если заранее

1177

связан с предыдущей, то

$$\mathcal{D}_0(CO) \leq 10{,}94 \text{ еб}.$$

Возможно однако, что эффект связан с возмущениями.

НЭ (Be, го, ге) 206-IV 1956

СО (Do-брош. нет.)

Cowan M., Gordy W.,

Phys. Rev., 1956, 104, №2, 551-552 (англ).

Дальнейшее распространение методов микроволновой спектроскопии на субмиллиметровый диапазон.

РЖХ, 1957, №15, 50458

10

CO | Kostkowski H.J., Bass A.M. (1956)

Spectrochim. acta, 1956, 8, 314

Line-widths and shapes in CO at pressures above one atmosphere

Up. cross

$\frac{CO}{D_0}$

Lagergren C. R. 1956

Dissert. Abstracts XVI, №4, 740.

Определение $D_0(CO)$ и энергр. сродства углерода методом электронного удара.

$D(CO) = 11{,}1$ эв.

сродство к эл-ну C $1{,}1 \pm 0{,}2$ эв.

$CO(X^1\Sigma^+) \to C^*(p^3\,{}^1D^0)$; $C^*/p^3\,{}^1D^0) \to C^+/{}^2P$

C

Lagergren C.R.,

1956

Diss. Abst. 1956, 16, 770.

Measu.
decrease
e-yield
$D_0(Co) = 11,1$ Co

93

CO (У) 267-IV 1956

Monigny J.,

J. Chem. Phys., 1956, 25, №4, 787 (англ).

Измерение потенциалов возбуждения молекул при помощи ионного источника

РЖХ, 1957, №10, 33521.

2

V

CO

NO

N_2O

1956

Palik E.D., Rao K.N.

J. Chem. Phys., 1956, 25, 1174

Чисто вращательный спектр CO, NO и N_2O между 100 и 600μ.

$C^{12}O^{16}$ $B_0 = 1{,}92252$ $D_0 = 6{,}26 \cdot 10^{-6}$ (JOSA 45,102)

ИК: 20–600μ наблюд. J = 3 до 23

CO
CH_4

J. Vincent 1956
Cahiers de Phys, 173, 28-31.

Apparent absorption and real absorption in the vibration-rotation spectra of gases

Doublet band except CO in CH_4.

P.D. 60
5/8/

СО

к-вр. спектр поглощения

Василевский К.П.

1956

Опт. и Спектр. 1, 587

Колеб.-вращ. спектры поглощения и испускания паров окиси углерода.

369

1957

$CO^{16}O^{18}$)
N_2O) (ν_i, силовые постоянные)

Eggers D.F., Arends C.B.
J.Chem.Phys., 1957, 27, N 6,
1405-1410 (англ.)

Интенсивности в инфракрасном спектре $CO^{I6}O^{I8}$ и моменты связей

РХ., 1958, N 12, 38Б43

10

Harteck P., Dondes S. 1957

Реакция $CO + O_3$

J. Chem. Phys., 1957, 26, 1734.

Реакция CO и озона.

Исследована при 35°, 100°, 180° и 258°C

CO Оттисси 3171 1957

G. Herzberg.

(Do) Mem. Soc. Roy. Sci. Liège

1957, 18, 397-418.

IV-270

CO ($\Delta E_{исп.}$, ΔS_s) 1957

Marcus Rudolph J.

J.Chem.Phys. 1957, 26, N 6, 1765-1766 (англ.)

Estimation of energies and entropies of vaporization

РЖ., 1958, N 5, 13730

Б

√ CO 72 Onaka R. 1957

A'Π возм.

J. Chem. Phys., 1957, 26, 1763(4)

Возмущение при v=6 A'Π состояния CO.

IV-Автор

$A^1\Pi \to X^1\Sigma$ спектрограф решр. сила 170000 дисперсия 3,3-3,8 Å/мм

между 6-13 и 6-14

$T_{v=6}(A^1\Pi) = 74197{,}44 + 1{,}4616\,J(J+1)$

$T_{v=17}(a'^3\Sigma^+) = 74274{,}28 + 1{,}0532\,K(K+1)$

277-IV

1957

CO (Bo, Do, Le, Ve, Be, Be, We, Xe We, Je We)

Rank D.H., Guenther A.H., Saksena G.D., Shearer J.N., Wiggins T.A.
J.Opt.Soc.America, 1957, 47, N 8, 686-689 (ang.)
Tertiary in terferometric wavelegth standards for some lines of the 1-0 band of carbon monoxide. The velocity of light derived from a band spectrum method

FX., 1958, 69795

10

CO

D.H. Rank, A.H. Guenther, G.D. Saksena, J.N. Shearer, T.A. Wiggins. 1957

JOSA, 48, 686-9

W-Eff

Инфракрасные спектры 3-метил 2-6 полен СО при 426 осц/сек

оригинал. статьи 1 part in 18*

LA51

14415 i

Кроме того изм. R(b) метил 3-6 полен. Эти данные также С.

результаты обработки части след. знач.

$B_0 = 1{,}922511 \pm 0{,}0000035$ $D_0 = 6{,}117 \cdot 10^{-6} \pm 0{,}01 \cdot 10^{-6}$

$B_2 - B_0 = -0{,}035008$; $D_2 - D_0 = -1{,}9 \cdot 10^{-9}$.

$B_e = 1{,}931285$; $\alpha_e = 0{,}017535$ $\gamma_e = 1{,}01 \cdot 10^{-5}$

$\beta_e = -1{,}0 \cdot 10^{-9}$ $\omega_e = 2169{,}829$; $x_e\omega_e = 13{,}295$; $y_e\omega_e = 0{,}0115$.

Знач. B_0 в связ с послед. м.в. данными приводит к знач.

$C = 299{,}793{,}7 \pm 0{,}7$ км/sec.

1957

CO

Rank D.H., Ynenther A.H., Saksena Y.D., Shearer J.N., Wiggins T.A.

J. Opt. Soc. Am, 1957, 47, 686

Изм. интерферометрически 2-0 и 3-0 полосы CO с точн. 10^{-7}. Вместе с резулт. друг. наблю. даны след. знач. постоянных

$\omega_e = 2169{,}829$

$\omega_e x_e = 13{,}295$

$\omega_e y_e = 0{,}0115$

$B_e = 1{,}931285$

$\alpha_e = 0{,}017535$

$\gamma_e = 1{,}01 \cdot 10^{-5}$

$\beta_e = -1{,}0 \cdot 10^{-9}$

$B_0 = 1{,}922521 \pm 0{,}0000035$

$D_0 = 6\,117 \cdot 10^{-6} \pm 901 \cdot 10^{-6}$

$B_2 - B_0 = \cancel{1{,}93}\ -0{,}035008$

$D_2 - D_0 = -1{,}9 \cdot 10^{-9}$

[redacted]

$c = 299793{,}7 \pm 0{,}7$ км/сек

Р.А. 1957, № 19, 9065

Вф-317-IV 1957

Tanaka Y., Jursa A.S., LeBlanc F.

J. Chem. Phys., 1957, 26, 862.

CO

спектр

у.-ф.-

Спектр поглощения CO в вакуумной у.-ф. области.

В системах a-X, a'-X, d-X и e-X

наблюдаются процессы (v', 0) (v' = 5, 21, 21 и 17)

Чая полос на. изуч. A-X (v', 0) и (v', 1) до v' = 20 и 13

Неск. полос b-X, C-X и E-X.

$D_0(CO)$ =

= 11,111 эв

Подтверждается значение $D_0(CO)$ = 11,111 эв.

Кол. пост. не вычислены

перевод

CO

Y. Tanaka, A. S. Jursa, F. LeBlanc

1957

BQ-317-IV

J. Ch. Ph., 26, 862.

Спектр поглощ. CO в вакуумн. ультрафиолет.

$(E^1\Sigma^+, C^1\Sigma^+, B^1\Sigma^+) - X^1\Sigma^+$ полос

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

перевод

$a\,\Pi_r - X^1\Sigma^+$ $\quad b\,^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$

CA 51

$a'\,^3\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ $\quad e\,^3\Sigma^- - X^1\Sigma^+$ полос

11850 h

$d\,^3\Pi_i - X^1\Sigma^+$

CO

1957

Toennies J.-P., Green E.F.,

J. Chem. Phys., 1957, 27, 981(L).

Энергия диссоциации CO и N_2 по исследованию обращенной ударной волны [J. Chem. Phys., 1957, 26, 655]

Поправка.

Энергия диссоциации

CO

N_2

ВСР-278-III

ВСР-936-III

1957

CO

N_2

D_0

Toennies J.P., Yuen E.F.

J. Chem. Phys., 1957, 26, 655

Энергии диссоциации CO и N_2, полученные на основании изучения отраженной волны.

$D_0 = 9{,}76$ (N_2)

$D_0 = 11{,}1$ (CO)

См. поправку: J. Ch. Ph, 1957, 27, 981

323 - IV

CO, O_2, NO, Cl_2, Br_2, I_2, HCl, HBr, HI, H_2O, H_2S, 1957
CO_2, SO_2, CS_2, N_2O, NO_2, O_3, NH_3, CH_4, C_2H_6, CH_3Cl,
CH_3Br, CH_3I, C_2H_5Cl, C_2H_5Br, C_2H_5I, CH_2Cl_2,
$CHCl_3$, CCl_4, C_2H_4, C_2Cl_3H, C_2H_2, CH_3OH, C_2H_5OH(I)

Watanabe K.,
J.Chem.Phys., 1957, 26, N 3, 542-547 (англ.)
Потенциалы ионизации некоторых молекул.

РЖХ, 1957, № 24, 76390

Есть ф. к.

5598 — IV

1958

SiO_2, SiC, CO, Si, C, SiC (C)

CO (P)

Baird J.D., Taylor J.
Trans.Faraday Soc., 1958, 54, N 4,
526-539

Reaction ...

M,J

CO

Burrus C. A., 1958

J. Chem. Phys., 28, 427, 1958

В ф-ле уширения Штарка-эффекта найден дипольный момент CO,
$\mu = 0{,}112 \pm 0{,}005$ D.

Библ. группа

CO

1958

Emissivity of the 4.3-μ band of carbon monoxide. Gilbert N. Plass (Aeronutronic Systems, Inc., Glendale, Calif.). *U.S. Dept. Com., Office Tech. Serv., PB Rept* 138,860, 35 pp. (1958).—The spectral emissivity of CO_2 in the 4–5-μ region is calcd. as a function of temp., pressure, and amt. of emitting gas. The elec.-moment matrix element can be calcd. by using the harmonic oscillator approxn. to represent the vibrational states. The emission of the isotopic mol. $C^{13}O_2$ was taken into account. In the choice of a proper model to represent the CO_2 emission, at room temp., the Elsasser model was a good representation of the spectral band, but at higher temps. this was changed to the random Elsasser model as more vibrational bands overlap. At approx. 2000°K. the statistical model was used. The emissivities were calcd. on an electronic computor which took into account up to 890,000 spectral lines at 2400°K. The shift of the emission to lower frequencies as the temp. increased is quant. explained. The emission from any flame in the 4–5-μ region was readily calcd. from the results. K. L. C.

C.A. 1961, 55, 14

16141 Be

ВР-IV-227

CO (длина связи, Do) 1958

Glockler G.,
J.Phys.Chem.,1958, 62, N 9,
1049-1054 (англ.)

Энергии и длины связей углерода с кислородом

РХ.,1959, N 8,26104

М.Ю

1957

:C=O

Sidman J. W.,

J. Chem. Phys., 1957, 27, 429.

Электронный спектр и структура карбонильной группы.

молек.

разб.

C

CO

(DD)

Knight H.T., Rink J.-R.

J. Chem. Phys., 1958, 29, 449.

Теплота сгор. углерода и энергия диссоциации CO на основании рентген. спектра рентген. спектрометрии ударных волн

Работа еще не опубликована, но результаты в пользу высших значений

Цифрему бесспорно подтверждают $D_0(CO) = 256$ ккал и $\Delta H_{f0}(C) = 170$ ккал

1958

CO

Mulliken R.S.

Can. J. Chem., 36, 10 (1958).

На основании расчетов рядов колебательных состояний принимается, что в состояние является состоянием $^3\Delta$. Отмечается, что увеличение значения ω_e для этого состояния из-за неточности отнесения полос мол. замечено, а значения r_e и T_e завышены.

CO

1458

G. Milazzo

Metallurgia Ital., 50, 317-18

Сравнительные таблицы для идентификации дыма воск в Итальянской области.

Стекродорогомиль сиро.

CO в обл. 1723,9 — 1576,7

IV-329 1958

H_2O, Cl_2, HCl, H_2, N_2, CO, CO_2 (Cv)

Cl_2, H_2, F_2, Cl_2, ClF, H_2O (энергия дисс./

Медведев В.А.
Исследование термодинамических свойств веществ методом взрыва в сферической бомбе

Ж.физ.хим., 1958, 32, № 8, 1851-58

Б.Г. ф.к.

CO

E.K. Plyler, H.C. Allen, E.D. Tidwell. 1958

J. Res. NBS 61, N1, 53-6.

Эмиссионный спектр CO в обл. 2,3-25 μ

4000 - 4360 см⁻¹ (2-0)(3-1)(4-2)(5-3)(6-4)

$B_0 = 1{,}922511 \pm 0{,}000025$

$D_0 = (6{,}13 \pm 0{,}02) \cdot 10^{-6}$

Ранее с м. вышл. для

$c = 299794 \pm 3$ км/сек

CA-53, 1959
N7, 5864a

CO (Be, αe, γe, De) 286-IV 1958

Rosenblum B., Nethercot A.H., Townes C.H.

Phys. Rev., 1958, 109, №2, 400-412 (англ)

Отношение масс изотопов, магнитные моменты и знак электрического дипольного момента окиси углерода

РЖФ, 1959, №8, 26171.

+2

CO

Rosenblum B., Townes C.H., Geschwind S.,

Rev. Mod. Phys., 30, 409, 1958

1958

Библиогр. Зеркберга.

CO

Toennies J. P. 1958

Dissert. Abstr., 18, N 2, 423

Исследование энергий диссоциации N_2 и CO и ионизации аргона с помощью отраженной ударной волны.

III

$D_0(CO) = 11,1$ эв $\left(256 \frac{ккал}{моль}\right)$

X

1959

Co Berkowitz J.

J. Chem. Phys., 30, 858.

Do. Корреляционная схема двухатомных спектров

(см.

⊠

III LiO

1959

Ca

Lascombe J., Pham Van Huong, Josien M. L.

Колебательно-вращательная структура в спектрах некоторых простых молекул в растворе. — Bull. Soc. chim. France, 1959, n 7-8, 1175-1180.

ф. 1961. 4Б169

1960

CO

Bernard J. Ransil

Te, Do

ReVs.Mod.Phys.,32,239

Studies in molecular structure. I. Scope and summary of the diatomic molecule program.

Cat.
Ch. Ind X
f-Tm

1960

CO

молек. расчет

Brion H., Moser C.,

J. Chem. Phys., 1960, 32, 1194-99

Электронная структура молекулы углерода

Расчет энергии возбуждения и диссоциации, сравнение с экспериментом

Состояние d - состояние $^3\Delta$

ВОР-1961-IV

1960

M. J. Cowan

Dissert. Abstr., 20, 4139-40, 1960

X

И.б. инфраскопия в ОП.
0,5-1,5 мм.
НЗ, Ne, Br, Zn и Co.

CA 54
13861 f

CO (Tm) 201 - IV 1960

Clusius K., Piesbergen U., Vaudet E.
Helv. chim. acta, 1960, 43, N 7, 2059-2063 (нем.)

Ergebnisse der Tieftemperaturforschung. XXXIII. Die Schmelzkurve von Kohlenoxyd. bis 250 Atm. und sein Volumensprung am Schmelzpunkt.

РЖ Хим., 1961, 21Б341

5 ф 2

1960

CO

Eaton D. R.

Canad. J. Phys., 1960, 38, 390

Infrared temperature and line strength measurements on carbon monoxide excited in a radio-frequency discha ge.

Summer i 429

emb ommuck

CO

Gustafsson E., Lindholm E. 1960

Arkiv Fysik 18, 219-39, 1960

BOP - 1121-III

Ionization and dissociation of H_2, N_2, and CO in charge exchange collisions with positive ions.

C.A. 1961. 55. 18
17223i
17224a

(Cull. H_2) III

CO

Ф.

ВФ-249-IV

2В77. Электронная структура и энергия связи окиси углерода. Hurley A. C. Electronic structure and binding energy of carbon monoxide, «Revs Mod. Phys.», 1960, 32, № 2, 400—411 (англ.).—Методом валентных связей (ВС) с учетом ионных структур при эксперим. значении межатомного расстояния $R_e = 2{,}1319$ ат. ед. рассчитана энергия связи D_e и дипольный момент μ окиси углерода. В качестве двухцентровых одноэлектронных ф-ций использовались ортогонализованные (по Шмидту) слейтеровские АО атомов С и О. Эффективные заряды этих АО выбирались из условия минимизации энергий основных состояний $s^2p^4, {}^3P$ и $s^2p^2, {}^3P$ атомов О и С соответственно. При расчете учитывались только те ВС, которые дают вклад в электронную конфигурацию $\sigma^{10}\pi^4$. Это дало возможность свести вычисление матричных элементов векового определителя (48×48) к расчету определителей (6×6) (число π-структур) и (8×8) (число σ-структур). Вычисленное значение $D_e = 7{,}50$ *эв*. Уменьшение числа структур до 23 немного изменяет эту величину (7,45 *эв*). Указано, что учет всех других структур, дающих вклад в ${}^1\Sigma^+$-состояние и возникающих из конфигураций π^2, π^6 и π^8, изменил бы энергию менее чем на $\sim 0{,}1$ *эв*. Учет межэлектронной корреляции по Моффиту существенно уве-

1960

см. н/об

Р-1961-2

личивает D_e, давая для ее нижней границы 11 *эв*. В соответствии с этим из трех возможных значений энергии диссоциации, полученных спектроскопически (9,28; 9,74; 11,24 *эв*), по мнению автора, следует принять наибольшее (что согласуется также с термохимич. данными). Рассчитанная величина $\mu = 1{,}00$ ед. Дебая (метод ВС) и —0,37 ед. Дебая (ВС + корреляция Моффита), причем первая правильного знака, но слишком велика, а вторая по абс. величине существенно ближе к эксперим. значению ($\mu_{эксп} = 0{,}12$ ед. Дебая), но противоположного знака. Анализ расчета, при котором выясняется очень большой вклад атомного момента С, показывает, что расхождение между теорией и экспериментом связано с большими погрешностями, вводимыми при аппроксимации АО Хартри — Фока слейтеровскими АО.

Е. Пшеничнов

1960

Co

В 9р-249-IV

3Б98. Электронная структура и энергия связи окиси углерода. Hurley A. C. Electronic structure and binding energy of carbon monoxide. «Revs Mod. Phys.», 1960, 32, № 2, 400—411 (англ.).—Методом суперпозиции валентных схем рассчитана энергия связи (D) молекулы окиси углерода при эксперим. межъядерном расстоянии. Использовались ортогонализированные слейтеровские АО, эффективные заряды которых выбирались из условия минимума энергий основных состояний ($s^2p^4\ ^3P$ и $s^2p^2\ ^3P$) атомов O и C. При расчете учитывались только структуры типа $\sigma^{10}\pi^4$. Вычисленная с учетом 48 (а также 39) структур энергия связи равна

см. н/об

х·1961·3

7,5 *эв*. Уменьшение числа структур до 23 слабо изменяет эту величину (7,45 *эв*). Учет всех других структур, дающих вклад в состояние $^1\Sigma^+$ и возникающих из конфигураций $\sigma^{12}\pi^2$, $\sigma^8\pi^6$ и $\sigma^6\pi^8$, изменило бы энергию менее чем на $\sim$ 0,1 *эв*. Учет корреляции электронов по Моффитту существенно увеличивает энергию связи, давая для ее нижней границы 11 *эв*. В соответствии с этим из трех возможных спектроскопич. значений энергий диссоциации (9,28, 9,74 и 11,24 *эв*) следует принять наибольшее. Рассчитан также дипольный момент $\mu = 1{,}00$ *D* (без учета корреляции) и $-0{,}37$ *D* (с учетом корреляции по Моффитту). Первая величина имеет правильный знак, но слишком велика, а вторая ближе к эксперим. величине (0,12 *D*, C−O+), но имеет неверный знак. Отмечается очень большой вклад атомного дипольного момента C (~ 3 *D*) в μ: расхождение между теорией и экспериментом связано с большими погрешностями, обусловленными использованием слейтеровских АО. Е. Никитин

1960

2Б49. Факторы Франка — Кондона и r-центроиды для некоторых полос ($A'\Pi - X^1\Sigma$) четвертой положительной системы CO. Jarmain W. R., Ebisuzaki Ruby, Nicholis R. W. Franck-Condon factors and r-centroids for some bands of the CO fourth positive ($A^1\Pi - X^1\Sigma$) band system, «Canad. J. Phys.», 1960, 38, № 3, 510—512 (англ.).— Методом, предложенным ранее (РЖХим, 1955, № 14, 28259), рассчитаны факторы Франка—Кондона $q_{v''v'}$ и элементы r-центроида $r_{q''q'}$ для четвертой положительной системы полос CO, соответствующих спектральной области 1500-2000 A (v', $v'' < 7$). Е. Никитин

ж. 1961·2

1960

N_2, CO

7Б50. **Гибридизация в окиси углерода.** Jaffé H. H., Orchin M. Hybridization in carbon monoxide. «Tetrahedron», 1960, 10, № 3—4, 212—214 (англ.).— Проведено качеств. рассмотрение МО в изоэлектронных молекулах N_2 и CO. В молекуле (ось z — линия связи) АО s и p_z имеют одинаковую симметрию и гибридизованы, давая две гибридные σ-орбиты (нижняя σ_1 и верхняя σ_2). В случае N_2 энергии АО обоих атомов одинаковы; неподеленные пары электронов N находятся на орбитах σ_1, имеющих преимущественно s-характер, а в образовании σ-связи принимают участие σ_2-орбиты, имеющие преимущественно p-характер. В случае CO АО кислорода лежат ниже соответствующих АО углерода. Поскольку эффективная связь

см. н/об

ж.1961.7

образуется только между АО, близкими по энергии, то σ-связь в молекуле СО образуется из σ_1-орбиты атома С и σ_2-орбиты атома О. Неподеленная пара электронов атома О занимает σ_1-орбиту, имеющую преимущественно *s*-характер, а неподеленная пара электронов атома С занимает высоколежащую σ_2-орбиту, имеющую преимущественно *p*-характер. Последнее объясняет нуклеофильный характер СО. Указано также, что в СО первая свободная МО (π^*) близка по энергии к p_π-орбитам изолированного атома С, но не атома О. Поэтому π^* должна в основном состоять из p_π-орбиты атома С, что объясняет способность СО быть акцептором электронов. Полученные результаты согласуются с колич. расчетами N_2 (РЖХим, 1956, № 13, 38639) и СО (РЖХим, 1954, № 12, 30202).

Е. Шусторович

1960

CO

Jaffé H.H., Orchin M.
Гибридизация в окиси углерода. —
Tetrahedron, 1960, 10, N 3-4,
212-214.

Ill. N 2

x.1961.7550

N_2
CO

Kohin B.C.

1960

J. Chem. Phys., 1960, 33, № 3, 882-889.

Молекулярное вращение в кристаллах N_2 и CO.

x.1961.13
136250

(См. N_2) III

CO

1960

The $^1\Sigma^+$ excited states of carbon monoxide. H. Lefebvre-Brion, C. M. Moser (Centre mécanique ondulatoire appliquée, Paris), and R. K. Nesbet. *J. Chem. Phys.* 33, 931–2 (1960).—The addn. of functions from the *M* shell improves the correspondence between theory and expt. for the ultraviolet spectrum of CO much more than does doubling the no. of *L*-shell functions, although doubling the *L* shell gives a significantly greater improvement to the total energy of the ground state. Henry Leidheiser, Jr.

W-2 B

C.A. 1961 55 8 70276

CO

11Б54. Возбужденные $^1\Sigma+$-состояния окиси углерода. Lefebvre-Brion H., Moser C. M. The $^1\Sigma+$ excited states of carbon monoxide. «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 3, 931—932 (англ.).—Отмечается непригодность одноконфигурационного приближения метода самосогласованных МО, постороенных из АО L-слоя, к рассмотрению высших возбужденных состояний двухатомных молекул элементов второго периода: рассчитанные энергии возбуждения лежат выше энергий ионизации. Рассмотрено 2 возможных пути уточнения метода расчета: 1) использование АО L-слоя с различными экспонентами; 2) использование АО M-слоя. На примере расчета вертикальных энергий возбуждения состояний $B^1\Sigma+$, $C^1\Sigma+E^1\Sigma+$ молекулы CO (эксперим. значения которых $\sim$11 *эв*) показано, что 1-й путь неэффективен (рассчитанные энергии возбуждения $\sim$20 *эв*). В то же время расчет в 6-конфигурационном приближении с учетом 1 s-, 2 s-, 2 p-, 3 s- и 3 p-АО (со слейтеровскими эффективными зарядами) приводит к разумным энергиям возбуждения цифры в скобках — эксперим. значения в *эв*): $B^1\Sigma+$ 11,12 (10,78); $C^1\Sigma+$ 11,78 (11,40); $E^1\Sigma+$ 13,32 (11,52). Т. Ребане

1960

11-Б54

х.1961.11

CO

Loewenstein, R. V. 1960

J. Opt. Soc. Am., 50, 1163.

Interferometric spectra of ammonia and carbon monoxide in the far infrared

(см. NH_3, III)

1960

CO

молек. данные

Merryman P., Moser C. M.,
Nesbet R. K.,
J. Chem. Phys., 1960, 32, 631

Низкие возбужденные электронные состояния молекулы углерода
$^3\Sigma^+$, $^3\Pi$, $^3\Sigma^-$ и $^1\Pi$ состояния имеют
хорошо выраженные минимумы.

CO, HCl, HCl, HBr. молекул. постоянн.

Mould H. M., Price W. C., Wilkinson G. R., Spectrochim. acta, 1960, 16, № 4, 479-492.

1960

Излучение в инфракрасной области газов, возбужденных радиочастотным разрядом.

Х. 1962. 3
36137

1960

CO

Nicholls R. W., Fraser P. A.
Jarmain W. R., McEachran R. P.
Вероятности колебательных переходов двухатомных молекул, сводка результатов.
IV. BeO, BO, CH+, CO, NO, SH, O_2, O_2^+ —
Astrophys J., 1960, 131, n 2.
399-406

ф. 1961: 2B106

Спектры

N-8516

1960

N2 CO

3H99. Интерпретация распределения интенсивности в системах Лаймана — Бёрджа — Хопфилда N_2 и четвертой положительной системы CO. Nicholls R. W. Interpretation of intensity distributions in the N_2 Lyman — Birge — Hopfield and CO fourth positive band systems. «Nature» (Engl.), 1960, 186, № 4729, 958—959 (англ.).— На основании старых фотографич. данных по распределению интенсивности в полосах системы $a^1\Pi_g^+ - X^1\Sigma_g^+ N_2$ (Birge R. T., Hopfield J. J. «Astrophys. J.», 1928, 68, 257) и $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ CO (Headrick L. B., Fox G. W. «Phys. Rev.», 1930, 35, 1033) и использования рассчитанных факторов Франка — Кондона и компонент $r_{vv'}$ — центроида для этих переходов показано, что для 19 полос шести прогрессий ($v' = 0 \div 5$) N_2 и 11 полос четырех прогрессий ($v' = 0, 1, 3, 4$) CO дипольный момент перехода можно считать не зависящим от межъядерного расстояния.

Е. Никитин

Зоол.

90.1961.3

CO

(1960

4B47. **Соотношения между порядком, энергией и длиной связи для связей углерод — кислород.** Pilar Frank L. Bond-order (bond-length and bond-energy) bond-length relations for carbon-oxygen bonds. «J. Molec. Spectrosc.», 1960, 5, № 1, 72—77 (англ.).—На основании выполненных ранее расчетов порядков связей в фуране, H_2CO, CO_2, CO и CO^+, эксперим. длин и энергий связей CO в этих соединениях построены корреляционные диаграммы между порядком, энергией и длиной связи CO. Из этих диаграмм следует, что кислород фурана незначительно участвует в сопряжении и отношение обменных интегралов β_{CO}/β_{CC} порядка 0,1. Такое представление об электронной структуре фурана согласуется с его реакционной способностью. Е. Никитин

00.1961.64

450-IV I960

ω_i (CO_2, CO, HCl, HBr, NH_3, C_2H_2, CH_4, N_2O, H_2O)

Plyler E.K., Danti A., Blaine L.R., Tidwell E.D.

J.Res.Nat.Bur.Standards, I960, A64, NI, 29-48 (англ.)

Vibrationrotation structure in absorption bands for the calibration of spectrometers from 2 to I6 microns.

РХ, I962,

I6I26

BB-5186-III

10

1960

Richardson James W.

Улучшенные волновые функции в методе молекулярных орбиталей и ядерная квадрупольная связь в CO, N_2 и Li_2 — Revs. Mod. Phys., 1960, 32, N2, 461-465.

CO

CO

1960

V7 B779. **Влияние N_2 на интенсивность полос CO в тлеющем разряде.** Радиков Д. Н., Моспанов В. С. «Научн. ежегодник за 1958 г. Черновицк. ун-т». Черновцы, 1960, 493—494

Экспериментально исследованы изменения относительной интенсивности полос третьей положительной системы спектра излучения CO в тлеющем разряде переменного тока в присутствии различных кол-в N_2. Исследование проводилось при силе разрядного тока 50 *ма* и плотности тока 0,1 *а/см*^{2}, при постоянном парц. давлении CO 0,2 *мм* рт. ст. и различных парц. давлениях N_2 0,6; 1,0 и 1,4 *мм* рт. ст. Интенсивности некоторых полос CO увеличиваются пропорционально парц. давлению N_2 в газовой смеси. По мнению авторов, это можно объяснить только передачей энергии молекулам CO от возбужденных молекул N_2 путем соударений II рода.

Ю. Емельянов

X·1964·7

1960

К СО

5В173. Очень точные длины волн в инфракрасной области. Rank D. H., Skorinko George, Eastmann D. P., Wiggins T. A. Highly precise wavelengths in the infrared. «J. Molec. Spectrosc.», 1960, 4 № 6, 518—533 (англ.).—Критически пересмотрены результаты измерений частот колебательно-вращательных спектров некоторых молекул, проделанных в лаборатории авторов за последние годы. Приводятся значения волн. чисел для вращательных линий полос 001—000, 101—000, 002—000 и 0110—000 молекулы $HC^{12}N$ вплоть до $J = 30$ и полос 2—0 и 1—0 молекулы CO до $J = 51$. Таблицы содержат результаты измерений и частоты, рассчитанные с помощью молекулярных постоянных, определенных из положения линий, наиболее свободных от наложения. Даны соответствующие значения длин волн, измеренные в вакууме и приведенные к стандартной атмосфере. Приведены использованные значения молекулярных констант. Н. Орлова

ф·1961·5

CO

1960

вч разряд

4В212. Изучение спектра окиси углерода при помощи высокочастотного (33 *Мгц*) разряда. Сато К. «Бунко кэнкю, Bunko kenkyu, J. Spectroscop. Soc. Japan», 1960, 8, № 3, 145—149 (японск.; рез. англ.).—Применение ВЧ-разряда (33,3 *Мгц*) позволило получить чистый спектр триплетного состояния молекулы. CO. Частоты наблюдавшихся спектральных линий сравнены с частотами линий, найденных другими авторами.

ф·1961·4

CO

1960

21Б108. Исследование спектра монооксиси углерода при возбуждении в разряде с частотой 33 *Мгц*. Sato Kenzo. «Бунко кэнкю, Bunko kenkyu, J. Spectroscop. Soc. Japan», 1960, 8, № 3, 145—149 (японск.; рез. англ.).—Изучение спектров испускания триплетных полос молекулы CO, возбуждаемых в различных условиях, показало, что характер спектра испускания сильно зависит от условий эксперимента. При использовании в качестве источника возбуждения спектра ВЧ-разряда с частотой 33,3 *Мгц* получены спектры триплетных полос CO в широкой области длин волн.

Из резюме автора

IV-290

CO

1960

A study of the spectrum of carbon monoxide by a high-frequency discharge. Kenzo Sato (Univ. Chiba). *Bunko Kenkyu* 8, 145–9(1960).—Fine structure of the CO band of the triplet band series was compared with the aid of various excitation methods. A 33.3-Mc. discharge coming from a quartz oscillator gave a very distinctive spectrum and enabled the measurement in a wide range. Kazuo Saito

W-990

C.A. 1962. 56. 13
15057c

СО

1960

Шваммрадзе Р.Р.,
Оганезов К.А.,
Чикладзе Б.Я.

Оптика и спектроскопия, 8, 452

Изотопические сдвиги для полос в электронно-колебательных спектрах ме-

CO

1960

Potential energy curves for CO. Irwin Tobias, Robert J. Fallon, and Joseph T. Vanderslice (Univ. of Maryland, College Park). *J. Chem. Phys.* 33, 1638–40(1960).—Potential energy curves for the $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi_r$, $a'^3\Sigma^+$, $d^3\Delta$, $e^3\Sigma^-$, $A^1\Pi$, and $B^1\Sigma^+$ electronic states of the CO mol. were calcd. by the Rydberg-Klein-Rees method (Rydberg, *CA* 26, 2375; Klein, *CA* 26, 5803; Rees, *CA* 42, 1771*f*). The curve for the $A^1\Pi$ state must bend sharply at 1.9–2.1 A. or it must pass through a max. in order to reach the proper dissocn. limit. Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1961. 55 : 18
17194d

CO

1960

8B44. Кривые потенциальной энергии CO. Tobias Irwin, Fallon Robert J., Vanderslice Joseph T. Potential energy curves for CO. «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 6, 1638—1640 (англ.).—Методом Клейна — Ридберга по эксперим. спектрам молекулы CO определены кривые потенц. энергии электронных термов $X'\Sigma+$, $a^3\Pi$, $a'^3\Sigma+$, $d^3\Delta$, $e^3\Sigma'$, $A'\Pi$, $B'\Sigma+$ (последний из них соответствует диссоциации на возбужденные атомы). При межъядерных расстояниях до $R \sim 2$ Å терм $A'\Pi$ в исследуемой области R приближается к диссоциационному пределу значительно быстрее других, так что при $R > 2$ Å соответствующая кривая либо должна круто менять свой ход, либо проходить через максимум.

Е. Никитин

90.8.1961

CO

1960

15Б62. Кривые потенциальной энергии молекулы CO. Tobias Irwin, Fallon Robert J., Vanderslice Joseph T. Potential energy curves for CO. «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 6, 1638—1640 (англ.).—Методом Клейна — Ридберга по эксперим. спектрам молекулы CO определены кривые потенциальной энергии для электронных термов $X^1\Sigma+$, $a^3\Pi$, $a'^3\Sigma+$, $d^3\Delta$, $e^3\Sigma-$, $A'\Pi$ и $B'\Sigma+$ (последний из них соответствует диссоциации на возбужденные атомы) до межъядерного расстояния $R \approx 2A$. Терм $A'\Pi$ в исследуемой области R приближается к диссоциационному пределу значительно быстрее других, так что при $R > 2A$ соответствующая кривая либо должна круто менять свой ход, либо проходить через максимум.

Е. Никитин

x.1961.15

IV-321 1960

Co

2B174. Изучение вращательной температуры полос Ангстрема $^1\Sigma$—$^1\Pi$ окиси углерода, испускаемых в полом катоде. Weniger Schame. Étude sur la température de rotation des bandes d'Angström $^1\Sigma$—$^1\Pi$ de l'oxyde de carbone, émises dans une cathode creuse, C. r. Acad. sci., 1960, 250, № 11, 2001—2003 (франц.).—Фотографич. путем исследовано распределение интенсивностей вращательных линий в полосах 0—0, 0—1 и 0—2 системы $^1\Sigma$—$^1\Pi$ молекулы CO. Исследования производились при обычной т-ре и при т-ре жидкого азота. При обычной т-ре получены значения вращательной т-ры 324; 321 и 315° K, соответственно, для полос 5198; 4511 и 4835 Å (0—2, 0—0, 0—1). При т-ре жидкого азота получены соответственные значения, равные 240; 232 и 232° K. Отмечается, что точки для малых значений J не ложатся на прямую, построенную по большим значениям J, как это было обнаружено ранее другими авторами для OH.

Г. Неуймин

2 ну

ср. 1961 · 2

1960

СО

Запесочный И.П., Клико С.М.

О функциях возбуждения молекул азота и окиси углерода при столкновении с электронами — Изв. АН СССР, Сер. физ., 1960, 24, №8, 953-955.

(См. N 2) III

ф. 1961. 2В173

210-IV

1961

A.P. /H_2, NO, CO, CO_2, HCl, HBr, HI, NH_3/

Doering P.H., Hornicon J.D.
J.Chem.Phys., 1961, 35, N 2, 575-58
(англ.)
Double and triple ionization in molecules induced by electron impact.
PZ, 1962, 6501.

M,10

278-IV

HCN, CO (ν_i, B_i, D_i) 1961

Rank D.H., Eastman D.P., Rao B.S.
Wiggins T.S.
J.Opt.Soc.America, 1961, 51,
N 9, 929-936 (англ)
Highly precise wave lengths in the infrared. II. HCN, N_2O, CO.

РЖ., 1962, 24 211

1

10

orig

CO

1961

19Б86. Триплетные полосы монооксиси углерода: система $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$. Barrow R. F. Triplet bands of carbon monoxide: the system $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$. «Nature» (Engl.), 1961, 189, № 4763, 480—481 (англ.).—Показано, что триплетная система в области 4270—5430 А спектра CO, открытая ранее (Herman L., Herman R., «C. r. Acad. sci.», 1947, 225, 230; «J. phys. et radium», 1948, 9, 160) и отнесенная к переходу из состояния $d^3\Pi$ в новое состояние, лежащее около состояния $a^3\Pi$, а на самом деле принадлежит переходу $e^3\Sigma^- - a^3\Pi_r$ и состоит из полос прогрессии $v'-0$ $(2 \leqslant v' \leqslant 7)$. В. Юнгман

W-1

Отписк 1172

Р.Ж. Химия
1961-19Б86.

CO

1961
1172

10В100. Триплетные полосы окиси углерода: система $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$. Barrow R. F. Triplet bands of carbon monoxide: the system $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$. «Nature» (Engl.), 1961, 189, № 4763, 480—481 (англ.).—Путем сопоставления известных данных о различных системах полос CO показано, что система полос в области 4270—5430 Å, обнаруженная Герман Л. и Герман Р. (Herman L., Herman R. «C. r. Acad. Sci.», 1947, 225, 230; «J. phys. et radium», 1948, 9, 160), в действительности должна быть приписана переходу $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$, а не $d^3\Pi - a^3\Pi$, как предполагалось ранее.

Г. Неуймин

IV-187

сер. отпек

9.10.1961

CO IV-187; acum. 11/2 1961

спектр

Triplet bands of carbon monoxide: the system $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$. R. F. Barrow (Univ. Oxford, Engl.). *Nature* 189, 480–1(1961).—The bands previously observed by Herman and Herman for CO (*CA* 42, 8644*f*), were identified as being due to the v'-0 progression in the transition $e^3\Sigma^- - a^3\Pi$.

P. H. Lewis

C.A.1961.55.14.13045c

CO

ВФ-278-IV

1961

Bank D.H., Eastman D.P., Rao B.S., Wiggins T.A.

„J. Opt. Soc. America", 1961, 51, №9, 929.

Длины волн высокой точности в инфракрасной области. II. HCN, N_2O и CO. (см. HCN)

CO

ВФ-7656-IV

1961

24Б209. Инфракрасный спектр твердой монооксиси углерода. Ewing George E., Pimentel George C. Infrared spectrum of solid carbon monoxide. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 3, 925—930 (англ.).—В ИК-спектре поглощения твердой CO при 20° K наблюдались резкие полосы (в *см*$^{-1}$) 2088,4; 2092,2; 2112,3; 2138,1 и 4253,5, отнесенные к основным частотам $C^{12}O^{18}$, $C^{13}O^{16}$, $C^{12}O^{17}$, $C^{12}O^{16}$ и первому обертону $C^{12}O^{16}$ соответственно, а также широкая полоса 2208 *см*$^{-1}$, состоящая, по-видимому, из нескольких полос, соответствующих комбинациям основного колебания CO с поступательным и либрационными движениями кристаллич. решетки. Отмечается удовлетворительное согласие (за исключением $C^{12}O^{16}$) эксперим. и вычисленных по теории Букингэма (РЖХим, 1961, 12Б128) величин сдвига основных частот изотопных молекул CO в твердом состоянии по сравнению с газом.

В. Юнгман

2.1962.24.

CO

Fineman M. A., Petrocelli A. W.

Planet. Space Sci, 1961, 3, 187.

Исследование полетов с помощью аппарата Лоэ для электронного удара.

(см. методика измерений потенциалов поверхности)

1961.

CO

молек. расч. потенц. кривых

IV-26 дв

Lefebre-Brion H., Moser C. M., Nesbet R. K.,

J. Chem. Phys., 1961, 34, 1950 (№6)

Расчет кривых потенциальной энергии некоторых электронных состояний монооксида углерода.

Отмечается, что $d^3\Pi$ состояние подвержено $d^3\Delta$; возможно, что имеется еще одно $^1\Pi$ состояние.

CO

1961

A calculation of the potential-energy curves for some electronic states of carbon monoxide. Hélène Lefebvre-Brion, C. M. Moser (Centre mécanique ondulatoire appliquée, Paris), and R. K. Nesbet. *J. Chem. Phys.* 34, 1950–7 (1961).—The L.C.A.O–M.O.–S.C.F. orbitals for the $^1\Sigma^+$ ground state of CO constructed from 1*s*, 2*s*, and 2*p* at. functions, have been calcd. for 11 internuclear distances between 1.5 and 4.0 at. units. By using the unoccupied S.C.F. orbitals a number of lower excited states have been calcd. The equil. distances, force consts., and ν_{00} energies have been calcd. from the curves of *E* vs. *R* for these various states. As these calculated curves do not separate at infinity into the atoms in their proper spectroscopic states, configuration interaction has been carried out with functions which cross the computed curves and separate into the atoms in their ^{3}P states. P. M. B.

C.A. 1961 55 20
19456f

CO

IV-2б2а

1961

5Б22. Расчет кривых потенциальной энергии некоторых электронных состояний окиси углерода. Lefebvre-Brion Hélène, Moser C. M., Nesbet R. K. A calculation of the potential energy curves for some electronic states of carbon monoxide. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 6, 1950—1957 (англ.).—В рамках метода самосогласованных МО ЛКАО рассчитаны кривые потенциальной энергии молекулы CO для ряда электронных состояний в интервале межъядерных расстояний $1{,}50 < R < 4$ ат. ед. Однодетерминантные волновые функции строились из слейтеровских $1s$-, $2s$- и $2p$-АО, орбитальные экспоненты которых считались не зависящими от R и равными величинам, минимизирующим энергию разделенных атомов (5,67, 1,67 и 1,57 для C и 7,66, 2,25 и 2,23 для O) . При больших межъядерных расстояниях учитывалось взаимодействие тех конфигураций, потенциальные термы которых пересекались. Таким путем удавалось правильно передать корреляцию состояний при диссоциации. Рассчитанные величины силовых констант k и энергий переходов 0—0 для состояний $X^1\Sigma+a^3\Pi$, $a'^3\Sigma+$, $c^3\Sigma-$, $A'\Pi$ несколько уменьшаются при учете взаимодействия конфигураций, приближаясь к эксперим. значениям. Существен-

Х. 1962. 5

см. н/а

но, что энергии переходов $\nu(0-0)$, вычисленные даже в одноконфигурационном приближении и равные для указанных выше состояний 5,13, 4,70, 6,62 и 7,59 *эв* (экспериментальные 6,04, 6,92, 8,10, 8,07 *эв*), подтверждают проведенную ранее интерпретацию электронного спектра CO. Кроме того, величины ν_{00} и k для состояния $^3\Delta$ с той же точностью совпадают с эксперим. параметрами состояния d, симметрия которого ($^3\Pi$ или $^3\Delta$) не была твердо установлена. Термы других рассчитанных состояний ($b^3\Sigma+$, $B^1\Sigma+$, $C^1\Sigma+$, $F^1\Pi$) существенно отличаются от эксперим. величин, что связано, по-видимому, с весьма ограниченным базисом использованных АО. Рассчитанные полные энергии CO во всех состояниях примерно на 1 ат. ед. превышают эксперим. величины. Наибольшее различие в ходе теоретич. и эксперим. термов наблюдается в случае малых (или отрицательных) энергий связи, что обусловлено весьма ограниченным учетом взаимодействия конфигураций.

Е. Никитин

CO

У-8

1961

5 В81. **Ультрафиолетовый спектр молекулы окиси углерода.** Lefebvre-Brion H., Moser Carl. Ultraviolet spectra of carbon monoxide. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 5, 1702—1707 (англ.)

Вычислены вертикальные энергии возбуждения для 14 электронных переходов в УФ спектре CO. В расчете использовались самосог асованные МО ЛКАО, построенные из трех различных наборов базисных АО на каждом центре: (I) 1*s*, 2*s*, 2*s*′, 2*p* и 2*p*′; (II) 1*s*,2*s*, 2*p*, 3*s*, 3*p* и (III) 1*s*, 2*s*, 2*s* 2*p*, 2*p*′ 3*s*, 3*p*. При наличии программы счета коэф. ЛКАО, матричных элементов остовных и самосогласованных операторов и всех

РЖФ 1962
5 В81

См. на обороте.

2-электронных интегралов расчет типа III на IBM 704 требовал ~5 час. Для всех расчетов табулированы значения орбитальных экспонент, коэф. ЛКАО, энергии возбужденных состояний и полные энергии. Уже результаты расчета II хорошо согласуются с опытом (данные расчета I почти не отличаются от результатов Бриона и Мозера (РЖФиз, 1961, 1В43). Указывается, что вычисления подтвердили классификацию электронных переходов в CO, данную ранее Малликеном и заключающуюся в разделении всех переходов на два класса: переходы между МО, построенными в основном из АО L-оболочки ($n=2$), и переходы между МО, нижняя из которых построена из L-АО, а верхняя — из M-АО ($n=3$). Приводится таблица чисел k электронов в M-оболочке (по данным атомных заселенностей) для изученных возбужденных состояний, из которой видно, что все состояния делятся на два класса: с $k \sim 0{,}2$ (6 состояний) и с $k \sim 1{,}2$ (7 состояний). Результаты расчета III хорошо согласуются с энергией основного состояния и вполне удовлетворительно — с энергиями обоих типов возбужденных состояний (при этом для класса с $k \sim 1{,}2$ несколько хуже). В. Быховский

CO

УФ спектр.

12 Б63. Ультрафиолетовый спектр молекулы окиси углерода. Lefebvre-Brion H., Moser Carl. Ultraviolet spectra of carbon monoxide. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 5, 1702—1707 (англ.)

1961

Вычислены вертикальные энергии возбуждения для 14 электронных переходов в УФ-спектре CO. В расчете использовались семосогласованные МО ЛКАО, построенные из трех различных наборов базисных АО на каждом центре: 1) $1s$, $2s$, $2s'$, $2p$ и $2p'$; 2) $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$ и 3) $1s$, $2s$, $2s'$, $2p$, $2p'$, $3s$, $3p$. При наличии программы счета коэф. ЛКАО, матричных элементов остовных и самосогласованных операторов и всех 2-электронных интегралов расчет типа 3 на IBM 704 требовал ~5 час. Для всех расчетов табулированы значения орбитальных экспонент, коэф. ЛКАО, энергии возбужденных состояний и полные энергии. Уже результаты расчета 2 хорошо согласуются с опытом (данные расчета 1 почти не отличаются от результатов Брионa и Мозера). Указывается, что вычисления

X·1962·12

подтвердили классификацию электронных переходов в CO, данную ранее Малликеном и заключающуюся в разделении всех переходов на два класса: переходы между МО, построенными в основном из АО L-оболочки ($n = 2$), и переходы между МО, нижняя из которых построена из L-АО, а верхняя — из M-АО ($n = 3$). Приводится таблица чисел K-электронов в M-оболочке (по данным атомных заселенностей) для изученных возбужденных состояний, из которой видно, что все состояния делятся на два класса: с $k \approx 0{,}2$ (6 состояний) и с $k \approx 1{,}2$ (7 состояний). Результаты расчета 3 хорошо согласуются с энергией основного состояния и вполне удовлетворительно — с энергиями обоих типов возбужденных состояний (при этом для класса с $k \approx 1{,}2$ несколько хуже). В. Быховский

CO 269а-IV; Вф-269-IV 1961

24Б212. Инфракрасные спектры монооксиси углерода в твердом состоянии и в матрицах. Maki Arthur G. Infrared spectra of carbon monoxide as a solid and in solid matrices. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 3, 931—935 (англ.).—Выполнено исследование ИК-спектра поглощения CO в матрицах N_2, Ar и CH_4, а также свободной CO при т-рах порядка 20° K в области основной частоты и первого обертона. Наблюдавшиеся полосы отнесены к различным изотопным молекулам CO и показано, что соотношения между колебательными постоянными изотопных молекул, имеющие место для молекул газа, остаются справедливыми в случае разб. твердых р-ров. В. Юнгман

X. 1962. 24.

CO 269a-IV; BQ-269-IV 1961

U.K.

Infrared spectra of carbon monoxide as a solid and in solid matrixes. Arthur G. Maki (Natl. Bur. of Standards, Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 35, 931–5(1961).—The fundamental infrared absorption frequencies of several isotopes of CO were observed in solid CO and in the solid matrixes N, Ar, and CH_4. The overtone was also measured in solid CO. Frequency shifts due to isotopic substitution in the solid state follow the formulas developed for the gas phase only when mols. of the same isotopic species are not adjacent to each other, i.e., only in dil. solns.

Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1962, 56, 9
9591d

1961

CO

Rank D.H., Rastman D.P.,
Rao B.S., Wiggins T.A.

Spectrochim. Acta, 1961, 17, 1124.

Высокоточные длины волн
в их обл.: HCN, N_2O и CO.

CO
CH_4
C_2H_2
H_2O

1961

1 Д266. Некоторые результаты измерений в ИК-области спектра с новым прибором высокого разрешения. Rath G. Einige Ergebnisse von Messungen im Infrarot mit einem neuen Gerät höchster Auflösung. «Instrum. and Measur. Vol. I». New York — London, Acad. Press, 1961, 489—497 (нем.)

Приведены некоторые результаты измерений ИК-спектров с высоким разрешением, проведенные на коммерческом спектрофотометре IR-7 фирмы Beckman IR-7 — двойной монохроматор с призмой предварительного разложения из NaCl и дифракционной решеткой. Теоретич. разрешающая способность (РС) прибора $\nu/\Delta\nu_{\text{миним}}$ при $\nu=1000$ *см*$^{-1}$ (1 порядок) равна 3300, что соответствует разрешению $\sim 0{,}3$ *см*$^{-1}$. Практич. РС несколько меньше, но значительно превосходит теоретич. РС $\nu/\Delta\nu_{\text{миним}}=1000$ прибора IR-4. На примере спектров молекул газов с различной симметрией (ν в *см*$^{-1}$): CO ($\nu=2140$), CH_4 ($\nu_3=3018$), C_2H_2 ($\nu_5=730$, $\nu_4+\nu_5=1328$, $\nu_3=3287$) и H_2O ($\nu_2=1595$) обсуждены возможности решения ряда структурных и теоретич. вопросов. Указывается, что высокая РС прибора позволяет проводить точные измерения интенсивностей полос поглощения жидкостей. Высокие

Ф. 1963. 1Д.

см. необ

эксплуатационные качества прибора делают возможным также его применение для точных качеств. и количеств. лутинных анализов.

А. Александров

CO

196

5Б71. Относительные интенсивности полос триплетной системы CO. Singh N. L., Jain D. C. Relative intensities in the triplet system of CO bands. «Proc. Phys. Soc.», 1961, 77, № 3, 817—818 (англ.).—Методом численного интегрирования (РЖХим, 1960, № 23, 91260) с использованием волновых функций Морзе вычислены интегралы перекрывания для триплетных полос CO в широком интервале длин волн (4580—12 090 A). На основании полученных данных найдены относительные интенсивности полос в предположении одинаковой заселенности всех колебательных уровней верхнего состояния, т. е. что $T \rightarrow \infty$. Для сравнения приведены относительные интенсивности, вычисленные Пиллоу и Роулаттом (РЖХим, 1960, № 14, 55914) по методу Пиллоу (Pillow M. E., «Proc. Phys. Soc.», 1951, A64, 772).

В. Юнгман

-x-

1962·5

D_0 (CO, CS) расчет из м.в.

1961

2 В91. **Определение энергии диссоциации двухатомных молекул из микроволновых вращательных спектров.** Wesselago V. G. Bestimmung der Dissoziationsenergie zweiatomiger Moleküle aus Mikrowellen-Rotationsspektran. «Hochfrequenzspektroskopie». Berlin, Akad.-Verl., 1961, 228—230 (нем.)

Используя ф-цию Морзе для двухатомной молекулы выведена ф-ла для зависимости межатомного расстояния в двухатомной молекуле от времени. Эта ф-ла применена для вычисления усредненного за период колебания значения вращательной постоянной B_v. Ф-ла для среднего значения B_v содержит энергию диссоциации D. Сопоставление двух таких ф-л для двух изотопич. молекул позволяет выразить D через средние значения B_v и другие известные постоянные обеих молекул. Значения B_v для молекул CO и CS известны из микроволн. спектров этих в-в, и для D получены значения 9,0 и 6,9 *эв*.

М. Ковнер

ф. 1962. 2В

2.0(C)

1961

Wesselago V.G.

Hochfrequenzspektroskopie, 1961, 228

Определение энергии диссоциации двухатомных молекул из микроволновых вращательных спектров.

CO

3 Д192. Интенсивности, ширины и формы линий в колебательно-вращательной полосе CO. Benedict William S., Herman Robert, Moore Gordon E., Silverman Shirleigh. The strengths, widths, and shapes of lines in the vibration-rotation bands of CO. «Astrophys. J.», 1962, 135, № 1, 277—297 (англ.) 1962

Описанные ранее авторами методы применены для определения интенсивностей («сил») и ширин линий в основной колебательно-вращательной полосе CO. Пользуясь точно измеренными ранее значениями частот линий 1—0 полосы $C^{12}O^{16}$, определены частоты отдельных линий 2—1 полосы $C^{12}O^{16}$ и 1—0 полос изотопич. молекул $C^{13}O^{16}$, $C^{12}O^{18}$ и $C^{13}O^{18}$. Ряд спектров CO в области 1900—2200 $см^{-1}$ получен в излучении $CO - O_2$ и других пламен. Определены значения частот большинства линий 2—1, 3—2, 4—3, 5—4 и 6—5 полос $C^{12}O^{16}$. Отмечается, что наблюденные положения линий для $C^{12}O^{16}$ и других изотопич. молекул CO прекрасно согласуются с вычисленными на основе молекулярных постоянных, определенных Гольдбергом и Мюллером. Интенсивности и ширины линий определены по методу «кривой роста». Общая интенсивность 1—0 полосы CO, полученная непосредственным суммированием интенсивностей всех линий, равна 214,8 $см^{-2}$ $ат^{-1}$ при 300° K и находится в хо-

Ф. 1963. 3Д

Спец. обр.

рошем согласии с результатами других исследований. Полученные значения интенсивностей линий 1—0 полосы хорошо согласуются с вычисленными по ф-ле жесткого ротатора, что указывает на малое влияние колебательно-вращательного взаимодействия на относит. интенсивность линий этой полосы. Вычислены также значения интенсивностей линий 2—1 полосы молекулы $C^{16}O^{32}$ и 1—0 полос изотопич. молекул. Измеренные для отдельных линий этих полос интенсивности согласуются с вычисленными в пределах ±20%. Найденные значения для полуширин. линий 1—0 полосы показывают постоянное их уменьшение с ростом вращательного квантового числа $|m|$, начиная от значения 0,085 $см^{-1}\ ат^{-1}$ для линии с $|m|=1$ до 0,038 $см^{-1}\ ат^{-1}$ для линии с $|m|=30$. Диаметр оптич. столкновений соответственно уменьшается от 5,5 А до значения 3,7 А (равного газокинетич. диаметру). Получено экспериментально среднее значение интенсивности 2—0 полосы, равное $1{,}5\pm0{,}3\ см^{-2}\ ат^{-1}$. Вычисленные значения полуширин линий для полосы 2—0 совпадают с полуширинами соответствующих линий в 1—0 полосе. Из измерений пропускания в промежутках между линиями установлено, что при частотах, отстоящих больше чем на 4 $см^{-1}$ от центров линий, поглощение будет меньше, чем ожидаемое для линий лоренцовской формы. Библ. 31 назв. К. Василевский

CO
спектр

1962

2 Д148. Структура триплетных полос CO. Carroll P. K. Structure of the triplet bands of CO. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 11, 2861—2869 (англ.)

Получен при высоком разрешении спектр полосы 3—0 системы «триплетных» полос CO и произведен вращательный анализ. Показано, что верхнее состояние является $^3\Delta$-состоянием, а не $^3\Pi$-состоянием, как считалось ранее. Такое отождествление соответствует предсказанию теории электронных конфигураций. Изучена спиновая структура $^3\Delta$-состояния и обсуждено распределение интенсивностей в ветвях. Приведены уточненные константы $^3\Delta$-состояния.

Ф. 1963. 2Д

1962

CO

$d^3\Delta$

молек.

постоян.

Carroll P. K.

J. Chem. Phys., 1962, 36, 2861

Структура триплетных полос CO.

Верхнее состояние триплетных полос $^3\Delta$, а не $^3\Pi$, как считали ранее.

Постоянные $d\,^3\Delta$-состояния (в $см^{-1}$):

$B_e = 1,3099$; $\alpha_e = 0,0164_7$; $D_e = 5,8 \cdot 10^{-6}$; $\gamma_e = 7,0 \cdot 10^{-7}$; $A_e =$ [illegible] $-15,6$

CO

1962

4Б74. Структура триплетных полос CO. Carroll P. K. Structure of the triplet bands of CO. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 11, 2861—2869 (англ.)

Полоса 3,0 триплетной серии CO сфотографирована в излучении при высоком разрешении (разряд переменного тока; в поток гелия добавлены следы (CO). Обнаруженная структура полностью согласуется с трактовкой перехода как $^3\Delta \longrightarrow {}^3\Pi$, причем состояние $^3\Delta$ является обращенным и приближается к случаю *a* связи при малых *j* и к случаю *b* — при больших *j*. Этот результат согласуется с выводами теории электронной конфигурации и опровергает прежнюю трактовку перехода ($^3\Pi - {}^3\Pi$). Подробно рассматривается распределение интенсивностей в ветвях полосы, а также величина спинового расщепления. Приведены уточненные мол. константы для верхнего состояния.

В. Дианов-Клоков

X-1963-Y.

CO

1962

Structure of the triplet bands of CO. P. K. Carroll (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 36, 2861–9(1962). The 3-0 band of the CO triplet system was photographed under high resolution and a rotational analysis was carried out. The upper state is $^3\Delta$, in agreement with the electron configuration theory, and not $^3\Pi$. The spin structure in the $^3\Delta$ state was studied and the intensity distribution in the branches was discussed. Revised consts. for the $d^3\Delta$ state were given. Henry Leidheiser, Jr.

CA. 1962. 57. 9
10662 f

7482 — IV

1962

CO, N_2O, H_2O, N_2O_2, CH_3D, ClO_3F (S)

Chipman J.,
Pure Appl.Chem., 1962, 5, 669-82
Molben metals, slags, and ...

CA., 1963, 58, N 6,
5106a

10

1962

CO

Collin J. E.

norwz

„Canad J. Chem"

finn

1962, 40, N 11, 2172-75

BP-5178-1

(cell HF+; III)

M 1912

CO, CO^+ (A.P., J)

Cunthbert J., Farren J., Rao B.S.P., Preece E.R.

Proc.Phys. Soc., 1966, 88, N 1, 91-100
Appearance potentials and transition probablities for electron impact ionization of CO and CO^+

J F

PF.,1967,5D138

Co

спектр в матрице

Diessler K.

1962

J. Quantit. Spectrosc. and Radiat. Transfer., 1962, 2, 683.

Абсорбционная спектроскопия конденсированных газов при низких T-рах

(см. N_2O)

Ф. 1963. 9Д.

CO

ВФ-208-IV

1962

5 Д63. I $^1\Sigma^-$-Состояние окиси углерода. Deutsch J. L., Barrow R. F. The state I $^1\Sigma$-of carbon monoxide. «Proc. Phys. Soc.», 1962, 80, № 2, 561—563 (англ.)

На основании вращательных возмущений между состояниями $A^1\Pi$ и $^1\Sigma^-$ в молекуле CO определены спектроскопич. постоянные последнего состояния: $G_v = 1044{,}8 \pm 5(v+1/2) - 9{,}5 \pm 0{,}5(v+1/2)^2$, $B_v = 1{,}217 \pm 0{,}01 - 0{,}018 \pm 0{,}002(v+1/2)$ $T_{00} = 66678 \pm 10$; все величины в $см^{-1}$.

В. Быховский

Ф.1963.5Д

CO

Вф-208-IV

1962

6Б69. **Состояние $^1\Sigma^-$ окиси углерода.** Deutsch J. L., Barrow R. F. The state $1^1\Sigma^-$ of carbon monoxide. «Proc. Phys. Soc.», 1962, 80, № 2, 561—563 (англ.)

На основании вращательных возмущений в возбужденном электронном состоянии $A^1\Pi$, $v=2$, окиси углерода определены спектроскопич. константы близлежащего электронного состояния $^1\Sigma^-$, возникающего из конфигурации $\pi^3\sigma^2\pi^*$. Колебательные термы, вращательная константа и энергия 0—0-перехода в это состояние равны (в $см^{-1}$) $G_v=1044{,}8\pm5(v+{}^1/_2)-9{,}5$, $B_v=1{,}217\pm0{,}01-0{,}018\pm0{,}002\ (v+{}^1/_2)$; $T_{00}=66\,678\pm10$.

Е. Никитин

X. 1963. 6

CO

1962

18Б39. Исследование CO методом электронного удара с использованием прибора Лозье. Fineman Morton A., Petrocelli Americo W. Electron impact study of CO using a Lozier apparatus. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 1, 25—32 (англ.).—На приборе типа Лозье, использующем тормозящее электрич. поле для анализа ионов по начальным кинетич. энергиям, исследованы процессы, происходящие при электронной бомбардировке молекул CO. Ионизация производилась электронами, монохроматизированными методом разностей задерживающих потенциалов Фокса. Зарегистрированы кривые эффективности ионизации как для положительных, так и для отрицательных ионов. В отличие от более ранних исследований CO, авторами обнаружены ионы C^+, образующиеся при пороговой энергии электронов 22,57 ± 0,20 *эв*, и O^+, образующиеся при пороговой энергии 24,78 ± 0,23 *эв*. Опираясь только на собственные результаты, авторы рассчитали энергию диссоциации $D(CO)$ (их значение согласуется с 11,11 *эв*) и сродство атома O к электрону (согласуется с величиной 1,465 *эв*). Расчеты авторов, осно-

Х.1962.18

см. реф.

ванные на двух системах потенциалов появления различных ионов, приводят к двум значениям сродства к электрону атома С (1,34 и 1,74 *эв*). Анализ литературных данных позволяет принять меньшее из этих значений.

Е. Франкевич

CO

1962

До сродство к электрону

7 В47. **Изучение CO методом электронного удара на аппарате Лозье.** Fineman Morton A., Petrocelli Americo W. Electron impact study of CO using a Lozier apparatus. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, №1, 25—32 (англ.)

Методом электронного удара на масс-спектрометрич. приборе Лозье (РЖФиз, 1961, 12В99) проведено детальное исследование молекулы CO. Найденные потенциалы появления (ПП) ионов C^-, C^+, O^- и O^+ хорошо согласуются с известными данными, если для калибровки шкалы энергии электронов используется ПП CO^+, равный 14,01 *эв*. Вычисленные по этим значениям ПП энер-

См. на обороте

РЖФ 1962
7В47

гия диссоциации CO и сродство к электрону кислорода оказались равными 11,23±0,13 *эв* и 1,70±0,22 *эв* соответственно. В предположении, что в процессе диссоциации на два иона C^- находится в основном электронном состоянии и что сродство к электрону тем больше, чем более электроотрицателен элемент, сродство к электрону углерода оказалось в пределах 1,32—1,76 *эв*, причем меньшее значение ближе подходит к результатам других независимых расчетов. Отмечается, что реакцию образования C^+ с ПП 22,57 *эв* можно трактовать как обычный процесс диссоциативной ионизации: $CO+e^-=C^++O+2e^-$, а не как процесс двухступенчатой автоионизации.

Ю. Беляев

$D_0(CO)$

A(O)

A(C)

1962

Electron impact study of CO using a Lozier apparatus. Morton A. Fineman and Americo W. Petrocelli (Providence Coll., Providence, R. I.). *J. Chem. Phys.* 36, 25–32 (1962). A Lozier app. modified in that a quasimonoenergetic electron beam is used, was employed to study CO. Ionization efficiency curves for both pos. and neg. ions were collected. A detailed treatment of these data gives the ions produced, the appearance potentials for ions formed with zero kinetic energy, the processes in which they were produced, and the states of excitation of the fragments formed. The dissocn. energy of CO and the electron affinity of oxygen were detd., in agreement within exptl. error with the spectroscopic value of D(CO) 11.11 e.v. and electron photodetachment value for EA(O) of 1.465 e.v. By using the accepted values for D(CO) and EA(O), the electron affinity of C was detd. from 2 different sets of data to be between 1.34 and 1.74 e.v. The lower value is in better agreement with other exptl. detns. and with most of the recent empirical calcns. for the EA(C). CA

C.A. 1962.57.4

419006

CO Fraga S., Ransil B. J. 1962

мол. коб

J. Chem. Phys., 1962, 36, N5, 1127–1142

расчет

Изучение строения молекул. VII. Ограниченное конфигурационное взаимодействие для избранных двухатомных молекул первого ряда.

IV-M-Ряд

X·1963·24

CO

1962

) Infrared spectra of liquid and solid carbon monoxide. George E. Ewing (California Inst. of Technol., Pasadena). *J. Chem. Phys.* **37**, 2250–6(1962). A low-temp. cell suitable for the study of infrared spectra of pure liquids in the fundamental region is described. Selection rules are derived, based on the assumption that diat. mols. in the liquid state can undergo hindered rotation. The infrared absorption band shape is predicted to resemble the *P*- and *R*-branch envelope of the gas-phase mol. in the wings, but to have an intense *Q* branch at the band center. The observed spectra of CO as a liquid is in reasonable agreement with these selection rules. A considerable fraction of mols. in the liquid state can undergo nearly free rotation. The spectrum of CO just below its f.p. suggests that the rotatory motion of the mols. in the solid can best be described as librational. CA

C.A. 1963. 58. 1.
152 f

1962

CO

Groth W., Pessara W

„Z. phys. Chem" (ВКД), 1962, 32, N 3-4, 192-211 (нем)

Фотохимические исследования в инфракрасной ИК-области спектра. Ч. II. Фотохимическое разложение N_2 и CO под

действием света резонансных линий ксенона и криптона. (см № 2) III

CO
CH
HCN
CF_3J
CH_2
CH_3
(6)

Ф. 1963 · 4Д

4 Д217. Молекулярные спектры в вакуумной УФ-области. Herzberg G. Molecular spectra in the vacuum ultraviolet. «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 1». Oxford — London—New York—Paris, Pergamon Press, 1962, 29—33 (англ.) 1962

Кратко изложены результаты обширной программы исследований электронных спектров молекул в вакуумной УФ-области, проводимых в лаборатории автора. Для двухатомных молекул заново изучены полосы Лаймана $(B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+)$ молекулярного водорода; определен предел непрерывного поглощения водорода, дающий наиболее точное значение энергии диссоциации водорода, равное $(36113{,}0 \pm 0{,}3)$ $см^{-1}$; в спектре поглощения CO обнаружены новые запрещенные переходы и установлена их природа ($^3\Sigma^+ - {}^1\Sigma^+$, $^3\Sigma^- - {}^1\Sigma^+$, $^3\Delta - {}^1\Sigma^+$); установлено несколько высоко возбужденных состояний CH. Изучены спектры поглощения стабильных многоатомных молекул HCN, CF_3J, CH_2N_2; обнаружено, что очень часто симметрия молекулы в возбужденном состоянии отлична

отписк 1039

см н/об.

от основного состояния. В этой же области исследованы спектры поглощения свободных многоатомных радикалов CH_3, CH_2 и их дейтерозамещенных; определены структура и молекулярные константы радикалов.

Ф. Ортенберг

1962

CO

1 12 Б174. **Дипольные моменты возбужденных электронных состояний. Возможные значения для CO и CO+.** Kopelman Raoul, Klemperer William. Dipole moments of excited electronic states: possible values for CO and CO+. «J. Chem. «Phys.», 1962, 36, № 6, 1693—1694 (англ.)

Из полос Ангстрема в спектре CO и полос, наблюденных в спектрах кометных хвостов и относящихся к CO+, получены следующие значения для дипольных моментов в различных состояниях этих молекул: CO $X^1\Sigma$ 0,112±±0,005, $A'\Pi$ 0,08±0,08, $B^1\Sigma$ 0,15±0,15 D; CO+ $X^2\Sigma$ 0,1±0,1, $A^2\Pi$ 0,1±0,1 D. Столь низкие значения, по мнению автора, трудно объяснить. М. Ковнер

ж·1964·12

CO; CS; OCS (ν, ⊥ → N-260 1962

Laurie Victor W., Herschbach Dudley R.
The determination of molecular structure from rotational spectra. "Internat Sympos. Molec.Struct.and Spectrosc.Tokyo.1962". S.l., s.a., C309/1-C309/4 (abst.)

РФ., 1963, 4D156

10

CO

1962

4 Д81. Последние достижения в расчете возбужденных состояний двухатомных молекул. Lefebvre-Brion H., Moser C. M., Nesbet R. K., Yamazaki M. Recent developments in the calculation of the excited states of diatomic molecules. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962». S. l., s. a., B118/1 — B118/3 (англ.)

Обычным методом МО ЛКАО с ограниченным учетом конфигурац. взаимодействия при привлечении в качестве АО 1*s*-, 2*s*-, 2*p*-, 3*s*- и 3*p*-атомных ф-ций Слейтера рассчитаны волн. ф-ции $B^1\Sigma^+$, $c^1\Sigma^+$, $E^1\Sigma^+$, $b^3\Sigma^+$, $c^3\Sigma^+$, $F^1\pi$, $G^1\pi$ и $^3\pi(b)$ возбужденных состояний молекулы CO. Результаты расчета основного $X^1\Sigma^+$-состояния и техника вычислений были опубликованы ранее (РЖФиз, 1962, 1Е151). С помощью волн. ф-ций, найденных для четырех значений межатомного расстояния $R=1{,}8$; 2,0; 2,2; 2,4 ат. ед., определены силовые константы k, величины r_e и v_{00} для всех указанных состояний. Согласие рассчитанных и эксперим. значений k, r_e и v_{00} удовлетворительное.

С. Ветчинкин

ф. 1963. 4Д

CO

1962

8 Б37. Последние достижения в расчете возбужденных состояний двухатомных молекул. Lefebvre-Brion H., Moser C. M., Nesbet R. K., Yamazaki M. Recent developments in the calculation of the excited states of diatomic molecules. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962». S. l., s. a., B118/1—B118/3 (англ.)

Автоматическая программа для IBM 704 использована для расчета основного состояния $X^1\Sigma^+$ молекулы CO, где самосогласованные МО получены из базисного набора функций 1*s*, 2*s*, 2*p*, 3*s* и 3*p* каждого атома. С учетом ограниченного числа взаимодействующих конфигураций вычислены верхние возбужденные состояния молекулы $B^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+$, $E^1\Sigma^+$, $b^3\Sigma^+$, $c^3\Sigma^+$, $F^1\pi$, $G^1\pi$ и второе состояние $^3\pi$ (лежащее выше $a^3\pi$). Для каждого состояния табулированы силовые постоянные, величины r_0 и энергии возбуждения V_{00}. Найдено, что второе состояние $^3\pi$ лежит на 11 *эв* выше основного состояния.

В. Шусторович

Ж. 1963-8

CO

Спектр поглощ.

1962

4 Б56. Интенсивность линий поглощения полосы 2—0 окиси углерода. Oppenheim U. P., Goldring Hanna. The strengths of absorption lines in the 2—0 band of carbon monoxide. «J. Quantit. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1962, 2, July-Sept., 293—295 (англ.)

При атмосферном давлении и т-ре 300° К снят спектр поглощения полосы 2—0 CO. Полученная интенсивность полосы $S^0_{2-0}=1{,}51$ *см*$^{-1}$ *атм*$^{-1}$ ниже, чем в ранее опубликованной работе (РЖХим, 1963, 2Б117), и хорошо согласуется с другими данными. А. Мальцев

X·1964-4

1962

CO - RanK D.H.

Rev. Mod. Phys., 34, 577

Precision infrared spectroscopy.

CO

(спектр)

IV-9852 1962

Studies on spectrum of carbon monoxide by 33-Mc. discharge. Kenzo Sato (Hitachi Ltd., Tokyo). *Proc. Intern. Symp. Mol. Struct. Spectry., Tokyo* 1962(D306), 4 pp. The Angstrom band system ($B'\Sigma$–$A'\Pi$), the Herzberg band system ($C'\Sigma$–$A'\Pi$), and the conspicuous ($d^3\Pi$–$a^3\Pi$) triplet system were investigated. The latter was compared with observations of other investigators. Five band series were observed which correspond to vibrational quantum no. $V'' = 0, 1, 2, 3, 4$ of lower state $a^3\Pi$. There are no strict selection rules for the (V'–V'') combinations, which means that the occurrence of the band spectrum is comparatively free. More than 100 bands were observed for the triplet band system. The use of high-frequency discharge and high pressure makes the ($d^3\Pi$ – $a^3\Pi$) transition clearly observable, with no part of the spectrum missing in the wide wavelength region. The $d^3\Pi$–$a^3\Pi$ vibrational transitions appear somewhat abnormal, owing to mol. collisions or forced oscillations resulting from the high-frequency field. Ralph A. Zingaro

C. A. 1964 Cp 113 2612 e

IV-9852 1962

CO, спектр вис. г. разряд

Ф. 1963. 8Д

8 Д120. **Изучение спектра монооксиси углерода с помощью высокочастотного разряда (33 *Мгц*).** Sato Kenzo. Studies on spectrum of carbon mono-oxide by high frequency 33 Mc discharge. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962». S. l., s. a., D 306/1—D 306/4 (англ.)

Кратко описаны эксперим. условия, в которых ставился опыт по изучению спектра монооксиси углерода с помощью высокочастотного разряда (33 *Мгц*). Длина разрядной трубки 100 *мм*, радиус 30 *мм*, в трубке циркулировал воздух при атмосферном давлении. В видимой области (7000—3500 Å) были наблюдены системы полос ($B'\Sigma—A'\Pi$), ($C'\Sigma—A'\Pi$), ($d^3\Pi—a^3\Pi$). Триплетная система полос дана в таблице, в которой также проведено сравнение с результатами других авторов. Приведены графики распределения интенсивности для каждой из систем полос.

А. Машинский

1962

CO Sholette W.P., Muschlitz E.E.

J. Chem. Phys. 1962, 36, 3386.

Ионизирующие столкновения метастабильных атомов гелия в газах

(см. Ar)

1962

CO Steele D., Lippincott E.R., Vanderslice J.T.

Revs. Mod. Phys., 34, No2, 239

$r_e, \omega_e, D_e, B_e, \omega_e x_e, \alpha_e$ Сравнительное изучение эмпирических межъядерных потенциальных функций.

ВФ-9238-IV; отт. 782

1962

C_2, CH, CH, CO, NH, NO, O_2, OH

(колебат. и вращат. посст.)

Wallace L.

Astrophys J., Suppl. Ser. 1962, 7, 165-290.

Band-head wavelengts...

CA, 1963, 58, 7505b

10.

CO(A) R.K. Asundi, J.D. Craggs, 1943
CO_2(A) M.V. Kurepa
Proc. Phys. Soc. 82 no 6, 967
Zachyt elektronu a vznik záporných
ion. O_2, CO a CO_2.

O_2^-

IV-7177

1963

O_2, CO, CO_2, Ar (J)

Asundi R.K., Kurepa M.V.

J.Scient.Instrum, 1963, 40, N 4, 183-186
The calibration of the ...

J

С-О в металлкарбонилах ИК-поглощ.

1963

10 Д250. Исследование ИК-спектров металлкарбонильных соединений. III. Отнесение полносимметричного С—О валентного колебания металлкарбонилов и исследование спектров тетракобальтдодекакарбонил и дикобальтоктакарбонил. Bor G. Infrared spectroscopic studies on metal carbonyl compounds. III. Assignment of the totally symmetric C—O stretching bands of the metal carbonyls, with special respect to the spectra of tetracobalt-dodekacarbonyl and dicobalt-octacarbonyl. «Spectrochim. acta», 1963, 19, №7, 1209—1224 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ряда металлкарбонильных соединений и проведено их теоретич. рассмотрение. Показано, что слабая полоса 2110 $см^{-1}$ относится к пол-

ф. 1966. 10Д

носимметричному вал. кол. C—O в металлкарбонилах с симметрией C_n, C_{nv}, C_s или S_4. На примере спектров $Co_2(CO)_8$ и $Co_4(CO)_{12}$ показана важность рассмотрения этой полосы для трактовки связей и установления структуры молекул. В случае $Co_2(CO)_8$ показано существование двух структурных форм. Библ. 55 назв. Ч. II см. Bor G. «Acta Chim. Acad. Sci. Hung.», 1962, 34, 395.

Э. Броун

7467-IV

1963

HCl, LiH, CO, HF (mol.konst.)

Cashion J.K.

J.Chem.Phys., 1963, 39, N 7, 1872-1877

Testing of ...

J

1963

J. H. Callomon, A. C. Gilby

CO

comp

The carbon monoxide flame spectrum under high resolution.

J. Chem. Soc, 1963, pp. 1471

CO
спектр поглощ.

1963

12 Д144. Фотоионизация и спектр поглощения CO и CO_2 в вакуумной УФ-области спектра. Cook G. R., Metzger P. H. The photoionization and absorption spectra of CO and CO_2 in the vacuum ultravjolet. Abstract. «Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc., Columbus, 1963». Columbus, Ohio, s. a., 74—75 (англ.)

Измерены абс. значения выхода фотоионизации и спектр поглощения CO и CO_2 в области 600—1000 Å с разрешением 0,5 Å. Полосы поглощения окиси углерода наблюдались в интервале 1000—716 Å, ниже 716 Å лежит область сплошного поглощения. Полосы поглощения CO_2 наблюдались в интервалах 1000—920 Å и 840—690 Å. Области сплошного поглощения CO_2 лежат в интервалах частот 920—840 Å и 690—580 Å.

Д. Глебовский

ф·1964·12Д

CO

Cashion J. K.

(м.п.) "J. Chem. Phys", 39, N7, 1963.

1963

CO

Clinton W. L., Frattali S. D.

J. Chem. Phys., 1963, 39, N 12, 3516.

Связь в молекулах. III. Анализ эмпирической потенциальной функции.

ВФ-5984-III

ф. 1964. 6Д116

CO (wi, molec spec (?)) 7603 1963
CO_2 (Tc, L XYZ)
Dixon R.N.

Disc. Faraday Soc., 1963, v 35, 105-112 (auth)

Carbon monoxide flame bands.

Pre Gray. 1964, 29226

10

ВФ-7602-IV 7602

CO (LOCO, ZCO, молекул. носит) 1963

Dixon R. N.

Proc. Roy. Soc., 1963, A275, №1362, 431-446 (англ)

The carbon monoxide flame bands. 2 D

10

Есть оригин.

Proc Phys, 1964, 4D293

IV-208

1963

66 (молек. пост.)

Doubech J.L., Bazon R.F.

Rio otto ? → ce cosbon monoxido. "Acoc.Hyc.Acc.", 1962, 86, № 2, 561-563 (анл.)

ZX., 1963, 6, 669

Его орис

10

7798 – IV

1963

CO(D_o)

Giese C.F., Majer W.B.II

J.Chem.Phys., 1963, 39, N 1, 197-200

( )

Dissociative ionization of ...

P ., 1964, 2D95

J

CO

спектр

1963

V 16 Б139. Инфракрасная люминесценция окиси углерода, возбужденной активированным азотом. Legay Francois, Legay-Sommaire Nicole. Luminescence infrarouge de l'oxyde de carbone excité par l'azote activé. «C. r. Acad. sci.», 1963, 257, № 18, 2644—2646 (франц.)

Получен спектр испускания в области 4,7 μ окиси углерода, возбужденной азотом, активированным высокочастотным полем, с разрешением, достаточным для разделения вращательных полос. Наблюденные полосы соответствуют колебательным переходам 1→0,2→1,3→→2 и 4→3 молекулы CO. Предполагается, что колебательное возбуждение молекул CO осуществляется путем передачи им энергии колебательно-возбужденными молекулами активированного азота. Резюме авторов

Х·1964·16

CO

спектр

1963

Infrared luminescence of carbon monoxide excited by activated nitrogen. Francois Legay and Nicole Legay-Sommaire (Fac. Sci., Orsay, France). *Compt. Rend.* 257(18), 2644–6 (1963). The mixing of CO with a flux of N activated by a high-frequency discharge (2450 Mc.) caused an emission spectrum towards 4.7 μ of sufficient resolution to sep. the rotation lines. The bands observed corresponded to the $1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 2$, $4 \rightarrow 3$ vibrational transitions of CO. It is theorized that the vibrational excitation of CO is effected by the transfer of energy from the vibrationally excited N mols., since activated N contains vibrationally excited N mols. of very long lifetime. This vibrational energy can be transferred rapidly by resonance to the CO mol. since their vibration frequencies are very close [$\nu(N_2)$ = 2331 cm.$^{-1}$, ν(CO) = 2143 cm.$^{-1}$]. An equil. is established between the N and the CO, and deexcitation occurs in a purely radiative manner. This explains the insensitivity of the relative emission to variations in CO pressure, since the quantity of this gas is sufficient to assure a rapid conversion of vibrational energy into luminous energy. Kathleen S./Erb

C.A. 1964. 60. 5
4955gh

CO

ИК-спектр

1963

V11Д279. ИК-спектр CO в аргоне. Leroi George E., Ewing George E., Pimentel George C. The infrared spectrum of CO in argon. Abstract. «Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Columbus, 1963». Columbus, Ohio, s. a., 21 (англ.)

ИК-спектры CO в твердом состоянии или на различных инертных матрицах довольно сложны. В последнем случае относит. интенсивность спектральных проявлений сильно зависит от условий подачи образца. Спектры CO в аргоне, наблюдаемые при различных разбавлениях, т-рах окна кюветы и скоростях подачи, показали, что CO образует агрегаты на матрице аргона, но не вращается. Сдвиг в матрице мономера тот же самый как для $C^{12}O$, так и для $C^{13}O$, тогда как сдвиг по частоте полимера $C^{12}O$ гораздо больше, чем у соответствующих полос изотопа C^{13} из-за колебательных сочетаний.

Ф. 1964. 11Д

1963

H_2, CO, O_2, N_2, CO, H_2S, C_2H_4, C_2D_4,

O_2^+ (спектры)

2 Gallikon R.B.,

Diss. (Nat. Aeron. Space Adm.)
Doc. N 63-10100, 1963, 16pp

Spectroscopic research

CA., 1964, 61, N 8,
9090h

10

CO

флуоресценция

1963

4 Б122. Колебательная флуоресценция окиси углерода. Millikan Roger C. Vibrational fluorescence of carbon monoxide. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 12, 2855—2860 (англ.)

При комнатной т-ре и давлении CO ~1 *мм* рт. ст. обнаружена резонансная колебательная флуоресценция (Ф) окиси углерода. Рассчитанное на основании спектроскопич. данных радиационное время жизни CO по отношению к переходу $v''=1 \rightarrow s''=0$ равно 0.033 сек. Эта величина была получена также экспериментально при исследовании затухания Ф CO в потоке при большом разбавлении в атмосфере инертного газа. Время жизни в чистом CO значительно больше этой величины в результате диффузии и захвата излучения. Определение вращательной т-ры по распределению интенсивности вращательных компонент приводит к значению $T=273°$ K, что очень близко к т-ре поступательного движения 286° K. В то же время эффективность колебательного возбуждения соответствовала т-ре ~1000° K. Определенные по тушению Ф средние числа дезактивирующих столкновений CO с молекулами различных газов изменяются от $2 \cdot 10^6$ для CO—H_2 до 10^{-9}—10^{-10} для CO—CO. Отмечается очень большая эффективность кислорода в тушении Ф CO. Е. Никитин

X·1964·4

CO

W. Maier

1963

1037

„Berichte der Bunsengesell".

м.б.

спектр:

1963, 67, N 6, 549-554.

CO

1963

7 Б168. Собственное расширение линий в полосах 2ν и 3ν окиси углерода. Plyler Earle K., Thibault Robert J. Self-broadening of carbon monoxide in the 2ν and 3ν bands. «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1963, A67, № 3, 229—231 (англ.)

С помощью спектрометра с решеткой 4000 *штрих/см* в первом и втором порядках изучено собственное расширение линий полос 2—0 и 3—0 CO при давлениях до 3,5 *атм*. Спектральная ширина щели (0,08 $см^{-1}$) была достаточно мала, и поправки, связанные с нею, не превышали 3—20% в разных случаях. Полуширина линий γ° уменьшается от 0,089 $см^{-1}$ $атм^{-1}$ для вращательного числа $|m|=1$ до 0,053 $см^{-1}$ $атм^{-1}$ для $|m|=21$. При измерениях в полосе 2—0 использовались слои от 4 до 100 *см*, а в полосе 3—0 400 *см*. В. Дианов-Клоков

X·1964·7

1963

CO

Спектр

4 Д234. Самоуширение линий окиси углерода в 2ν- и 3ν-полосах. Plyler Earle K., Thibault Robert J. Self-broadening of carbon monoxide in the 2ν and 3ν bands. «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1963, A67, № 3, 229—231 (англ.)

С помощью спектрометра высокого разрешения выполнены непосредственные измерения полуширин линий (γ^0) в 2ν и 3ν-полосах CO. При спектральной ширине щели 0,08 $см^{-1}$ поправки на конечную ширину щели были относительно малы (от 3 до 20% для различных условий измерений). Значения γ^0, полученные с точностью ±5%, уменьшаются с ростом квантового числа m от 0,089 $см^{-1} \cdot атм^{-1}$ для $|m|=1$ до 0,053 $см^{-1} \cdot атм^{-1}$ для $|m|=21$ и хорошо согласуются с данными, полученными ранее в других лабораториях (наибольшее расхождение 8% для $|m|=7$). Предполагается, что наибольший вклад в самоуширение линий CO вносят квадруполь-квадрупольные и анизотропные дисперсионные силы.

К. Василевский

Ж. 1964. 4Д

CO

1963

Оценки полн. энергии 2-атомн. молекул.

Stuttman J. M., Lippincott E. R., Steele D.

J. Chem. Phys., 1963, 39, 564 (№ 3)

Расчет спектроскопических параметров высшего порядка, используя эмпирические потенциальные функции.

CO, CO^+, J_2, JCl, Li_2, N_2, NO, Na_2, O_2, AsH, K_2, D_2, KF, DCl, HgD^+, LiK, LiH, NaH

Оценки см. ж, Fe пре.

10 стр

CO

Cryo

IW-III-B13

1963

1–0, 2–0, 3–0 absorption bands of dense forms of pure CO and its solutions in N_2 and Ar. H. Vu, M. R. Atwood, and B. Vodar (C.N.R.S., Bellevue, France). *J. Chem. Phys.* 38, 2671–7(1963). The 1st overtone and the 2nd overtone bands of pure CO as well as the 1st overtone band of CO in soln. in the gaseous, liquid, and solid states of N and Ar were studied. A principal band due to $C^{12}O^{16}$ and a weak satellite due to $C^{13}O^{16}$ and $C^{12}O^{18}$ were found, and displacement of the max. of the principal band and this satellite were measured. The results are compared with those found for the fundamental by the condensed matrix method. The form of the band, in particular its half-width as a function of temp. and d., is discussed.

RCJQ

C.A. 1963 59 1
125h-126a

Обзор 9209 — IV

(вр. ауз. пост.) — H_2, HCl, HBr, CO,

CO_2, CH_4, H_2O и др. 1963

Vodar B., Vu H.

J. Quantt. Spectrosc. and Radiat. Transfer, 1963, 3, № 4, 397-433

Intensites absolues des transitions ...

Реф., 1964, 8D163

10

М-398 - IV 1964

CH_4; CO (Кр)

Cadariusi J., Schönberger E.
Studia Univ. Babes-Bolysi. Ser. chem.,
1964, 9, N 2, 71-76

Термодинамическое рассмотрение реакции метана с окисью углерода.

М orig. Г

РХ, 1965, 21 394

9629 – IV

1964

CO, CN (mol.post., ω_i)

Fishburne G.S., Weinberg J.M.,
Edse R., Rao K.N.
J.Opt.Soc.America, 1964, 54, N 10,
1288

$C_2N_2+N_2O$ flame as ...

J

CO

Черновин Я. И.,
Орлова И. И.

1964

Тр. Комис. по спектроскопии, АН СССР, 1964, т. 3, вып. 1, 205-213.

Определение вероятности спонтан ного излучения N_2O, CO и CO_2. (см. N_2O)

CO

коэф. поглощения

1964

1 Б65. **Коэффициент поглощения окиси углерода в области длин волн 1006—600 А.** Huffman R. E., Larrabee J. C., Tanaka Y. Absorption coefficients of carbon monoxide in the 1006—600-Å wavelength region. «J. Chem. Phys.», 1964, **40**, № 8, 2261—2269 (англ.)

При использовании гелиевого континуума Гопфильда как источника непрерывного спектра фотоэлектрич. методом измерены коэф. поглощения k или поперечные сечения CO в области 600—1006 А. В области от 1006 до ~715 А обнаружены сильные полосы (значения k до ~4500 $см^{-1}$) и ряд слабых полос в коротковолновой области. Положение и относительная интенсивность этих полос хорошо согласовывались с имеющимися спектрами поглощения. Непрерывное поглощение начиналось при ~960 и продолжалось до 600 А. Отмечен интенсивный ионизационный континуум при длинах волн, меньших первого ионизационного потенциала (884,7 А). Один из максимумов в континууме при 870 А (k=710 $см^{-1}$) связан с состоянием $CO^+X^2\Sigma^+$, другой при 724 А (k=950 $см^{-1}$) — с $CO^+A^2\Pi_i$. Проведено сравнение спектров поглощения изоэлектронных молекул CO и N_2.

Ф. Ортенберг

Х·1965·1

CO

поглощение

1964

12 Д145. Коэффициент поглощения окиси углерода в области длин волн 1006—600 Å. Huffman R. E., Larrabee J. C., Tanaka Y. Absorption coefficients of carbon monoxide in the 1006—600-Å wavelength region. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 8, 2261—2269 (англ.)

При использовании гелиевого континуума Гопфильда как источника непрерывного спектра фотоэлектрич. методом, описанным ранее (РЖФиз, 1964, 6Д222), измерены коэф. поглощения k (поперечные сечения) CO в области 600—1006 Å при разрешении 0,5 Å. В области от 1006 до ~715 Å обнаружены сильные полосы (значения k до ~4500 $см^{-1}$) и ряд слабых полос в коротковолн. области. Положение и относит. интенсивность этих полос хорошо согласуется с известными спектрами поглощения. Непрерывное поглощение обнаружено между 960 Å и 600 Å. Отмечен интенсивный ионизационный континуум при длинах волн, меньших первого ионизационного потенциала (884,7 Å). Один из максимумов в континууме при 870 Å ($k=710$ $см^{-1}$) связан с состоянием CO^+ $X^2\Sigma^+$, другой при 724 Å ($k=950$ $см^{-1}$) — с CO^+ $A^2\Pi_i$. Проведено сравнение спектров поглощения изоэлектронных молекул CO и N_2. Ф. Ортенберг

Ф·1964·12Д

IV-M-460

CO

потенц. кривые

Jenčs F. 1964

Collect. Czechosl. Chem. Communs, 29, N 8, 1745.

Приведенные потенциальные кривые для возбужденных состояний двухатомных комбинаций атомов C, N и O.

(См. N_2) III

CO

Jene F.

м.п.

Collect Czechosl. Chem. Communs.
1964, 29, N12, 2869-80.

$C^{12}O^{16}$ ВФ-9696 — XIV 1964

14 Б242. **Распространение субмиллиметровой микроволновой спектроскопии на область длин волн, меньших половины миллиметра.** Jones Gordon, Gordy Walter. Extension of submillimeter wave spectroscopy below a half-millimeter wavelength. «Phys. Rev.», 1964, 135, № 2A, 295—296 (англ.)

Методы микроволновой спектроскопии с высокой разрешающей силой распространены на область вплоть до λ 0,43 *мм*. Измерен вращательный переход J=5→6 молекулы $C^{12}O^{16}$ и определены вращательные постоянные $D_0=0{,}18390\pm0{,}00014$ и $B_0=57635{,}970\pm0{,}003$ *Мгц*. Измерены три компоненты сверхтонкой структуры перехода J=0→1 молекулы HCl^{35} при λ 0,48 *мм* и получены значения $\nu_0=625919{,}24\pm0{,}52$ и $B_0=312991{,}30\pm0{,}26$ *Мгц*. По B_0 определено спектральное значение скорости света $C=299792{,}8\pm0{,}4$ *км/сек*. Значение хорошо согласуется с непосредственно измеренной величиной скорости света.

И. Милевская

Х.1965.14

$C^{12}O^{16}$ спектр.

ВФ-9696-XIV (XIV) 1964

7 Д246. **Расширение субмиллиметровой спектроскопии в область полумиллиметровых волн.** Jones Gordon, Gordy Walter. Extension of submillimeter wave spectroscopy below a half-millimeter wavelength. «Phys. Rev.», 1964, 135, № 2A, 295—296 (англ.)

Методы микроволн. спектроскопии с высокой разрешающей способностью применены до значения длин волн λ 0,43 *мм*. Измерены $J=3\to4$; $4\to5$; $5\to6$ переходы для молекулы $C^{12}O^{16}$. Отмечается, что линия $J=5\to6$ (691472,60±0,60 *Мгц*) в 3 раза выше шумов. Из определения сверхтонких компонент $J=0\to1$ вращательного перехода для молекулы HCl^{15} при 0,48 *мм* найдено значение $B_0=312991{,}30\pm0{,}26$ *Мгц*. При сравнении его с величиной B_0, взятой из ИК-измерений, получено значение скорости света $c=299792{,}8\pm0{,}4$ *км/сек*, хорошо совпадающее с лучшими результатами измерений. Библ. 9 назв.

Б. Н.

Ф. 1965. 7Д

СО ОИЯИ 5212 (в папке Kovacs) 1964

Kovacs J.

Acta Phys. acad. sci. Hung. 1964, XVII, вып. 1-2, 67-74.

Некоторые новые результаты спектроскопич. исследован. двухат. молекул.

CO

BD – 9722 – IV | 1964

(A. P. ионов)

Lassetre E. N.,
Silverman S. M.

J. Chem. Phys., 1964,
40, N 5, 1256-61

6 Д75. **Ридберговские уровни молекулы окиси углерода.** Lefebvre-Brion H., Moser C. M., Nesbet R. K. Rydberg levels in carbon monoxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1964, 13, № 4, 418—429 (англ.)

В рамках метода конфигурац. взаимодействия исследуются ридберговские состояния молекулы CO. Результаты, полученные для ридберговских состояний симметрии $^1\Sigma^+$, $^3\Sigma^+$, $^1\Pi$ и $^3\Pi$, хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными, за исключением состояний $E^1\Sigma^+$ и $E^1\Pi$, отнесение которых, по-видимому, следует пересмотреть. Первое состояние, вероятно, имеет симметрию $^1\Pi$, второе состояние может иметь симметрию $^1\Pi$ или $^1\Sigma^+$. Вычисленные волн. ф-ции анализировались по Малликену с целью определения атомных электронных заселенностей, которые далее использовались для оценки величин квантового дефекта. Найденные таким образом квантовые дефекты ридберговских состояний хорошо согласуются с соответствующими эксперим. величинами. Делается вывод, что приближение самосогласованных МО ЛКАО позволяет удовлетворительно описать характеристики ридберговских молекулярных состояний.

В. Быховский

Ф·1965·6Д

CO

1964

14 Б21. Ридберговские уровни в окиси углерода. Lefebvre-Brion H., Moser C. M., Nesbet R. K. Rydberg levels in carbon monoxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1964, 13, № 4, 418—429 (англ.)

В рамках метода конфигурационного взаимодействия исследуются ридберговские состояния молекулы CO. Электронные волновые функции возбужденных состояний CO, соответствующих возбуждению внешних электронов, строились на основе самосогласованных МО ЛКАО, рассчитанных для основного состояния CO с использованием расширенного базисного набора АО, содержащего вплоть до 18σ- и π-АО. В качестве орбитальных экспонент слейтеровских АО применялись экспоненты, найденные с помощью правил Слейгера. Весь расчет произведен с помощью автоматич. программы, написанной Несбитом. Результаты, полученные для ридберговских состояний симметрии $^1\varepsilon^+$, $^3\varepsilon^+$, $^1\pi$ и $^3\pi$, хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными за

x·1965·14

исключением состояний $E^1\varepsilon^+$ и $F^1\pi$, отнесение которых, по-видимому, следует пересмотреть; что касается первого состояния, то оно, вероятно, имеет симметрию $^1\pi$, второе состояние может иметь симметрию $^1\pi$ или $^1\varepsilon^+$. Вычисленные волновые функции анализировались по Мелликену с целью вычисления атомных электронных заселенностей, которые далее использовались для оценки величин квантового дефекта; найденные квантовые дефекты ридберговских состояний хорошо согласуются с соответствующими эксперим. величинами. На основании изложенного делается вывод, что приближение самосогласованных МО ЛКАО позволяет удовлетворительно описать характеристики ридберговских мол. состояний.

В. Быховский

CO

ИК-спектр

7 Б121. **Инфракрасные спектры окиси углерода в аргоновой матрице.** Leroi George E., Ewing George E., Pimentel George C. Infrared spectra of carbon monoxide in an argon matrix. «J. Chem. Phys.», 1964, **40**, № 8, 2298—2303 (англ.)

Исследован ИК-спектр поглощения CO в матрице из аргона при $T=20°$ K. Смеси газообразного CO и Ar осаждались на охлажденную до 20° пластинку CsJ. Обнаружены сильные полосы 2148,8 и 2138,0 $см^{-1}$ с полуширинами 1,5 и 3,5 $см^{-1}$ соответственно. Их относительные интенсивности сильно зависят от различных эксперим. условий (конц-ии образца, т-ры пластинки, скорости осаждения и др.). Полоса 2148,8 $см^{-1}$ принадлежит молекуле CO, изолированной в аргоновой матрице, и не имеющей возможности вращаться. Вторая полоса связана с агрегатами из молекул CO. Исследования спектров изотопич. молекул $C^{13}O^{16}$ показывают, что между идентичными по изотопич. составу партнерами в агрегате имеется взаимодействие колебаний, заметно меняющее частоты молекул в агрегате по сравнению с мономерными молекулами. В. Дианов-Клоков

1964

Х·1965·7

CO

ИК-спектр

IV-9726

1964

12 Д182. ИК-спектр окиси углерода в твердом аргоне. Leroi George E., Ewing George E., Pimentel George C. Infrared spectra of carbon monoxide in an argon matrix. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 8, 2298—2303 (англ.)

Измерен ИК-спектр поглощения окиси углерода в смеси с аргоном при 20° К в интервале частот 2125—2155 *см*$^{-1}$. Отношение аргона к окиси углерода менялось в смеси от 105 до 8000. Найдены полоса поглощения при 2148,8 *см*$^{-1}$, отвечающая колебаниям CO, и полоса 2138 *см*$^{-1}$, связанная с поглощением агрегатов CO.

Д. Глебовский

Ф·1964·120

CO

Vi

спектр

матрице

1964

Infrared spectra of carbon monoxide in an argon matrix. George E. Leroi, George E. Ewing, and George C. Pimentel (Univ. of California, Berkeley). *J. Chem. Phys.* 40(8), 2298–303(1964). The infrared absorption spectrum of CO in an Ar matrix shows prominent bands at 2148.8 and 2138.0 cm.$^{-1}$ with half-widths, resp., 1.5 and 3.5 cm.$^{-1}$ The relative intensities of these bands are extremely dependent on a variety of exptl. conditions, including sample concn., window temp., and deposition rates. The variability shows that CO isolated in Ar absorbs at 2148.8 cm.$^{-1}$ and that it does not rotate. The lower frequency absorption is due to aggregates. The frequency shift of the Ar-isolated CO absorption relative to that of gaseous CO shows that CO fits tightly in the Ar lattice. In contrast, the CO aggregates absorb at lower frequency than gaseous CO. Isotopic studies using $^{13}C^{16}O$ reveal vibrational coupling of 1.1 cm.$^{-1}$ between isotopically identical mols. in an aggregate. An increase in matrix cavity diam. would be needed if a stationary CO mol. begins to rotate in Ar. This site expansion, which could be as much as 0.4 Å., may be an important factor inhibiting rotation. RCJQ

IV-1

C.A. 1964 60 N11 12789f.

=CO

1964

Силовые посст.

ν_{C-O}

6 Д138. **Молекулярные параметры и строение связей. III. Связи углерод — кислород.** Ladd J. A., Orville—Thomas W. J., Cox Bertram C. Molecular parameters and bond structure. III. Carbon-oxygen bonds. «Spectrochim. acta», 1964, 20, № 12, 1771—1780 (англ.)

Составлена таблица значений силовой постоянной связи CO и длины этой связи в молекулах CO_2, OCS, $H_2C=C=O$, HNCO и в различных электронных состояниях молекулы $C^{12}O^{16}$ и иона $(C^{12}O^{16})^+$. Построены кривые зависимости силовой постоянной от длины связи и частоты вал. кол. связи CO от силовой постоянной. Вычисление по ф-ле Кларка приводит к лучшим результатам в сравнении с ф-лой Бэджера. По методу наименьших квадратов установлено соотношение: $\log f(CO) = 5{,}79 \log r(CO) + 6{,}55$ или $f(CO) = 35{,}5\, r_{CO}^{-5{,}79}$ *мдн*/Å. Последнее ур-ние использовано

Ф·1966-6Д

для вычисления силовой постоянной связи CO в ионе CO_3^{2-}. Получено значение 7,33 *мдн*/Å. По этому значению и частотам колебаний найдены остальные 5 силовых постоянных этого иона. Связь CO является промежуточной между одинарной и двойной связями. Этот вывод согласуется с вычисленным по методу молекулярных орбит порядком связи (1,58). По значениям длин связей вычислены силовые постоянные связей CO в 12-многоатомных молекулах Ч. I см. РЖХим, 1966, 10Б125. Ч. II см. Jones R., Ladd J., Orville-Thomas W. «Spectrochim. Acta», 1964, 20, 1697. М. Ковнер

отношении

Geick R.

Evidence for a considerable nonlinear dipole absorption in gallium arsenide.

Phys Rev 1965, 138, N 5A, 1495—1499.

CO

1964

1 Б107. Инфракрасная флуоресценция окиси углерода. McCaa David J., Williams Dudley. Infrared fluorescence of carbon monoxide. «J. Opt. Soc. America», 1964, 54, № 3, 326—330 (англ.)

Найдено, что при облучении CO в области перехода $V=0\rightarrow2$ (2,3 μ), возникает излучение, соответствующее переходам $V=1\rightarrow0$. Возникновение состояний $V=1$ объясняется резонансным переносом энергии при столкновениях $CO(V=2)\rightarrow CO(V=0)$, в результате которых возникают две молекулы $CO(V=1)$. Их дезактивация происходит с излучением на длине волны 4,6 μ.

В. Ковалев

x · 1965 · 1

4

1964

3917 – IV

N_2; CO; BF (De, re,)

Nesbet R.K.
J.Chem.Phys., 1964, 40, N 12,
3619-3633

Electronic structure ...

J

1964

Жехе (связи OH, NH, CH, SiH, CD, C=C, CO, в 60 молекулах)

Papousek D.
Collect. Szchosl.Chem.Communs, 1964, 29, 2274-82

Characteristic anharmonic effects in the vibrational spectra of ...

J
PX,1965,13B46

Ub. мор. разгр. мол. и CO

1964

Quantum mechanical study of molecules. Electronic states of diatomic molecules. Roop C. Sahni. NASA Accession No. N64-25713, Rept. No. NASA-TN-D-2363. Avail. OTS, 49 pp. (1964)(Eng). The theory of the mol. orbital method for ground, ionized, and excited states of mols. is outlined. A brief summary of the interaction integrals and their tabulation is given. An automatic program designed for the computation of various states of mols. is outlined. Examples of the study of ground, ionized, and excited states of CO, BH, and N mols. where the programs of automatic computation and mol. integrals were used are presented. From *Sci. Tech. Aerospace Rept.* 2(17), 2378(1964).
TCSL

C.A. 1965. 62. 12
13857б

CO Shurvell H.F 1964

Diss. Abstr., 1964, 25, N 4, 2260.

ИК-изучение малых молекул в инертных матрицах.

(См. МСС)

CO
интенс.
в спектре
X -> A

1964

Intensity distribution for the $X\ ^1\Sigma^+ \rightarrow A\ ^1\Pi$ transition in carbon monoxide excited by electron impact. S. M. Silverman and E. N. Lassettre (Ohio State Univ., Columbus). *J. Chem. Phys.* 41 (12), 3727–9(1964)(Eng). The envelope shape for the unresolved $X\ ^1\Sigma^+ \rightarrow A\ ^1\Pi$ transition in CO excited by electron impact was exptl. detd. at an incident electron energy of 508 v. The distribution was compared with calcns. by using published theoretical formulations, from which the Franck-Condon factors can be obtained. RCJQ

C.A·1965·62·3
2379a

1964

CO

William Leroy Taylor.

потенц. ф-ции.

Dissertation Abstr. 24 (10), 4014.

Intermolecular potential functions for Ar, Co, and cyclohexane.

(см. Ar)

C.A. 1964. 61. 3

CO

1964

4 Д66. Множители Франка-Кондона, соответствующие ионизации молекул CO, NO и O_2. Wacks Morton E. Franck-Condon Factors for the ionization of CO, NO, and O_2. «J. Chem. Phys.», 1964, **41**, № 4, 930—936 (англ.)

С помощью потенциала Морзе вычислены вероятности следующих переходов

Для $CO\,(X'\Sigma^+, v''=0) \to CO^+\,(X^2\Sigma^+, v'=0\to 10)$;

$(A^2\Pi_i, v'=0\to 10)$; $(B^2\Sigma^+, v'=0\to 10)$.

Для $NO\,(X^2\Pi, v''=0) \to NO^+\,(X'\Sigma^+, v'=0\to 10)$;

Ф. 1965. 4Д

$(A'\Pi, v' = 0 \to 10)$.

Для $O_2(X^3\Sigma_g^-, v'' = 0,1) \to O_2^+(X^2\Pi_g, v' = 0 \to 10)$;

$(a^4\Pi_u, v' = 0 \to 15)$; $(A^2\Pi_u, v' = 0 \to 20)$;

$(b^4\Sigma_g^-, v' = 0 \to 10)$.

Результаты вычислений представлены в таблицах и используются для получения эффективности ионизации в зависимости от энергии фотона или электрона. Рассмотрены ранее полученные эксперим. результаты, относящиеся к ионизации молекул CO, O и O_2.

Н. Генералоз