

1960

CO₂

1960

Вак В., Хансен - Нугаард

Ж. Chem. Phys., 1960, 33, 418

Корреляция молекуляр-
ных структур.



CO₂
CS₂

Вар - 359 - IV

1960

4Б60. Ионизация и диссоциация молекул под действием моноэнергетических электронов. II. Возбужденные состояния молекулярных ионов CO₂ и CS₂. Collin Jacques. L'ionisation et la dissociation des molécules par des électrons monoenergetiques. II. États excités de l'ion moléculaire de CO₂ et CS₂. «J. chim. phys. et phys.-biol.», 1960, 57, № 5, 424—429 (франц.).— На масс-спектрометре с применением электронов, монохроматизированных методом разностей задерживающих потенциалов, зарегистрированы кривые появления мол. ионов CO₂ и CS₂. По изломам на кривых появления определены потенциалы ионизации молекул в основном и возбужденном состояниях. Получены следующие значения потенциалов ионизации (в эв): для CO₂ $13,85 \pm 0,10$, $17,23 \pm 0,28$, $19,25 \pm 0,40$ и $21,0 \pm 0,39$; для CS₂ $10,15 \pm 0,05$, $12,01 \pm 0,09$, $13,60 \pm 0,19$, $14,76 \pm 0,25$, $15,90 \pm 0,12$ и $18,10 \pm 0,36$. Измеренные уровни возбуждения мол. ионов идентифицированы путем сравнения с соответствующими спектроскопич. данными и с теоретич. расчетами. Ч. I см. РЖХим, 1961, № 3, 3Б124. Е. Ф.

2.1961.34

CO₂

IV-365

(1960)

10Б67. Спектры поглощения окиси углерода в дальней ультрафиолетовой области. Damanu-Astoin Nicole, Sanson Livia, Bonnelle Marie-Claude. Sur le spectre d'absorption de l'anhydride carbonique dans l'ultraviolet extrême. «C. r. Acad. sci.», 1960, 259, № 10, 1824—1826 (франц.).—В области 160—1600 Å снят спектр CO₂, который имеет три широкие полосы поглощения. Первая полоса, начинающаяся при 120 000 см⁻¹ и достигающая максимума при 144 000 см⁻¹ (17,8 эв), отвечает процессам ионизации в молекуле CO₂. Вторая полоса между 240 000 см⁻¹ (29,8 эв) и 320 000 см⁻¹ связана, возможно, с процессами: CO₂ → C + (²P) + 2O(⁴S) (28,3 эв) и CO₂ → CO + (B²Σ⁺) + O(¹D) (28,05 эв). Третья полоса, находящаяся выше 340 000 см⁻¹ (42 эв), вызвана процессом: CO₂ → C + O + O (41,3 эв). Н. Куплетская

x.1961.10

1960

CO₂
CS₂
Cureche
Hofman
Paerz

Normal vibration calculation taking into account the anharmonicity. V. Carbon dioxide and carbon disulfide. Itaru Gamo. *Mem. School Sci. Eng., Waseda Univ., Tokyo, Japan* No. 24, 80-3(1960); cf. CA 49, 12957h. The normal vibrations for CO₂ and for CS₂ were calcd., taking anharmonicity into account. Anharmonic corrections were detd. from Courtoy's (CA 51, 11066i) values of normal and fundamental frequencies for CO₂ and from Stoicheff's (CA 52, 6930b) values for CS₂. The anharmonic consts. of the 2 mols. were compared and a considerable parallelism between them was observed. The force consts. were calcd. from the normal frequencies and the cross-term consts. for each mol. were found to be far larger, but of the same order of magnitude as the resp. bending consts.

Z. P. Gavrilis

C.A. 1963-59.2

1201 gh

1960

CO_2 Valence-bond structures. A new proposal. J. W. Linnett (Univ. of California, Berkeley). *Nature* 187, 859-61 (1960).—To account for the stability of such mols. as C_6H_6 and CO_2 , it is proposed to treat the electron octet as 2 groups of 4 electrons each rather than as 4 pairs. A. Querfeld, Jr.

C.A.1961.55.5.4074d

CO₂
Кислота

Кислоты

Mahan B. K.,

(1960)

J. Chem. Phys., 1960, 33, 959 (v 4).

Факторы влияния температуры

CO_2
 C_2H_2

1960

2535 McLean A.D.

Расчеты основных состояний
 C_2H_2 и CO_2 по методу само-
согласованных молекулярных
орбит в приближении ЛКАО. —

J. Chem. Phys., 1960, 32, N 5,
1595 - 1597.

ж. 1961.2. 2535

CO_2

молек.

распре-

McLean A. G., Ransil B. J.,

Mulliken R. S.,

J. Chem. Phys., 1960, 32, 1843 (26)

Распределение зарядов, ионизация и свечение в
активных и возбужденных молекулах.

1960

CO₂

1960

4B68. Поправки третьего порядка к колебательно-вращательной энергии многоатомных молекул. Maes Serge. Les corrections du troisième ordre à l'énergie de vibration-rotation des molécules polyatomiques. «Cahiers phys.», 1960, 14, № 116—117, 125—208 (франц.; рез. англ.).—Вычислены матричные элементы оператора 3-го порядка малости, входящего в преобразованный колебательно-вращательный гамильтониан многоатомной молекулы. Получены ф-лы, выражающие зависимость этих матричных элементов от квантовых чисел и молекулярных постоянных. Расчеты выполнены для трех

см. н/б

001961-64

случаев: отсутствия резонансов, «истинного» резонанса $2\omega_n \cong 3\omega_n$ и резонанса Ферми. Рассмотрены примеры асимметричных молекул, молекул с симметрией C_{3v} и D_{3h} и линейных молекул. С вычисленными матричными элементами составлены вековые уравнения, определяющие поправки к значениям энергии. Эти вековые уравнения решены для метилциана и метилизоциана. Сопоставление их микроволновых спектров с результатами расчетов позволило определить постоянные Корнолиса: $\zeta_3^2 = 0,9405 \pm 0,0008$ и $0,930 \pm 0,005$. Теория применена к резонансу $3\omega_1 \cong 2\omega_3$ в ИК-спектре синильной кислоты, что позволило дать детальную интерпретацию этого спектра. Вычисленные коэффициенты в формуле для энергии молекул $C^{12}O_2^{16}$ и $C^{13}O_2^{16}$ хорошо согласуются с их ИК-спектрами.

М. Ковнер

CO₂

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

1960

Bpp-5-166-111
J. Res. Natl. Bur. Std., 64A, 29-48.
Vibration-rotation structure
in absorption bands for the
calibration of spectrometers
from 2 to 16 microns.

CO₂

CS₂

COS

N₂O

у.ф. спектр
поглощ.

х. 1961.24

✓24Б89. Высшие потенциалы ионизации линейных трехатомных молекул. I. CO₂. II. CS₂, COS и N₂O. Tanaka Y., Jursa A. S., Le Blanc F. J. Higher ionization potentials of linear triatomic molecules. I. CO₂. II. CS₂, COS, and N₂O. «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 4, 1199—1205; 1205—1214 (англ.).—I. Исследована известная ранее, а также обнаружены две новые ридберговские серии молекулы CO₂, приводящие к потенциалам ионизации 13,78 (I), 18,23 (II) и 19,38 эв (III). Потенциал I в соответствии с интерпретацией Мелликена соответствует энергии 1π_g-МО и должен быть сравнен с величиной 11,5 эв, рассчитанной Маллиганом (Milligan J. F. «J. Chem. Phys.», 1951, 19, 347) в приближении самосогласованного поля МО ЛКАО. Потенциал II однозначно идентифицировать не удастся, однако, вероятно, потенциал II соответствует ионизации 1π_u-МО (полуэмпирич. значение Мелликена равно 1,09 мв). Потенциал III отождествлен с энергией ионизации 2σ_g-МО, причем это отнесение согласуется с расчетом Маллигана и предсказанием Мелликена. Обнаруженные в коротковолновой части спектра (1300—850 Å) неридберговские полосы связаны, возможно, с переходами 1,3Π_g → Σ⁺1_g.
Е. Никитин

1960

11-24h-dosy

М. Исследованы спектры поглощения CS_2 , COS и N_2O в дальней УФ-области. На основе анализа ридберговских серий определены 4 потенциала ионизации молекулы CS_2 , равные (в эВ): 1,01; 14,47; 16,18 и 19,54. Для COS определены 3 потенциала: 11,2, 16,04, 17,93 а для N_2O 12,9, 16,4 и 20,10 эВ . Полученные значения первых потенциалов ионизации удовлетворительно совпадают с определенными ранее, за исключением N_2O , где имеется расхождение. Обсуждены также неридберговские серии полос поглощения. Приводятся таблицы всех измеренных полос.

Г. Неуймин

ген.
утри

1B106. Высшие потенциалы ионизации линейных трехатомных молекул. I. CO_2 . Tanaka Y., Jursa A. S., LeBlanc F. J. Higher ionization potentials of linear triatomic molecules. I. CO_2 , «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 4, 1199—1205. (англ.).—Исследована известная ранее, а также обнаружены две новые ридберговы серии молекулы CO_2 , приводящие к потенциалам ионизации 13,78 (I), 18,23 (II) и 19,38 эв (III). Первый из них в соответствии с интерпретацией Мэлликена соответствует энергии $1\pi_g$ -МО и должен быть сравнен с величиной 11,5 эв, рассчитанной Маллиганом (Mulligan J. F. «J. Chem. Phys.», 1951, 19, 347) в приближении самосогла-сованного поля ЛКАО МО. Потенциал II однозначно идентифицировать не удастся, вероятно, однако, что II соответствует ионизации $1\pi_u$ -МО (полуэмпирич. значение Мэлликена равно 1,09 эв). Потенциал III отождествлен с энергией ионизации $2\sigma_g$ -МО, причем это отношение согласуется с расчетом Маллигана и предсказанием Мэлликена. Обнаруженные в коротковолн. части спектра (1300—850 Å) неридберговы полосы связаны, возможно, с переходами $1^3\Pi_g \rightarrow 1^1\Sigma^+_g$. Е. Никитин

1961

CO₂
N₂hydroxy. uohy
yes

Absorption spectra of CO₂ and N at 160-1000 Å. N. Damany-Astoin, L. Sanson, J. Romand, and B. Vodar. *Mem. Soc. Roy. Sci., Liege* 4, 202-6(1961)(in French). CO₂ and N were each introduced sep. into the body of the spectrograph at $\sim 10^{-2}$ mm. The resultant spectra were essentially several groups of bands superimposed on an absorption continuum. The N used contained O (6 p.p.m.) and H₂O (3 p.p.m.) impurities. Six (6) absorption discontinuities were observed at 15.7 e.v. (1st ionization potential of the mol.), 18.9 e.v. (through the 2nd ionization potential), 24.5 e.v. (probably due to $N_2 \rightarrow N(^4S) + N(^3P)$), 42 e.v. (probably due to $N_2 \rightarrow N(^2P^0) + N(^3P^0)$), 48.5 e.v. (probably due to the formation of N_2^{++}), and 66 e.v. (probably due to $N_2 \rightarrow N(^2P) + N^{++}(^4P)$). The CO₂ used was free from CO, SO₂, O, and H₂O vapor. Three distinct absorptions were observed. Discontinuities were observed at 17.8 e.v. (weak) (corresponds to the 2nd ionization potential of the mol.), 29.8 e.v. (possibly due to $CO_2 \rightarrow C^{+}(^2P) + 2O(^4S)$), and 42 e.v. (probably due to $CO_2 \rightarrow C^{+} + O^{+} + O$). 16 references.

H. M. Bowman

C. A. 1962. 57. 1

283 gh

210 -15

I96I

A.P. --/N₂, NO, CO, CO₂, HCl, DBr,
HI, NH₃i/

Dorman F.H., Morrison J.D.

J.Chem.Phys., I96I, 35, N 2, 575-58.
(AHM.)

Double and triple ionization in
molecules induced by electron impact.
PX, I962, 668I.

M.H

CO_2 (C, S, H, Ho) IV - 1534

194

m, gcp. min

Gordon F. S.,

J. Chem. and Eng. Data, 1961, 6, N3, 390

CO₂

G. Herzberg P. R. S.

1961

1282

Revue Universelle des Mines

9^e série T. XVII, N^o 2, 1961.

чектp.

La spectroscop. dans la science
moderne.

p 1-10

CO₂

G. Herzberg, A. Monfils,
B. Rosen.

1961

1281

Memoires. Soc. R. Sc. Liege,
cinquieme Serie, tome IV,
fasc. unique. Extrait

p 146 - 178

CO₂

Wm. F. Herzog, A. H. Nielsen

1961

Spectrochim. Acta, 1961, 17, 1123

Новые измерения ν_3 CO₂.

Вновь исследованы ν_3 CO₂ при высокой дисперсии
Численные данные нет, обещают измерить
молеку. потенциал

1194

12Б84. Инфракрасные спектры толстых пленок CO_2 и $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ при низких температурах. Jасох Mаrilyn E., Milligon Dolphus E. The "infrared spectra of thick films of CO_2 and $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ at low temperatures. «Spectrochim. acta», 1961, 17, № 11, 1196—1202 (англ.).—Исследованы ИК-спектры поглощения толстых пленок CO_2 и разб. твердых р-ров H_2O в CO_2 при 53 и 4° К. Для этой цели использованы ИК-спектрометр Бекмана IR-7 с решеткой и с двулучевой схемой регистрации (разрешение $\sim 0,5 \text{ см}^{-1}$). Спектрально не установлено образования комплекса между CO_2 и H_2O . Колебательные частоты решетки CO_2 (твердой) находятся в комбинации с частотами ν_2 и ν_3 CO_2 . Отнесены полосы мономера и димера H_2O в области 1600 см^{-1} . Слабое поглощение образцов при 53° К в области ν_1 CO_2 несколько возрастает при 4° К, очевидно вследствие увеличения числа дефектов в кристалле. Кроме того, при 4° К наблюдается также и $2\nu_2$ CO_2 .

Н. Чумаевский

Х.1982.12.

CO,

Г. Яков

1961

Смеш. ренд. 1961, 253, №3, 425

Исфрак. спектры углекислого аммиака по
данным в растворе в орг. растворителях

Спектр в ос. 5600-610 см⁻¹, растворители CCl_4, CS_2

Метод получения однородных смесей коксен, который с
помощью кросовой ам- радури, который имеет коксу
по очень большим размерам или при очень больших и плотных.

I96I

CO₂

I2B208

Ketelaar J. H. J.

Rettchnick R. P. H.

ИК-полосы поглощения, включающие
одновременные вращательные пере-
ходы в H₂.

" J. Chem. Phys. ", I96I, 35, №5;

I909

Ф-I962-I2B

11-405

1961

NH_3 , CO_2 , H_2O , SO_2 (A.P. Ионов?)
 CS_2 (D)

BP-5205-III

Kraus A.

Z.N. urforsch., 1961, 16a, N 12, 1378-1385
(H.C.M.)

Bestimmung kritischer Elektronenenergie
für die Bildung negativer Ionen bei
Elektronenstoss mittels einer R.D-Methode.

PA, 1962,
22505

10

Всего 9.к.

CO₂

1393-422-15

1961

16Б70. Исследование спектра поглощения CO₂ в области 15—18 микрон при высоком разрешении. Ma d den Robert P. A high-resolution study of CO₂ absorption spectra between 15 and 18 microns. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 6. 2083—2097 (англ.).—Исследовано поглощение в индивидуальных линиях и Q-ветвях полос CO₂ в участке спектра 15—18 м. Определены ширины и интенсивности поглощения линий на длинноволновой стороне основной полосы ν_2 и линий полосы 02⁰⁰—01¹⁰ C¹²O₂¹⁶. В последнем случае определены зависимости ширины и интенсивности линий от вращательного квантового числа I , а также параметр корiolисова взаимодействия. Интенсивности других пяти полос C¹²O₂¹⁶ найдены из результатов измерения их Q-ветвей. Оценены интенсивности основных полос ν_2 для изотопич. молекул C¹³O₂¹⁶ и O¹⁸C¹²O¹⁶. Для основной полосы ν_2 C¹²O₂¹⁶ частично разрешена ротационная структура в Q-ветви и определены константы полосы. Найдено положение головы полосы основного колебания ν_2 изотопич. молекулы O¹⁸C¹²O¹⁶. В. Дианов-Клоков

X-1962-16

CO₂

РЖ

1 Д140. Исследование спектра поглощения CO₂ в области 15—18 μ при высоком разрешении. Madden Robert P. A high-resolution study of CO₂ absorption spectra between 15 and 18 microns. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 6, 2083—2097 (англ.)

С помощью светосильного спектрометра Эберта — Фаста (относит. отверстие 1:6, решетка 350×350 мм, 1000 штрих/мм, высота щелей 75 мм) при разрешении 0,06—0,08 см^{-1} в области 15—18 μ исследована вращательная структура колебательной полосы поглощения CO₂, (давл. 25—750 мм рт. ст., т-ра 300°K, длина оптич. пути 0,2—25 см). Определены положения максимумов, значения интенсивностей и полуширин вращательных линий, принадлежащих основной полосе ν_2 , полосе 02°0—01°10 (P-ветвь) молекулы C¹²C₂¹⁶, а также полосам ν_2 изотопич. молекул C¹³O₂¹⁶ и O¹⁸C¹²O¹⁶. Частично разрешена вращательная структура Q-ветви основной полосы ν_2 C¹²O₂¹⁶ и вычислены вращательные постоянные молекулы. Результаты сравнены с данными других авторов. Библи. 31 назв. Н. Ярославский

Вар-422-11

ф.1963.19

CO₂

1961

1Б77. Высокотемпературное поглощение двуокиси углерода при 4,40 μ . Steinberg Martin, Davies William-O. High-temperature absorption of carbon dioxide at 4.40 μ . «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 4, 1373—1377 (англ.).—Измерено поглощение смесей 5% CO₂ в N₂ в области 4,40 μ при т-рах 1200—2100° K, оптич. плотностях 0,10—0,40 атм-см и парц. давлениях CO₂ 0—40 мм рт. ст. Газовая смесь нагревалась сжатием газа в ударной трубе. В указанных пределах давлений и т-р оказался справедлив закон Бера. Коэф. поглощения не зависит от общего давления в пределах 0,26—1,05 атм. Эксперим. значения коэф. поглощения CO₂ качественно согласуются с теоретич. расчетами для модели гармонич. осциллятора. А. Русин

х. 1962.1.

CO_2

Tourin R.H.;

11961

J. Opt. Soc. Am., 51, 799.

Spectral emissivity of hot
 $\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ mixtures in the
 $2, 7 \mu$ region.

CO₂ 7 Д75. Теоретическое изучение аномальной вращательной структуры 03¹¹ вращательно-колебательного спектра C¹³O¹⁶₂. Andrade e Silva M. H., Amat G. Theoretical study of the anomalous rotational structure of level 03¹¹ in the rotation-vibration spectrum of, C¹³O¹⁶₂. «J. Molec. Spectrosc.», 1962, 9, № 5, 354—365 (англ.)

В работе Куртуа (РЖФиз, 1960, № 1, 2188) установлено, что вращательные подуровни с четными значениями вращательного квантового числа J полосы 01¹⁰—03¹¹ колебательно-вращательного спектра C¹³O¹⁶₂ претерпевают вращательное возмущение, которое не происходит с уровнями с нечетными значениями J . Показано, что это возмущение не может быть объяснено непосредственным взаимодействием двух уровней и обусловлено резонансом Ферми между уровнем 03¹¹ и 11¹¹ (Π) и между уровнем 30⁰⁰ и уровнями 22⁰⁰; 14⁰⁰; 06⁰⁰ (Σ^+). Для этих взаимодействий вычислены матричные элементы возмущения. Составленная из них матрица распадается на две субматрицы, соответствующие симметричной и антисимметричной линейной комбинации волн. ф-ций. Из структуры этих матриц следует, что симметричный уровень 03¹¹ смещается вследствие резонанса,

ф. 1963-7

а антисимметричный уровень 03^{11} не смещается, что согласуется с результатами Куртуа. Матричные элементы выражены через частоты колебаний и постоянные ангармоничности и в результате решения векового уравнения определены численные значения смещенных уровней энергии, согласующиеся с опытными данными. Помимо рассмотренного сильного резонанса, существуют слабые возмущения других уровней энергии, обусловленные недиагональными матричными элементами. Эти возмущения вызывают изменение постоянных инерций B .

М. Ковнер

как
твие

CO₂
Спектр -

22 Б111. Теоретическое изучение аномальной вращательной структуры полосы 03¹1 в колебательно-вращательном спектре C¹³O₂¹⁶. Andrad e Silva M. H., Amat G. Theoretical study of the anomalous rotational structure of level 03¹1 in the rotation-vibration spectrum of C¹³O₂¹⁶. «J. Molec. Spectrosc.», 1962, 9, № 5, 354—365 (англ.)

1962

Ранее предполагалось, что аномальные положения линий вращательной структуры полосы 01¹0—03¹1 в колебательно-вращательном спектре C¹³O₂¹⁶ вызваны сильным резонансом Ферми между близкими по энергии колебательными уровнями 03¹1 и 30⁰0. Теоретич. анализ показывает, что картина резонанса более сложная и за смещение линий в спектре ответствен целый ряд взаимодействий, описываемых матричными элементами: (11¹1 | H' | 30⁰0), (11¹1 | H' | 22⁰0), (11¹1 | H' | 14⁰0), (11¹1 | H' | 06⁰0), (11¹1 | H' | 06⁰0) (03¹1 | H' | 22⁰0), (03¹1 | H' | 14⁰0), (03¹1 | H' | 06⁰0). Методом теории возмущений получена общая ф-ла, описывающая положения возмущенных уровней. Ф-ла упрощена для частного случая слабого взаимодействия. И. Милевская

X. 1963.22

CO₂

Energy

1962

1443 THEORETICAL STUDY OF THE ANOMALOUS
ROTATIONAL STRUCTURE OF LEVEL 03¹₁ IN THE
ROTATION-VIBRATION SPECTRUM OF C¹³O₂¹⁶. M. H.
Andrade e Silva and G. Amat (Faculté des Sciences, Paris).
J. Mol. Spectry., 9: 354-65(Nov. 1962).

The strong resonance which takes place between 03¹₁
and 30⁰₀ levels of C¹³O₂¹⁶ was studied from a theoretical
point of view. It was found that the off-diagonal matrix
elements involved in the effect were also responsible for
weak perturbations in other rotation-vibration levels of
the molecule. (P.C.H.)

NSA-1963-17.2

9346 - IV

CaH_2

1962

(обзор) O_2Ne , CH_4 , N_2 , CO , CO_2

Бажулин Н.А.

7777

Успехи физ. наук, 1962, 77, № 4, 639-648
Исследование вращательных ...

У

24 Б97. Механизм хемилюминесцентных реакций рекомбинации с участием атомов кислорода. Clyne M. A. A., Thrush B. A. Mechanism of chemiluminescent combination reactions involving oxygen atoms. «Proc. Roy. Soc.», 1962, A269, № 1338, 404—418 (англ.)

Газофазные р-ции $O + NO + M \rightarrow NO_2 + M$ (1a) и $O + CO + M \rightarrow CO_2 + M$ (1c) изучены в проточной системе при 200—300° K; M = Ar, He, Ne, O₂, N₂. Атомы O получались при безэлектродном ВЧ-разряде в O₂ в кварцевой трубке ([O]/[O₂] = 0,5—5%) либо при введении NO в поток атомов N, полученных при разряде в N₂, по р-ции $NO + N \rightarrow N_2 + O$. Интенсивность хемилюминесценции (ХЛ) I_a и I_c р-ций (1a) и (1c) измерялась на определенных расстояниях от места смешения фотоумножителем 9558В с фильтрами, выделяющими области 3200—3900 (для I_a) и 5000—5600 Å (для I_c); она подчиняется выражению типа $I = I_0[O][XO]$. I₀ не зависит от полного давления, т. е. от [M], но для M = O₂ и N₂ немного больше, чем для Ne и He. Влияние природы газа-носителя указывает на механизм тройных столкновений для р-ций (1a) и (1c), а независимость от [M] — на участие третьей частицы как в стадии возбуждения, так и в стадии тушения — при

1969

CO₂
2

X. 1963.24

см.
нуб.

столкновении M с возбужденным продуктом р-ции. Применение хемилюминесцентного титрования (по вводимому NO_2) позволило определить абс. конц-ию O и получить абс. значения I_0 (для $M = O_2$): $I_{0a} = 3 \cdot 10^6 \exp\{(+1500 \pm 400)/RT\}$, $I_{0c} = 6 \cdot 10^6 \exp\{(-3700 \pm 500)/RT\}$ см² эйнштейн⁻¹ сек⁻¹, а также константы скорости K_{1a} р-ции (1a): $9 \cdot 10^{14} \exp\{(+1800 \pm 400)/RT\}$ см⁶ моль⁻² сек⁻¹. Отрицательные значения температурных коэф. для I_{0a} и K_{1a} связаны с обратной диссоциацией NO_2^* с высоких колебательных уровней, расположенных на 1—2 ккал/моль ниже предела диссоциации молекулы. По оценке примерно половина всех актов рекомбинации приводит к образованию электронно-возбужденного состояния NO_2 , обусловленного преддиссоциацией в спектре поглощения, из которого молекула легко переходит в другое электронное состояние, обусловленное ХЛ. Совпадение температурных коэф. I_{0a} и K_{1a} показывает, что точка пересечения кривых потенциальной энергии этих состояний расположена близко к пределу диссоциации, что оба они устойчивы и что дезактивация при столкновениях не требует энергетич. барьера. Р-ция (1c) в целом запрещена, так как в ней не сохраняется спин: $\text{CO}(^1\Sigma^+) + O(^3P) \rightarrow \text{CO}_2(^1\Sigma_g^+)$. Авторы полагают, что CO_2 первично образуется в триплетном состоянии 3B_2 , из которого легко переходит в состояние 1B_2 и затем, излучая свет ХЛ,— в $^1\Sigma_g^+$. Предэкспоненты I_{0a} и I_{0c} практически одинаковы, а I_{0c} имеет положительную энергию активации, соответствующую барьеру, который преодолевает образующаяся молекула CO_2 , чтобы оказаться в устойчивом состоянии 3B_2 . Р. Васильев

CO₂

Cueupp

Bq - 7538-IV

1962

1442)

ROTATIONAL PERTURBATIONS IN THE
INFRARED SPECTRA OF C¹³O₂. C. P. Courtoy (Facultés
Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur, Belg.), and
E. A. Triaille. J. Mol. Spectry., 9: 339-53(Nov. 1962).

Perturbation for the level 03¹1 of C¹³O₂ was studied
thoroughly. A theory developed to explain the perturbation
was systematically applied to all the energy levels that
might be affected by it. For many levels, the rotational
constants are perturbed, sometimes even for levels more
than 300 cm⁻¹ apart. (auth)

NSA-1963-17-2

$C^{13}O_2$

спектр

✓ 14 Б180. Вращательные возмущения в инфракрасном спектре $C^{13}O_2$. Courtoy C. P., Triaille E. A. Rotational perturbations in the infrared spectra of $C^{13}O_2$. «J. Molec. Spectrosc.», 1962, 9, № 5, 339—353 (англ.)

Методом, предложенным ранее (РЖХим, 1963, 22Б111), рассмотрены возмущения в колебательном спектре $C^{13}O_2$, вызванные резонансом Ферми. Определены положения невозмущенных уровней для ряда переходов, подверженных сильному резонансу: $(00^0 1)$, $(00^0 3)$, $(01^1 1)$, $(01^1 3)$, $(10^0 1)$, $(02^0 1)$, $(10^0 3)$, $(02^0 3)$, $(11^1 1)$, $(03^1 1)$, $(20^0 1)$, $(12^0 1)$, $(04^0 1)$, $(21^1 1)$, $(13^1 1)$, $(05^1 1)$, $(30^0 1)$, $(22^0 1)$, $(14^0 1)$, $(06^0 1)$, $(31^1 1)$, $(23^1 1)$, $(15^1 1)$, $(07^1 1)$, $(32^0 1)$, $(24^0 1)$. Обнаружено, что некоторые уровни, отстоящие на 100 см^{-1} и даже 200 см^{-1} , взаимодействуют сильнее, чем отстоящие на $30\text{—}40\text{ см}^{-1}$. Параметры теории возмущений требуется вычислять для каждого частного случая. Вращательные постоянные для каждого уровня нужно вычислять только с учетом поправки на возмущение.

И. Милевская

1962

11-8354-12
100-7538-12

ж. 1964.14

ВФ-406-IV

1962

Расчет
силовых
констант

15 Б82. Физическое значение потенциальных констант ангармоничности для трехатомных молекул. Kuchitsu Kozo, Iijima Takao, Morino Yonezo. Physical significance of anharmonic potential constants for triatomic molecules. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962». S. 1., s. a., C308/1—C308/4 (англ.)

CO₂

Метод, предложенный ранее (РЖХим, 1963, 3Б74), применен для расчета констант ангармоничности третьего и четвертого порядка линейных и нелинейных трехатомных молекул. Для молекул CO₂, CS₂, OCS, NNO, DCN, HCN, H₂O, D₂O, H₂S, D₂S приведены вычисленные значения констант K_{ijk} , K_{ijkl} , α_i , x_{ij} которые в большинстве случаев удовлетворительно согласуются с эксперим. данными.

А. Александров

Х. 1963. IV

X. 1963. IV



Chem. no. 1,
345-123-1
- physical
chem.

CO₂

Bsp-406-IV

1962

Physical significance of anharmonic potential constants for triatomic molecules. Kozo Kuchitsu, Takao Iijima, and Yonezo Morino (Univ. Tokyo). *Proc. Intern. Symp. Mol. Struct. Spectry., Tokyo 1962*, (C308), 4 pp. Cubic and quartic potential consts. and spectroscopic consts. α and x , were calcd. for

triat. mols. of the linear XY_2 , XYZ , and nonlinear XY_2 types. Values were calcd. for CO₂, CS₂, OCS, NNO, HCN, DCN, H₂O, D₂O, H₂S, and D₂S and compare generally in sign and magnitude with these observed.

D. A. Shields

+ 100
Ha 123-4

C. A. 1964 of N7 784/b.



1962

Cuierup
Beneper
(CO₂)

Photometry of the infrared spectrum of Venus, 1-2.5 μ .
 Gerard P. Kuiper (Univ. of Arizona, Tucson). *Mem. Soc.*
Roy. Sci. Liege 7, Fasc. Unique, 269-99(1962)(Pub. 1963).
 Beyond the photographic range in the spectrum of Venus, 40
 absorption bands were identified as ¹²CO₂, ¹³CO₂, and ¹²C¹⁸O¹⁶O.
 Evidence for CO and H₂O crystals is lacking. A table lists CO₂
 bands observed on Venus and in the lab. spectra. It includes
 so-called hot bands, i.e., those arising from higher levels, which
 may lead to a detn. of atm. temp. H. K. Kiess

C.A. 1964. 60.4
 3614 d

1962

CO₂

Mould H.M., Price W.C., Wilkinson G.F.

Advances.Molec.Spectrosc.Vol.3, 1962

ИК-излучение газов, возбужденное посредством радиочастотного разряда,

см № 3

9811

-10

1962

H₂CO

(mol.post., vi)

Parkin J.E., Poole H.G.,
Raynes W.T.

Proc.Chem.Soc., 1962, July, 248-249

Inversion ...

J

CO₂

1962

6 Д191. Полосы поглощения двуокиси углерода в области 2,8—4,2 μ . Plyler Earle K., Tidwell Eugene D., Benedict W. S. Absorption bands of carbon dioxide from 2.8—4.2 μ . «J. Opt. Soc. America», 1962, 52, № 9, 1017—1022 (англ.)

Ряд слабых полос поглощения CO₂ в области 2,8—4,2 μ получен с помощью спектрометра высокого разрешения при длинах оптич. пути до 48 м·атм. Наиболее интенсивными являются две π — Σ -полосы 05¹0—000 и 13¹0—000 со значениями ν_0 , равными соответственно 3181,45 и 3339,34 см⁻¹. Слабая полоса 101—02⁰0 имеет значение ν_0 =2429,36 см⁻¹. Отдельные линии некоторых более слабых полос отмечены вблизи 3500 см⁻¹. Выполнен анализ вращательной структуры указанных полос и вычислены значения вращательных постоянных. Оценены значения суммарных интенсивностей наблюдаемых полос. Отмечено крайне аномальное распределение интенсивности линий в ветвях π — Σ -полос, что приписано взаимодействию Кориолиса, приводящему к смешиванию волн. ф-ций π -состояний с ф-циями ближайших Σ -состояний (02⁰1 и 101). Библ. 12 назв.

К. Василевский

17
34-440-17

ф.1963.60

CO₂

1962

7 Б102. Полосы поглощения двуокиси углерода в области 2,8—4,2 μ . Plyler Earle K., Tidwell Eugene D., Benedict W. S. Absorption bands of carbon dioxide from 2.8—4.2 μ . «J. Opt. Soc. America», 1962, 52, № 9, 1017—1022 (англ.)

Получен ИК-спектр поглощения CO₂ с разрешенной вращательной структурой в области 2385—3540 см^{-1} при комнатной т-ре. Уточнены значения вращательных постоянных для переходов 13^1_0-000 , 05^1_0-000 , $101-0,2^0_0$. В области 3500 см^{-1} обнаружена серия слабых линий, которые относятся к переходам $05^3_1-03^3_3$, $0,05^1_1-03^1_0$ и 04^0_1-100 . Приводятся данные по интенсивности полос и моментам перехода. Наблюдаемое в слабых ($\pi - \Sigma$)-перпендикулярных полосах аномальное распределение интенсивности объясняется корриolisовым взаимодействием между ν_2 и ν_3 . А. А.

X. 1963. 7

CO₂

1962

Absorption bands of carbon dioxide, 2.8-4.2 μ . Earle, K. Plyler, Eugene D. Tidwell, and W. S. Benedict (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Opt. Soc. Am.* 52, 1017-22 (1962). High-resolution data were obtained by using paths as great as 48 m.-atm. Band consts. were detd. for the transitions 13¹0-000, 05¹0-000, 101-02⁰0, and for parts of new weak bands near 3500 cm.⁻¹ Band intensities are discussed, including the highly abnormal behavior of the weak perpendicular bands.

George M. Murphy

C. A. 1963-58-3

2026a

1962

CO₂

Spectroscopic temperature and pressure measurements in the Venus atmosphere. Hyron Spinrad (Jet Propulsion Lab., Pasadena, Calif.). *Publ. Astron. Soc. Pacific* 74, 187-202(1962). Equiv. widths were measured for all the unblended lines in the P branch of the CO₂ band at 7820 Å. in the spectrum of Venus. Analysis of these data, for a clear atm., give rotational temps. from 214 to 445°K. for the region above the reflecting layer of the atm., corresponding to pressures from 1.5 to about 5 atm. The abundance derived for CO₂ at the 7820 band is about 2 km.-atm., representing about 4% of the total atm. C. C. Kiess

C.A. 1962.57.8

9357 W

CO₂

4 Д125. Уровни колебательной энергии молекулы CO₂. Stull V. Robert, Wyatt Philip J., Plass Gilbert N. Vibrational energies of the CO₂ molecule. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 7, 1442—1445 (англ.)

На электронной счетной машине рассчитаны уровни колебательной энергии для восьми изотопов линейной трехатомной молекулы CO₂: C¹²O₂¹⁶, C¹³O₂¹⁶, C¹²O¹⁶O¹⁸, C¹²O¹⁶O¹⁷, C¹³O¹⁶O¹⁸, C¹³O¹⁶O¹⁷, C¹²O₂¹⁸ и C¹²O¹⁷O¹⁸. Для каждой из молекул вычислено по 1819 колебательных уровней. При расчетах в выражении для энергии учитывались члены разложения по колебательным квантовым числам до третьего порядка включительно, а также ферми-резонанс. Силовые константы были вычислены с помощью эксперим. данных для C¹²O₂¹⁶. Диагонализация матриц и нахождение собств. значений были проведены с высокой точностью. Полученные результаты не во всех случаях согласуются с известными в литературе расчетами. Авторы объясняют это расхождение тем, что в настоящей работе были использованы новейшие данные по C¹²O₂¹⁶. Кроме того, точность выполненных в настоящей работе расчетов, с использованием машинной техники, на два порядка выше предыдущих.

Е. Пшеничнов

фр. 1963. 49

1962

1992 9025-12

1962

CO₂

Vibrational energies of the CO₂ molecule. V. Robert Stull, Philip J. Wyatt, and Gilbert N. Plass (Ford Motor Co., Newport Beach, Calif.). *J. Chem. Phys.* 37, 1442-5(1962). The vibrational energy levels of the 8 most abundant isotopic species of CO₂ are calcd. Over 1800 energy levels are given for each isotope. The calcs. include terms to the 3rd order in the vibrational quantum nos. and take account of the Fermi resonance. The matrixes are diagonalized by an eigenvalue routine of great accuracy.

CA

139p-9025-11

C.A. 1963-53.2

940d

CO 2

13 Б116. Уровни колебательной энергии молекулы CO_2 . Stull V. Robert, Wyatt Philip J., Plass Gilbert N. Vibrational energies of the CO_2 molecule. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 7, 1442—1445 (англ.)

1962

С целью расчета колебательного спектра изотопозамещенных молекул CO_2 в интервале частот 500—10 000 cm^{-1} составлена программа вычисления на электронной счетной машине IBM-709. На первом этапе по эксперим. колебательному спектру CO_2 определяются спектроскопич. константы $\tilde{\omega}_i$, x_{ik} и y_{ikh} . Затем вычисляются отношения частот $\tilde{\omega}_i/\omega_i = q_i$ для изотопно-замещенной и обычной молекулы CO_2 по теоретич. ф-лам, после чего определяются константы ангармоничности в предположении выполнения соотношений $x_{ij} = x_{ij}q_iq_j$, $y_{ijk} = y_{ijk}q_iq_jq_k$. На втором этапе вычислений получаются колебательные уровни энергии (всего 1819 уровней для каждого из восьми изотопозамещенных молекул $\text{CO}_2^{(16,17,18)}$). На третьем этапе эти уровни используются в качестве диагональных матричных элементов при составлении энергетич. матрицы для учета ферми-резонанса. Часть резуль-

1392-9025-11
ch 61

X-1963-13

татов расчета табулирована. Отмечается, что полученные величины для колебательных уровней на порядок точнее аналогичных результатов опубликованной ранее работы (РЖХим, 1959, № 4, 10762). Е. Никитин

1962

CO₂

Rydberg absorption series of CO₂ converging to the $^2\Pi_u$ state of CO₂⁺. Y. Tanaka and M. Ogawa (L. G. Hanscom Field, Bedford, Mass.). *Can. J. Phys.* 40, 879-88(1962). The absorption spectrum of CO₂ was reinvestigated, 670-790 Å., with a 6.8-m. grazing-incidence-type vacuum spectrograph. The Henning Rydberg series was remeasured accurately along with its $v' = 1$ vibration series. In this manner, the ionization energy of the $2\sigma_u$ electron was detd. to be 18.076 e.v. Sixteen other Rydberg series were observed in this region. They are formed by the excitation of the $1\pi_u$ electron. The ionization potentials corresponding to the energies of the $^2\Pi_{u,1/2}$ and $^2\Pi_{u,1/2}$ states of CO₂⁺ were found to be 17.312 e.v. and 17.323 e.v., resp. CA

C.A. 1962. 57.7

80746

CO₂

1962

27770 RYDBERG ABSORPTION SERIES OF CO₂ CONVERGING TO THE $^2\Pi_u$ STATE OF CO₂⁺. Y. Tanaka and M. Ogawa Air Force Cambridge Research Labs., Bedford, Mass.). Can. J. Phys., 40: 879-86 (July 1962).

The absorption spectrum of CO₂ is investigated in the region 670 to 790 Å with a 6.8-meter grazing-incidence-type vacuum spectrograph. The Henning Rydberg series is measured accurately along with its $v' = 1$ vibration series. In this manner, the ionization energy of the $2\sigma_u$ electron is determined to be 18.076 ev. Sixteen other Rydberg series are observed in this region. It is concluded that they are formed by the excitation of the $1\pi_u$ electron. The ionization potentials corresponding to the energies of the $^2\Pi_{u,x}$ and $^2\Pi_{u,y}$ states of CO₂⁺ are found to be 17.312 and 17.323 ev respectively. (auth)

NSA-1962-16-20

CO₂

1962

Потенциалы
ионизации

1 Д109. Спектр поглощения серии Ридберга CO₂, сходящейся к $^2\Pi_u$ -состоянию CO₂⁺. Tanaka Y., Ogawa M. Rydberg absorption series of CO₂ converging to the $^2\Pi_u$ state of CO₂⁺. «Canad. J. Phys.», 1962, 40, № 7, 879—886 (англ.)

Повторно более точно измерен спектр поглощения CO₂ в области 670—790 Å с помощью вакуумного монохроматора с решеткой 6,8 м, 600 штрих/мм. Из измерений спектра серии Ридберга-Хеннинга установлено, что энергия ионизации $2\sigma_u$ и электрона составляет 18,076 эв. В этой же области наблюдается 16 других серий Ридберга. Показано, что они образуются при возбуждении 1 Π_u -электрона. Потенциалы ионизации, соответствующие энергии $^2\Pi_{u, 3/2}$ и $^2\Pi_{u, 1/2}$ -состояний CO₂⁺, определены в 17,312 и 17,323 эв. Ю. М.

ф. 1963. 18.

1962

CO₂

5 Б95. Ридберговские серии поглощения CO₂, сходящиеся к состоянию $^2\Pi_u$ CO₂⁺. Tanaka Y., Ogawa M. Rydberg absorption series of CO₂ converging to the $^2\Pi_u$ state of CO₂⁺. «Canad. J. Phys.», 1962, 40, № 7, 879—886 (англ.)

На приборе с большой дисперсией (0,82 А/мм) проведено исследование спектра поглощения CO₂ в области 670—790 А. По схождению колебательных полос с $v'=1$ в ридберговских сериях Хеннига определена энергия отрыва $2\sigma_u$ -электрона, составляющая 18,076 эв для состояния $^2\Sigma_u^+$ CO₂⁺. В наблюдавшемся спектре выделено еще 16 ридберговских серий, связанных с возбуждением $1\Pi_u$ электрона, энергия ионизации которого составляет 17,312 и 17,323 эв соответственно для состояний $^2\Pi_{u,3/2}$ и $^2\Pi_{u,1/2}$ CO₂⁺. А. Мальцев

X. 1964. 5

CO₂

1390 - 9145 - 12

1962

Rotational perturbations in the C¹²O₂ spectrum. E. A. Triaille and C. P. Courtoy (Centre Physique Nucl. Moleculaire, Heverle-Louvain, Belg). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles Ser. I* 76, 148-63(1962); cf. Andrade e Silva and Amat, *CA* 58, 4052g. The cor. values of the rotational consts. are given for levels susceptible of bearing this effect. Thus, the cor. consts. for the levels 30⁰1, 22⁰1, and 14⁰1 were $B = 38,784$ and $D = 8.5$, $B = 38,645$ and $D = 9.2$, and $B = 38,659$ and $D = 17$, resp. CA

C.A. 1963-58-8

7509c

$C^{12}O_2$

Вар-9145-IV

1962

спектр

V 14 B181. Вращательные возмущения в спектре $C^{12}O_2$.
Triaille E. A., Courtoy C. P. Perturbations de rotation dans les spectres de $^{12}CO_2$. «Ann. Soc. scient. Bruxelles», 1962, Sér. 1, 76, № 3, 148—163 (франц.)

Ранее предложенным методом (РЖХим, 1963, 22Б111) рассмотрены уровни вращательного спектра $C^{12}O_2$, подверженные резонансу Ферми. Вычислены матричные элементы оператора возмущения для пар, троек, четверок, пятерок и шестерок уровней, участвующих в резонансе. Уточнены значения вращательных постоянных для ряда переходов. Результаты работы могут быть использованы для систематич. изучения вращательных постоянных молекул $C^{13}O_2$ и $C^{12}O_2$.

И. Милевская



ж. 1964.14

Тв. А. А. Ахмедов, S. H. Wabnitz, 1963-64

CO₂ Моф. Physics 1963-64, № 6, 583.

N₂O Данієвський інфрачервоний спектр
COS молекулярних кристал-
лов.

Спектр спек при 77° К в тонких
линьках кристалли., с спектро-
грамм и др. (середн. метри-
факторів) { в р. не 20-400 см⁻¹
использовались монокристаллы

ные соединения в средах
нах.

7177 - IV

1963

O₂, CO, CO₂, Ar (J)

Asundi R.K., Kurepa M.V.

J. Scient. Instrum, 1963, 40, N. 4,
183-186

The calibration of the ...

J

CO₂ (A) R.K. Asund, M.D. Gagg ¹¹⁹⁶³

M.V. Kuznetsov

Proc. Phys. Soc. 82 v 6, 1967

Isotope effects on molecular
weight, O₂, CO and CO₂

III O₂⁻

CO₂ Бернштейн В.С., Diss. МВНД, 1963, 24, N 2, 532

ИК-спектр ИК-спектр CO₂, обогащенного O¹⁸,
большого разрешения

CO₂ содержание до 10 ат. % O¹⁸ Спектр снимался в обл. 5400-1620 см⁻¹

C¹²O¹⁶O¹⁸ $\tilde{\nu}_2, 2049,68; \tilde{\nu}_3, 2332,16; 2\nu_1, 2500,73;$
 $\nu_1 + 2\nu_2, 2614,20; 4\nu_2, 2757,14;$
 $2\nu_3, 4639,48$

C¹²O¹⁸₂: $\nu_1 + \nu_3, 3525,23, 2\nu_1 + \nu_3, 4721,90$

C¹³O¹⁶O¹⁸: $\nu_3, 2265,99$

C¹³O¹⁸₂: $\nu_3, 2247,30$

Dissertation
Abstracts

CO₂

Смелов

Berney c. v.

1963

Thesis Seattle, Univ. of
Washington, 1962, 92 pp.
NSA. 1963, 17 ('22), ref. 37246.

Высоко разрешенной смесью
CO₂ обогащенного O¹⁸.

CO₂

1963

U.K. Cnerkup

The high-resolution infrared spectrum of ¹⁸O-enriched CO₂.
Charles Victor Berney (Univ. of Washington, Seattle). *Univ.*
Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 63-3103, 92 pp.;
Dissertation Abstr. 24, 532(1963). SNDC

C.A. 1964. 60.4
362/ed

Спектр
помощи
мн.

Cook G.R., Metzger P.H.

1963

Sympos. Ideas. Street. and
Spectrosc., Columbus, 1963.
Columbus, Ohio, S.A., 74-5.

фотонизация и спектр
помощи CO и CO₂ в
вакуумной УФ - области
спектра (см. CO)

B90 - 7596 - IV

1963

CO₂

7 Б183. Слабая атмосферная полоса двуокиси углерода. Diaz F. A. A weak telluric band of carbon dioxide. «J. Opt. Soc. America», 1963, 53, № 1, 203 (англ.)

Слабая атмосферная полоса поглощения в области 2,16 μ отнесена к обертону $2\nu_3$ молекулы $C^{12}O^{16}O^{18}$. Для окончательной идентификации этой полосы был снят спектр поглощения CO_2 на спектрометре с дифракционной решеткой и многоходовой кюветой. По 21 измеренной линии определены молекулярные постоянные (в cm^{-1}): $\nu_0 = 4639,530 \pm 0,003$; $B'' = 0,36834 \pm 0,00011$; $B' - B'' = -0,005902 \pm 0,000008$ и $D'' = 1,15 \cdot 10^{-7} \pm 0,03$, которые хорошо согласуются с расчетом и подтверждают правильность отнесения.

А. Мальцев

X. 1964. 7

¹²
C¹⁶
O¹⁸
O

BoP-7596-1V

1963

A weak telluric band of carbon dioxide. F. A. Diaz (Pennsylvania State Univ., University Park). *J. Opt. Soc. Am.* 53, 203(1963). A weak telluric absorption band, having the approx. rotational spacing of N₂O, was observed at 2.16 μ by using the sun as a light source. This band is assigned to the 2 ν_3 band of C¹²O¹⁶O¹⁸. This assignment was confirmed by lab. measurements on 150 m.-atm. of normal CO₂. Calcd. and observed frequencies of *R* and *P* lines from *J* = 7 to *J* = 23 are tabulated. The mol. consts. obtained are: $\nu_0 = 4639.530 \pm 0.003$ cm.⁻¹, $B'' = 0.36834 \pm 0.00011$ cm.⁻¹, $B' - B'' = -0.005902 \pm 0.000008$ cm.⁻¹, $D' - D'' \cong 0$. L. C. Thomas

C.A. 1963. 58.8

4505a

CO₂

спектр.
строение

24 Б102. Полосы пламени окиси углерода. Dixon R. N. Carbon monoxide flame bands. «Disc. Faraday Soc.», 1963, № 35, 105—112 (англ.)

Исследуется спектр послесвечения тлеющего разряда в углекислом газе при давл. 1—5 мм рт. ст. Спектр фотографировался на дифракционном спектрографе с высокой разрешающей силой при ширине щели 35 м с длительностью экспозиции до 5 дней. Спектр совпадает с известными полосами пламени окиси углерода, которые приписываются испусканию возбужденного CO₂, получающегося в элементарной р-ции $\text{CO}({}^1\Sigma^+) + \text{O}({}^3P) + \text{M} \rightarrow \text{CO}_2^* + \text{M}$. Обнаружены две серии полос в области λ 3100 и 3900 Å. На основе расчета возможных энергетич. уровней молекулы CO₂, проведенного с помощью электронной вычислительной машины, спектр приписывается переходу возбужденной изогнутой молекулы CO₂(¹B₂) на верхние колебательные уровни основного состояния с линейным расположением атомов (нет спектра поглощения до λ 2500 Å). Энергия состояния ¹B₂ относительно наименьшего основного состояния составляет 46 700 см⁻¹, угол между атомами 123±3°. В. Басевич

1963

CO₂ - 4803

Х. 1964. 24

CO₂

спектр

IV-M-23

10 B95. Полосы пламени окиси углерода. Di-
xon R. N. The carbon monoxide flame bands. «Proc. Roy.
Soc.», 1963, A275, № 1362, 431—446 (англ.)

Полосы пламени окиси углерода получены в установке для наблюдения послесвечения. (CO₂ пропусклся через разрядную трубку). Сложную структуру в области 3100—3800 Å оказалось возможным интерпретировать на основе сравнения с расчетными положениями полос, найденными в соответствии с идентификацией Гейдона: верхнее состояние принадлежит изогнутой, нижнее основное — линейной молекуле CO₂. На основе дальнейшего колебательного и вращательного анализа и сравнения с данными других работ заключается, что испускание происходит при переходе в основное состояние $1\Sigma_g^+$ с нижнего колебательного уровня и с уровня $V_2^1=1$ состояния $1B_2$ с высотой $\sim 46000 \text{ см}^{-1}$, углом OCO $122 \pm 2^\circ$ и длиной связи CO $1,246 \pm 0,007 \text{ Å}$. Отмечается существенное влияние резонанса Ферми в состоянии $1\Sigma_g^+$. Наблюдаемые в испускании полосы ставятся также в связь со слабыми полосами поглощения CO₂ при 1475 Å. В. Сошников

1963

2.1965.10

CO₂

BD-7578-IV | 1963

(7)

Delwiche J.

Bull. Soc. roy. sci.
Liege, 1963, 32,
N 11-12, 854-62

CO₂

1963

Eggers A.F.

U.K.
Chem.

Dissertation: abstracts, 1963,
24 (2), 532.

The High-Resolution infra-
red spectrum of O¹⁸-en-
riched CO₂.

1963

CO₂

Gebbie H.A, Stone N.W.B.

и.к. селу

Proc. Phys. Soc., 82, N4, 543

смабозо

CO₂

зага

Возмущение нормального, обусловленное
сфокусированием, 1 газовой и.к. впадин

возмущение в 5н. 20-110 см⁻¹



CO_2

Гранер Ч.

1963

Spectrochim. acta, 19, n/2,

2113.

структура

Определение молеку-
лярной структуры на
основе значений враща-
тельных постоянных
(см. HCN)

1963

9795 - IV

CO₂

(*Apcunai. nocu.*)

Heill H.W.

Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc.,
Columbus, 1963, "Columbus, Ohio,
s.a. 53

Line inversion in the ...

J

CO₂

1-8348-12
рор

7 Б170. Полосы поглощения двуокиси углерода в диапазоне от 5,3 до 4,6 μ . Maki Arthur G., Plyler Earle K., Thibault Robert J. Absorption bands of carbon dioxide from 5.3 to 4.6 microns. «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1963, A67, № 3, 219—223 (англ.)

1963

С помощью ИК-спектрометра высокого разрешения измерены частоты линий в спектре поглощения CO₂ от 1850 до 2150 см^{-1} . Большая часть измерений сделана для слоя 24 м и давлений $< 1 \text{ атм}$, хотя при поисках слабых линий давление повышалось до 3 атм. Для достижения наибольшего разрешения в сильной Q-ветви использовались слои 4 м, что позволило уменьшить потери при отражении в многоходовой кювете. Среднеквадратичная дисперсия результатов измерений составляет в разных случаях от 0,003 до 0,006 см^{-1} . Получены вращательно-колебательные константы для переходов $11^{1c} 0-000$, $11^{1d} 0-000$, $03^{1c} 0-000$, $03^{1d} 0-000$, $200-01^{1c} 0$, $12^{2c} 0-01^{1c} 0$, $12^{2d} 0-01^{1d} 0$ молекулы C¹²O₂, а также $11^{1c} 0-000$ молекулы C¹³O₂. В. Дианов-Клоков

X. 1964. 7

1963

Bop - 8348 - 1V

CO₂

Creep

Absorption bands of carbon dioxide from 5.3 to 4.6 μ . Arthur G. Maki, Earle K. Plyler, and Robert J. Thibault. *J. Res. Natl. Bur. Std. A67*, 219-23(1963).— Measurements at pressures and path lengths up to a max. of 72 m.-atm. were made of the frequencies of the infrared absorption lines of C¹²O₂ and C¹³O₂ in the region 1850–2150 cm.⁻¹ The following vibration-rotation consts. were obtained (transition, ν_0 (cm.⁻¹), B' (cm.⁻¹), $D' \times 10^8$ (cm.⁻¹)): C¹²O₂, 1200–01^{1c}0, 2129.769, 0.39058₇, —; 12^{2c}0–01^{1c}0, 2093.356, 0.39151₂, —; 03^{1c}0–000, 1932.477, 0.39072₃, 14.6; 03^{1d}0–000, 1932.477, —; 11^{1c}0–000, 2076.890, 0.39037₇, 12.8; 11^{1d}0–000, 2076.890, 0.39131₁, —; C¹³O₂, 11^{1c}0–000, 2037.093, 0.39004₄, 12.3.

Walter J. Lafferty

C.A. 1963-59-5

4676c

CO₂

микро

Вор - 8348 - IV

1963

J 4 Д235. Полосы поглощения двуокиси углерода в области 5,3—4,6 μ . Maki Arthur G., Plyler Earle K., Thibault Robert J. Absorption bands of carbon dioxide from 5.3 to 4.6 microns. «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1963, A67, № 3, 219—223 (англ.)

В области 1850—2150 см^{-1} исследованы полосы поглощения молекулы CO_2 , полученные при различных давлениях и длинах пути с помощью спектрометра высокого разрешения. Измерены частоты линий и определены значения постоянных ν_0 , B'' , B' , D'' , D' , ΔB и ΔD для $11^{1c}0-000$ -, $11^{1d}0-000$ -, $03^{1c}0-000$ -, $03^{1d}0-000$ -, $200-01^{1c}0$ -, $12^{2c}0-01^{1c}0$ -, $12^{2d}0-01^{1d}0$ -полос для C^{12}O_2 - и $11^{1c}0-000$ -полосы C^{13}O_2 . Полученные результаты сопоставлены с данными других исследователей. Библ. 14 назв. К. Василевский

Ф. 1964. 48

1963

27361

ABSORPTION BANDS OF CARBON DIOXIDE
FROM 5.3 TO 4.6 MICRONS. Arthur G. Maki, Earle K.
Plyler, and Robert J. Thibault. J. Res. Natl. Bur. Std.,
67A: 219-23(May-June 1963).

Measurements were made of the frequencies of the in-
frared absorption lines of CO_2 in the region from 1850 cm^{-1}
to 2150 cm^{-1} . Observations were made at various pres-
sures and pathlengths up to a maximum of 72 meter-
atmospheres. Vibration-rotation constants were obtained
characterizing the transitions $11^{1\text{c}}0-000$, $11^{1\text{d}}0-000$, $03^{1\text{c}}0-000$, $03^{1\text{d}}0-000$, $200-01^{1\text{c}}0$, $12^{2\text{c}}0-01^{1\text{c}}0$, $12^{2\text{d}}0-01^{1\text{d}}0$ for C^{12}O_2 . The $11^{1\text{c}}0-000$ band due to the C^{13}O_2 molecule was
also measured. (auth)

NSA-1963-17-16

1963

CO₂температура
способностей

Infrared emissivity of carbon dioxide (4.3- μ band). W. Malkmus (Gen. Dynamics/Astronautics, San Diego, Calif.). *J. Opt. Soc. Am.* 53(8), 951-61(1963). A simplified analysis to predict emissivities of the CO₂ 4.3- μ band employed an oscillator model assumed harmonic for computing band intensities, and anharmonic for the spectral distribution of the emitted radiation. Calcd. values of $\bar{S}/d$, and $2\alpha_0^{1/2}\bar{S}^{1/2}/d$ were given for 300-3000°K. Emissivities were calcd. for pure Doppler line shape for 300-1500°K. The results were in good agreement with published exptl. data, and in disagreement with other theoretical calcs.

William T. Anderson, Jr.

C.A. 1963 · 59 · 8

8266c

1963

 CO_2

McLean A.D.

monomer.

dimer.

J. Chem. Phys., 1963, 38, 1347 (nº 6)

Extended basis-set LCSTO-40-
-SCF calculations on the ground
state of carbon dioxide.

IV-8330

Vol. (21)

1963

Laddon Robert E. A high-resolution study of CO_2 absorption spectra between 15 and 18 microns. "J. Chem. Phys.", 1961, 35, # 6, 2083-2097 (Amu.)

24 1963, 12 1963

10

1963

CO₂

2 Д192. Линейная инверсия спектров испускания двуокиси углерода. Neill Howard W. Line inversion in the emission spectrum of carbon dioxide. Abstract. «Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc, Columbus, 1963». Columbus, Ohio, s. a., 53 (англ.)

Получен спектр горячих газов высокотемпературного пламени горения углеводородов в области 4 μ . Исследована вращательная структура полос «горячей» углекислоты. Предложено использовать структуру эмиссионных полос CO₂ при 4 μ для определения разрешающей способности монохроматоров в этой области. Д. Г.

ф. 1965. 28

1963

 CO_2
 ν_3

Statistical model applied to the region of the ν_3 fundamental of CO_2 at 1200°K. U. P. Oppenheim and Y. Ben-Aryeh (Technion-Israel Inst. Tech., Haifa). *J. Opt. Soc. Am.* 53, 344-50 (1963). A method is described whereby the observed emissivity of a statistical band is correlated with the exptl. parameters of CO_2 . The method is applied to the 4.3- μ bands of CO_2 at 1200°K. The model predicted the emissivity correctly over wide ranges of pressure and optical path. B. E. Hankins

C.A. 1963.58.11
10860 de

IV-449

1963

CO₂ (1)

Flyler Lerle A., Nicell Eugene S.,
Benedict A.B.

Absorption bands of carbon dioxide
from 2.8-4.2 . "J. Opt. Soc. America",
1962, 52, 1, 9, 1017-1022 (Am.)

11., 1963, 7, 6102

CO₂ open

CO₂

Вар-10211-1V

1963

6 Б81. Вращательные спектры комбинационного рассеяния. I. Двуокись углерода CO₂. Тюлин В. И., Татевский В. М. «Оптика и спектроскопия», 1963, 15, № 1, 38—41

В качестве примера использования сконструированной авторами многоходовой кюветы для получения спектров комб. расс. на приборе высокой разрешающей силы (ДФС-3) исследован чисто вращательный спектр комб. расс. CO₂. Вычисленные значения B_0 и D_1 находятся в хорошем согласии с литературными данными. А. Бобров

X.1964.6

1963

В90-10211-IV

CO₂
Синтез

V4 Д236. Вращательные спектры комбинационного рассеяния. I. Двуокись углерода CO₂. Тюлин В. И., Татевский В. М. «Оптика и спектроскопия», 1963, 15, № 1, 38—41

Получены спектры комб. рас. CO₂ в газообразном состоянии на приборе ДФС-3 в первом порядке с линейной дисперсией 10 см⁻¹/мм при возбуждении ртутной лампой с $\lambda=4358$ Å. Определены вращательные постоянные B_0 и D_0 по методу наименьших квадратов, хорошо совпадающие с литературными данными. Библ. 15 назв.

ф. 1964. 42

1961

CO₂
Cheng

Rotational Raman spectra. I. Carbon dioxide. V. I. Tyulin and V. M. Tatevskii. *Optika i Spektroskopiya* 15(1), 38-41(1963). A method is described for the investigation of the rotational structure of vibrational bands, i.e., of the rotational-vibrational interaction, particularly for mols. without a dipole moment. As excitation source were used 2 Hg lamps (λ 4358 Å.) having a discharge distance of about 2 m. and a working current of 25-7 amp. (*ibid.* 14(4), 582-5). Both lamps were located inside a reflector coated with MgO. A multi-channel cell (rated at 10 atm. pressure) with 4 mirrors in coaxial arrangement (Stoicheff, *Usp. Spektroskopii*, Moscow 1963, p. 115) had a vol. of 5 l. The focal length of the mirrors was 2 m., diam. 40 mm., and the reflection coeff. for the 4358-Å. line was 97-8%. The spectra of CO₂, kept in the cell at 3.5 atm., were photographed on orthochromatic plates (Raman-Platten Agfa) with exposure time 2.5-10 hrs. The linear dispersion of the spectrograph was 10 and 4.6 cm.⁻¹/mm. with the max. of the reflection lying in the 6800-Å. region. Based on the obtained spectrum, the rotational consts. of CO₂ were: $B_0 = 0.3901 \pm 1.5 \times 10^{-4}$ cm.⁻¹ and $D_0 = (10 \pm 1.5) \times 10^8$ cm.⁻¹ A. P. Kotloby

C.A. 1963-50.9
9482a

Bop-10211-IV

0530p

9209-IV

1963

(by aus. nom.

) - H_2 , HCl , HBr , CO ,

CO_2 , CH_4 , H_2O u gp.

Voder B., Va H. —

J. Quant. Spectrosc. and Radiat.
Transfer, 1963, 3, 4, 397-435

Intensities absolues des transitions

...

1p., 1964, 30163

CO₂
спектр

IV-95-41

ж. 1965. 11

1964.

11 Б184. Инфракрасный спектр двуокиси углерода, обогащенного кислородом-18. Berney Charles V., Eggers David F., Jr. Infrared spectrum of carbon dioxide, enriched in oxygen-18. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 4, 990—1000 (англ.)

Инфракрасный спектр CO₂, обогащенной на 10% O¹⁸, изучен в области 1620—5400 см⁻¹ с помощью решеточного спектрометра Эберта со спектральными ширинами щели 0,2—0,4 см⁻¹. Десять ранее не сообщавшихся полос: 2049,68; 2232,16; 2500,73; 2614,20; 2757,14; 4639,48; 3525,23; 4721,90; 2265,98; 2247,30 см⁻¹ — были анализированы и отнесены к различным замещениям O¹⁸ в CO₂. Произведен расчет вращательных постоянных B' , B'' , D' и D'' и положения центров полос. Аномально высокие значения постоянной Ферми W_0' , примененные для расчета положения полос C¹²O¹⁶O¹⁸ и C¹³O¹⁶O¹⁸, подтверждены выделением новых полос ферми-резонанса 3525,23 и 4721,90 см⁻¹. Эти полосы отнесены к молекуле C¹²O₂¹⁸, а их положение показывает, что W_0' для этой молекулы больше, чем W_0' для C¹²O¹⁶O¹⁸. Резо-

нанское взаимодействие, найденное в $\text{C}^{12}\text{O}^{16}\text{O}^{18}$, зависит от потенциальной постоянной k_{113} , которая для симметричных молекул равна нулю.

Л. Комарова

1964

CO₂

ИК-спектр

14-9541

V 1 Д138. ИК-спектр CO₂, обогащенного O¹⁸. Ber-
ney Charles V., Eggers David F., Jr. Infrared
 spectrum of carbon dioxide, enriched in oxygen-18. «J.
 Chem. Phys.», 1964, 40, № 4, 990—1000 (англ.)

Получен ИК-спектр CO₂, обогащенного ~10 ат. % O¹⁸ в области 1620—5400 см⁻¹ с помощью спектрометра с решеткой со спектральной шириной щели 0,2—0,4 см⁻¹. Наблюдены 10 новых полос, отождествленных с различными типами изотопного замещения CO₂. Подтверждены результаты Куртуа (Courtoy G. P. «Ann. Soc. scient. Bruxelles», Sér. I, 1959, 73, 5), для C¹²O¹⁶O¹⁸ в области 2 м. Неожиданно высокая величина константы резонанса Ферми для этого соединения по Куртуа подтверждена разрешением ранее не наблюдаемых полос с резонансом Ферми. Из положения двух полос, отождествленных с C¹²O₂¹⁸, следует, что константа резонанса для этого соединения более высока. Обнаружено, что резонансное взаимодействие в C¹²O¹⁶O¹⁸ зависит от потенц. константы k_{113} . Библ. 14 назв.

ф. 1965. 12

1964

12079 INFRARED SPECTRUM OF CARBON DIOXIDE, ENRICHED IN OXYGEN-18. Charles V. Berney and David F. Eggers, Jr. (Univ. of Washington, Seattle). J. Chem. Phys., 40: 990-1000 (Feb. 15, 1964).

The infrared spectrum of a sample of carbon dioxide enriched to about 10 at. % with O^{18} was examined in the region $1620-5400\text{ cm}^{-1}$, using an Ebert grating spectrometer with spectral slitwidths ranging from 0.2 to 0.4 cm^{-1} . Ten previously unreported bands were analyzed and assigned to various species of O^{18} substituted carbon dioxide and Courtoy's results for $C^{12}O^{16}O^{18}$ in the $2\text{-}\mu$ region were confirmed. Courtoy's unexpectedly high value for the Fermi resonance constant of this species was confirmed by the separation of previously unreported Fermi-resonant bands. The positions of the two bands assigned to $C^{12}O_2^{18}$ suggest that the resonance constant for this species is larger still. A resonance interaction was found in $C^{12}O^{16}O^{18}$, dependent on the potential constant k_{113} . (auth)

 CO_2

UK energy

NSA-1964-18-8

CO₂¹⁸

checkup

1964

Infrared spectrum of carbon dioxide, enriched in oxygen-18. Charles V. Berney and David F. Eggers, Jr. (Univ. of Washington, Seattle). *J. Chem. Phys.* 40(4), 990-1000(1964). The infrared spectrum of CO₂ enriched to ~10 at. % with ¹⁸O was examd., 1620-5400 cm.⁻¹ Ten previously unreported bands were analyzed and assigned to various species of ¹⁸O substituted CO₂ and Courtoy's results (CA 53, 15763a) for ¹²C¹⁶O¹⁸O in the 2-μ region were confirmed. Courtoy's unexpectedly high value for the Fermi resonance const. of this species was confirmed by the sepn. of previously unreported Fermi-resonant bands. The positions of the 2 bands assigned to ¹²C¹⁸O suggest that the resonance const. for this species is larger still. A resonance interaction was found in ¹²C¹⁶O¹⁸O, dependent on the potential const. k_{113} .

RCJQ

C.A. 1964. 60.6
6347 fg

CO₂

IV-9583

196

вращат.
постоян-
ные

VI Д55. Исправленные значения вращательных постоянных $^{12}\text{CO}_2$ и $^{13}\text{CO}_2$. Courttoy C. P. Valeurs corrigées pour les constantes de rotation de $^{12}\text{CO}_2$ et $^{13}\text{CO}_2$. Résumé. «Mém. Soc. roy. sci. Liège», 1964, 9, 54 (франц.).

На основании исправленных опытных значений вращательной постоянной В молекул $^{12}\text{CO}_2$ и $^{13}\text{CO}_2$ в их различных колебательных состояниях определены наиболее удовлетворительные численные значения постоянных, определяющих зависимость В от колебательных квантовых чисел.

ф. 1965. 128

¹² ¹⁸
CO₂
19936 · A STUDY OF THE HIGH-RESOLUTION INFRARED ADSORPTION SPECTRUM OF C¹²O₂¹⁸ BETWEEN 1800 AND 5000 CM⁻¹. Charles Chackerian, Jr. Thesis, Seattle, Univ. of Washington, 1964. 103p.

A sample of carbon dioxide ninety-five per cent of which is C¹²O₂¹⁸ was prepared, and a number of vibration-rotation infrared absorption bands of this molecule was measured using a 1.5-meter Ebert spectrometer in the region between 1800 and 5000 cm⁻¹. Quadratic and cubic vibrational anharmonicity constants calculated from the corresponding constants in normal carbon dioxide via simple isotopic substitution rules were used to calculate vibrational band centers, and the agreement with experimentally determined band centers is good. A set of Fermi resonance parameters was determined to fit the seven bands involved in Fermi resonance, which have been observed ($\lambda_1 = 0.05$ cm⁻¹, $\lambda_2 = 0.39$ cm⁻¹, $\lambda_3 = 0.72$ cm⁻¹, and $W_e = 54.64$ cm⁻¹), and the anomalous increase in the Fermi resonance interaction in going from ¹²C¹⁶O₂ to ¹²C¹⁶O¹⁸O (Courtoy, Ann.

NSA. 1965. 19. 11

Soc. Sci. Bruxelles, 73: 1959) is seen to be extended in going from $^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ to $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$. The constants α_1 , α_2 , and α_3 , which are necessary to calculate the rotational constant in a state other than the ground vibrational state, were determined for $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$: $\alpha_1 = 91 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$, $\alpha_2 = -61 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$, $\alpha_3 = 273 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$, and also α_3 for $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2 = 261 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$. (Dissertation Abstr., 25: No. 5, Nov. 1964)

1964

9 Д187 Д. Исследование ИК-спектров высокого разрешения $C^{12}O_2^{18}$ в области $1800-5000\text{ см}^{-1}$. Chacke-
gian Charles, Jr. A study of the high-resolution
infrared absorption spectrum of $C^{12}O_2^{18}$ between 1800 and
5000 см^{-1} . Doct. diss. Univ. Washington, 1964, 103 pp.
Ref. «Dissert. Abstrs», 1964, 25, № 5, 2775 (англ.)

ИК -
спектр

При помощи 1,5-м спектрометра Эберта изучены
ИК-спектры поглощения CO_2 (I) с содержанием $C^{12}O_2^{18}$
(II) до 95% в области $1800-5000\text{ см}^{-1}$. Из значений
констант ангармоничности I подсчитано положение
центров колебательных полос II; результаты расчета
хорошо совпали с экспериментом. Определены парамет-
ры резонанса Ферми для 7 линий. Показано аномаль-
ное возрастание взаимодействия Ферми при переходе
от I к II. Для II определены константы α_1 , α_2 , и α_3 ,
равные соответственно 91, -61 и $273 \cdot 10^{-5}\text{ см}^{-1}$.

ф. 1265. 9Д

CO₂

1964

U.K. Chackerian

A study of the high-resolution infrared absorption spectrum of $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ between 1800 and 5000 cm^{-1} Charles Chackerian, Jr. (Univ. of Washington, Seattle). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), Order No. 64-11,163, 103 pp.; *Dissertation Abstr.* 25 (5), 2775(1964)(Eng). SNDC

112-95-42

C.A. 1965. 62.7
7254e

CO₂

Drowart y.

Оттиск

81

пот. появ.

1964

CO₂

20 Б103. Сравнение поглощения для полос CO₂ около 9,4 и 10,4 μ . Edwards D. K., Sun W. Correlations for absorption by the 9.4- μ and 10.4- μ CO₂ bands. «Appl. Optics», 1964, 3, № 12, 1501—1502 (англ.)

С помощью методики, разработанной авторами на основании предположенной произвольной экспоненциальной модели (РЖХим, 1965, 12Б98), произведено сопоставление интегральных интенсивностей комбинационных полос CO около 9,4 и 10,4 μ при различных т-рах (294—1390° K), давлениях (1—10 атм) и кол-вах на пути луча.

М. Киселева

X. 1965. 20

1964

CO₂

Д219. Сравнение поглощения для полос CO₂ около 9,4 и 10,4 м. Edwards D. K., Sun W. Correlations for absorption by the 9.4-μ and 10.4-μ CO₂ bands. «Appl. Optics», 1964, 3, № 12, 1501—1502 (англ.)

С помощью методики, разработанной авторами на основании предложенной «произвольной экспоненц. модели» (РЖФиз, 1965, 2Д300), произведено сопоставление интегр. интенсивностей комбинационных полос CO около 9,4 и 10,4 м при различных т-рах (294—1390° K), различных давлениях (1—10 атм.) и различных количествах в-ва на пути луча. М. Киселева

ф. 1965. 88

1964

CO₂

излуч.

спектр.

3 Д209. Спектральная излучательная способность и интегральная интенсивность полосы CO₂ около 2,7 м в области температур 1200—1800° К. Ferriso C. C., Ludwig C. B. Spectral emissivities and integrated intensities of the 2.7-μ CO₂ band between 1200° and 1800° K. «J. Opt. Soc. America», 1964, 54, № 5, 657—662 (англ.)

Для комбинационных полос $2\nu_2 + \nu_3$ и $\nu_3 + \nu_1$ CO₂ (3100—3800 см) измерена спектральная излучательная способность при т-рах 1200, 1500 и 1800° К. Излучение однородной по составу, т-ре и давлению (1 атм) газовой струи, полученной от спец. горелки, сравнивалось с излучением черного тела. Т-ра газа определялась методом поглощения и испускания с использованием полос 2,7 и 4,3 м. Исследована зависимость оптич. толщи газа от т-ры струи. По измеренным данным вычислены интегр. интенсивности полосы 2,7 м для разных т-р. Результаты сравнены с данными других авторов. Библ. 19 назв. М. Киселева

ф. 1965. 3Д

CO_2

Черновские Я. И.,
Орлова И. И.

1964

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

Определение
концентрации -
 N_2O , CO и

вероятности
ного излучения
 CO_2 (см. N_2O)

CO_2

Kant A., Strauss B. 1964

(D_g) J. Chem. Phys., 41, 3806 (n 12).

Жерни диссоциируе двух-
атомных молекул. переход
ных элементов. II Ti, Cr,
Mn и Co.

(см. Ti_2)

CO₂

Legay F.

1944

Z. Phys. (France), 25, 999.

Luminescence, infrarouge des
gaz excités par l'azote ac-
tive. II. Anhydride carbo-
nique.

CO₂ +

1964

Bo₂

(ecology. novm.)

CO₂

John J. W. C.

Canad. J. Phys., 1964, 42, n 5, 1004-1007
[copy]

A new assignment of some
CO₂ + lands.

Proc. Roy. Soc., 1965, 1038

W

+1

1964

CO₂

инфракрасной

спектральной

3 Д208. ИК-излучательная способность углекислого газа (полоса 2,7 μ). Malkmus W. Infrared emissivity of carbon dioxide (2,7- μ band). «J. Opt. Soc. America». 1964, 54, № 6, 751—758 (англ.)

Выполнены расчеты спектральной излучательной способности CO₂ в полосе 2,7 μ при различных т-рах от 300 до 3000° К. Для расчета спектральной поглотительной способности использованы отношения средних интенсивностей и средних полуширин линий к расстоянию между линиями, определенные как ф-ции длины волны и т-ры. Расчеты выполнены в приближениях полос со слабыми и сильными линиями и полос с линиями чисто доплеровской формы. Показано, что спектральная излучательная способность CO₂ у 2,7 μ , вычисленная в приближении полосы со слабыми линиями, хорошо совпадает с эксперим. данными для т-р 1200 и 1500° К. Хорошее согласие с эксперим. данными получено также для вычисленной интегр. интенсивности полосы в области т-р 300—3000° К.

К. Василевский

фр. 1965. зя

CO₂

(A.P.)

130 - 8515 - 15 | 1964

Newton A.S.,
Sciamaia A. F.

J. Chem. Phys., 1964,
40 (3), 718-23

1964

CO₂

Patel C. K. N.

Mys. Rev. 136, A1187 (1964)

Continuous-wave laser action on vibrational-rotational transitions of CO₂.

1964

CO₂

Penner S. S., Varanasi P.

J. Quant. Spectr. and Radiat.
Transfer 4, 799 (1964)

Approximate band absorption
and total emissivity calcu-
lations for CO₂.

CS_2

CO_2

W. B. Person and L. C. Hall 1964

Spectr. Acta 1964 V20 pp. 771-779 (25)

Атомная поглощаемость и спектр
ИК-спектр CS_2 . Измерения
сделаны CO_2 и CS_2 .



Интенсивность ИК-спектра CS_2 в газовой фазе
 низкого давления была измерена.
 Моменты диполя $\Sigma \mu (= d\mu/dz = 5.6 \text{ D/A and } \mu = 0.60 \text{ D})$
 (ν_3 при 1520 cm^{-1})

ν_3 газ 1523 cm^{-1}
 μ 1510

ν_2 ? 396
 μ 392

Значения

	CO_2	CS_2
$\mu(\text{D})$	1.33	0.60
$M/2(\text{D/A})$	1.15	0.39
$\Sigma(\text{D/A})$	6.0	5.6
M	4.9	5.2

CO₂

Pinter F

1964

Opt. Spectry, 17, 428.

Dependence of the width of
the rotational Raman
lines of N₂ and CO₂ on the
quantum number j .



CO₂

Rasool S. T.

1964

Mém. Soc. Roy. Sci. Liège, 9,
55.

Intensities of 9.4 μ and
10.4 μ CO₂ bands.

CO₂

Stull V. R., Wyatt P. J., 1964
Plass G. N.

Appl. Optics, 3, 243-254.

The infrared transmittance
of carbon dioxide.

1964

CO_2 293

Sulzmann K G B

J. Quant Sp Rad 12 4(1964)375(3)

сп. спектр
многоточечных
полос

Спектральные исследования

CO_2 в районе $4,25 \mu$ в

высокотемпературной газовой среде

спектр исп.
горячих газов

CO₂

Warneck P.

1964

J. Chem. Phys., 41, 3435

Reactions of $\frac{1}{2}$ & oxygen
atoms in the photolysis
of carbon dioxide II.

CO₂

A. D. Wabik.

1964

Ann. Rept. Progr. Chem. / Chem.
Soc. London / 61, 8-26.

Electronic spectra of polyato-
mic molecules.

1964

CO₂
форма линии

3 Д210. Форма линии в далеком крыле полосы CO₂ у 4,3 м. Winters Benjamin Hamilton. Line shape in the distant wing of the 4.3 micron band of carbon dioxide. Doct. diss. Cathol. Univ. America, 1963, 57 pp. Ref. «Dissert. Abstrs», 1964, 24, № 10, 4248 (англ.)

Определены коэф. поглощения CO₂ и смеси CO₂ с N₂ в области 2400—2575 см⁻¹, лежащей за кантом основной полосы ν_3 . Измерения выполнены для давлений 0,25—5 атм. Отмечается, что поглощение во всех случаях экспоненциально уменьшается с частотой. К. Василевский

ф. 1965. 3Д

1963

CO₂

Dr. Winters

Winters, N.H.

Winters N.H., Silverman S., Benedict W.S.
 J. Quant. Sp and Red T.
 v 4 (1964) 527(4)

Poplar leaves to upper x 3a red
 color CO₂ 4.3.

CO₂
N₂O
Cheng

2115

1964

Absolute infrared intensities of the fundamental absorption bands in solid CO₂ and N₂O. Haruka Yamada and Willis B. Person (Univ. of Iowa, Iowa City). *J. Chem. Phys.* 41(8), 2478-87(1964). Abs. infrared intensities of the fundamental vibrations of CO₂ and N₂O were measured in polycryst. solid films. The path length was measured by observing interference fringes. In contrast with CS₂, the results for the solid phase do not agree exactly with those predicted from the gas phase values, using only the simple field-effect correction. In particular, the intensity in the solid is less than that in the gas phase for ν_1 and ν_3 of N₂O and for ν_2 of CO₂, whereas the field effect predicts an increase in intensity. The observed changes in intensity are relatively small. The predicted frequency shifts also do not agree with the observed values, indicating that other effects are important. Bond-moment parameters are presented. The bond moment μ is the same as in the gas phase, but the deriv., $\partial\mu/\partial r$, decreases by $\sim 25\%$. Some incomplete studies of the intensities in mixed crystals of N₂O and CO₂ are presented. RCJQ

C.A. 1964.64.11

12801 g

⊗

CO₂

резонанс
Ферми

4 Д215. Резонанс Ферми в молекулах CO₂. Amat G., Pimbert M. On Fermi resonance in carbon dioxide. «J. Molec. Spectrosc», 1965, 16, № 2, 278—290 (англ.)

В теории резонанса Ферми в молекулах C¹³O₂¹⁶, C¹²O¹⁶O¹⁸, C¹²O₂¹⁸ встречаются две трудности: значения отношения $(W_e^* - W_e)/W_e$ (W_e — параметр взаимодействия), найденные для трех молекул, не совпадают между собой; для постоянной ангармоничности k_{122} , вычисленной по значениям постоянных x_{22} и x_{12}, l_2 , получается мнимое значение. Ф-ла второго приближения для колебательной энергии содержит 10 постоянных, для которых получаются 9 ур-ний. Для определения всех 10 постоянных построены эллипсы, описываемые соотношением $\Delta^2 = \Delta_0^2 + 4W^2$, Δ , Δ_0 — разности энергий двух возмущенных и невозмущенных колебательных уровней, $W = W_e$.

ф. 1966.

117

1968

6191

11-11

для Σ и $W=2^{1/2} W_c$ для Π . Но эти эллипсы не пересекаются. Это означает, что существует множество наборов колебательных постоянных, при которых вычисленные и опытные значения колебательной энергии совпадают. Для определения истинного набора в ф-лу для колебательной энергии должны включаться поправки 3-го и 4-го приближений. При учете изменений в значениях вращательных постоянных, обусловленных резонансом Ферми, зависимость k_{122} от разности $x_{12}-4x_{22}$ представляется в виде параболы. Ее пересечение с эллипсами, построенными для Σ , Π , Δ -состояний, позволяет найти правильные значения k_{122} и $x_{12}-4x_{22}$. При этом выясняется, что обычное отнесение частот ν_1 и $2\nu_2$ молекулы $C^{12}O_2^{16}$ должно быть заменено на обратное. М. Ковнер

CO₂

$\nu_1, 2\nu_2$

IV-M-1319

1965

Fermi resonance in carbon dioxide. G. Amat and M. Pimbert (Fac. Sci., Paris). *J. Mol. Spectry.* 16(2), 278-90(1965) (Eng). A method is proposed to obtain a set of more consistent vibrational consts. for CO₂. This can possibly be achieved by reversing the traditional assignment of ν_1 and $2\nu_2$ in ¹²C¹⁶O₂.
RCKP.

C.A. 1965-63.3
2530 d

13 Б86. Молекулярная фотоэлектронная спектроскопия. Часть IV. Потенциалы ионизации и конфигурации CO_2 , COS , CS_2 и NO . Al-Joboury M. I., May D. P., Turner D. W. Molecular photoelectron spectroscopy. Part IV. The ionisation potentials and configurations of carbon dioxide, carbon oxysulphide, carbon disulphide, and nitrous oxide. «J. Chem. Soc.», 1965, Nov., 6350—6355 (англ.)

Получены энергетич. спектры фотоэлектронов при облучении фотонами с энергией 21,21 эв паров CO_2 , NO , COS , CS_2 . Сопоставление наблюдаемых потенциалов ионизации с известными данными об оптич. спектрах приводит авторов к заключению, что электронная конфигурация $(\sigma_g)_{\text{C-O(S)}} (\sigma_u)_{\text{C-O(S)}}^2 (\sigma_g)_{\text{O(S)}}^2 (\sigma_u)_{\text{O(S)}}^2 (\pi_u)^4 (\pi_g)^1$ наилучшим образом описывает CO_2 , COS , CS_2 , а конфигурация $(\sigma)_{\text{N-O}}^2 (\sigma)_{\text{N-N}}^2 (\sigma)_{\text{O}}^2 (\pi_u)^1 (\sigma)_{\text{N}}^2 (\pi_g)^4 - \text{N}_2\text{O}$. Часть I см. РЖХим, 1966, 5Б68. В. Дианов-Клоков

x. 1966. 13



1965

CO₂

(м.н.)

71 Д162. Колебательно-вращательная энергия линейных молекул. Поправка четвертого порядка. II. Andrade e Silva M. H., Ramadier J. Énergie de vibration-rotation des molécules linéaires. Correction du quatrième ordre. II. «J. phys.», 1965, 26, № 5, 246—248 (франц.; рез. англ.)

При учете членов 4-го порядка в колебательно-вращательном гамильтониане постоянная центробежного искажения описывается ф-лой:

$$D_v = D_e + \sum_s \beta_s (v_s + g_s/2),$$

ф. 1966. 18

в которой g_s — степень вырождения s -го колебания, а β_s — сложная ф-ция норм. частот, коэф. разложения момента инерции и потенц. энергии по норм. координатам и постоянных Корнелиса. Ф-ла для D_v относится к линейной молекуле. Явные ф-лы для коэф. β_s получены для двухатомной и симметричной трехатомной молекул. Эти ф-лы принимают более сложный вид в случае резонанса Ферми и будут использованы авторами при вычислении постоянной D_v для молекулы CO_2 . Ч. I см. РЖФиз, 1959, № 10, 22332. М. Ковнер

1965

CO

Barchevitz P. et al.

CO₂C. R. Acad. Sci. 260, 3581

Émission infrarouge de CO
et CO₂ et laser continu à
CO₂ par action directe
d'une excitation haute
fréquence.

1965

CO₂

Barchewitz, Dorbec,
Treffert, and Vautier

N₂O

C. R. Acad. Sci., 260, 5491.

Emission laser continue par
excitation haute fréquence
directe de CO₂ et N₂O dans
les transitions vibrationnelles
00⁰1 - 10⁰ et 00⁰1 - 02⁰ 0.

1965

Kongsp wode

Kongsp wode
u.k.

Rapid graphical method for predicting infrared absorption band contours. W. R. Bradford (E. M. I. Electron. Ltd., Feltham, Engl.). *Appl. Opt.* 4(9), 1207-8(1965)(Eng). A new graphical method of predicting ir transmittance in the gas phase is described, which does not depend on the approxns. of the band model. The method is illustrated for the 2349-cm^{-1} CO_2 band and the Elsasser band model transmission function (Walter M. Elsasser, *CA* 32, 7342³), although it has also been used for other absorption bands and for the statistical model. Glen F. Bailey

 CO_2
(2349cm^{-1})

C. A. 1965. 63. 13

17323 a

1965

1390 - M 1097 - 1V

 $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ ИК -
спектр

3 Д252. ИК-спектр $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$. Chackerian Charles, Jr., Eggers David F., Jr. Infrared spectrum of $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 2, 757—758 (англ.)

Приведены предварительные результаты анализа колебательно-вращательных полос поглощения $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ в области 1800—5000 cm^{-1} . Не обнаружено ожидаемого аномального поведения константы взаимодействия Ферми W_0 при переходе к меченому CO_2 . Найдено, что W_0 возрастает при переходе от $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ к $^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и от $^{12}\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ к $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$. Проведено сравнение экспериментально найденных и вычисленных максимумов полос поглощения $^{13}\text{C}^{18}\text{O}_2$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$.

Л. Гудкин

фр. 1966. 3D

CO₂

B90 - M 1097-IV

1965

30172 INFRARED SPECTRUM OF $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$. Charles Chackerian, Jr. and David F. Eggers, Jr. (Univ. of Washington, Seattle). J. Chem. Phys., 43: 757-8 (July 15, 1965).

A number of vibration-rotation absorption bands of $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ lying in the region between 1800 and 5000 cm^{-1} were analyzed and the derived vibrational-band centers are reported. The Fermi interaction constant W_0 , which gives the best fit to the data, essentially confirms the determination of others who analyzed the $\nu_1 + \nu_3$ and $2\nu_1 + \nu_3$ bands. Data are tabulated. (P.C.H.)

NSA. 1965. 19.16

CO₂

u.v. интп

1965
Bop - M 1097 - IV

Infrared spectrum of ¹²C ¹⁸O₂. Charles Chackerian, Jr., and David F. Eggers, Jr. (Univ. of Washington, Seattle). *J. Chem. Phys.* 43(2), 757-8(1965)(Eng); cf. CA 60, 6347f. Analysis of some vibration-rotation absorption bands of ¹²C ¹⁸O₂ yields more derived vibrational band centers; (0,1',1) band 2301.73 (cm.⁻¹, observed to ± 0.05 cm.⁻¹), (0,0,1) 2313.97, (0,2°,1) 3638.03, (1,1',1) 3493.88, and (1,2°,1) 4833.17. The best Fermi interaction const., W_0 , is 53.50 cm.⁻¹
A. H. Kalantar

C. A. 1965. 63.8

9237 d

CO₂

B9p-M 1400-1V | 1965

Davies W.O.

u.r.

"J. Chem. Phys." 1965, 43,
N 8, 2809-2818.

CO₂

1965

58934g Absorption by CO₂ between 8000 and 10,000 cm.⁻¹ (1-1.25 μ region). Darrell E. Burch, David A. Gryvnak, and Richard R. Patty (Philco, Corp., Newport Beach, Calif.). AD 626316. Avail. CFSTI \$3.00 cy, 37 pp.(1965)(Eng). The absorption by CO₂ in the 9300- to 9650-cm.⁻¹ and 8000- to 8325-cm.⁻¹ regions were studied. Spectra were obtained for 4 samples of CO₂ in the 1.0-m μ region at a pressure of 2.5 atm. and path lengths up to 933 m μ . Spectra were obtained for 10 samples of CO₂ in the 1.2-m μ region at pressures as high as 15 atm. for path lengths up to 32.9 m. and pressures as high as 2.50 atm. for path lengths up to 933 m. The strengths of the important bands and the half-widths of several lines have been measured. Tables of transmittance vs. wave no. are included for both regions as well as photographs of most of the spectra. Also presented are tables of the integrated absorbance vs. wavelength for both regions. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rept.* 41(4), 43(1966).

TCVL

C.A. 1967. 17. 12

CO₂

(3ν₃)

IV-M-1016

1965

16 B175. Новое исследование полосы $3\nu_3\text{CO}_2$. Fayt A., Courtoy C. P., Hemptinne M. de. Nouvelle mesure de la bande $3\nu_3$ du CO_2 . «Ann. Soc. scient. Bruxelles», 1965, Ser. 1, 79, № 3, 233—235 (франц.)

Проведено точное измерение частоты в максимуме полосы поглощения $3\nu_3\text{CO}_2$. Для C^{12}O_2 и C^{13}O_2 получены значения 6972,62 и 6780,27 см^{-1} соотв. Вычислены коэф. ангармоничности. Е. Рыльцев

ж. 1966. 16

CO₂

IV-4-1016

1965

New measurement of the $3\nu_3$ band of carbon dioxide. A. Fayt, C. P. Courtoy, and M. de Hemptinne (Centre Phys. Nucl. Mol., Heverle-Louvain, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. I* 79(3), 233-5(1965)(Fr). With a new ir spectrograph which allows measurements to 0.01 cm.^{-1} , the frequency of the $3\nu_3$ band of CO₂ was detd. as 6972.62 cm.^{-1} , and former rotational analyses were confirmed. New values for vibration consts., on using 2283.48 cm.^{-1} for ν_3 (CA 53, 15763a) ω_{33}° 2295.18 and x_{33}° -11.70, were also obtained. Charles A. Horton

C.A. 1966: 65.2

1598g

C¹²O₂¹⁶
2

10-11-2019

1965

6 Д274. 15-м полосы $C^{12}O_2^{16}$. Gordon Ho-
ward R., McCubbin T. K., Jr. The 15-micron bands
of $C^{12}O_2^{16}$. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 18, № 1, 73—82
(англ.)

Измерены 15-м полосы CO_2 . Эксперименты проводи-
лись на вакуумном спектрографе с высокой разрешаю-
щей способностью (разрешение $0,08 \text{ см}^{-1}$ при 15 м).
Спектры регистрировались в 3-м и 4-м порядках эшелле
Бауша и Ломба. В качестве предварительного монохро-
матора использовалась призма. С целью калибровки из-
меряемых волн: чисел в 15-м полосе CO_2 были использо-
ваны данные Ранка и Уингенса для полосы 1—0 моле-
кулы $C^{12}O^{16}$. Благодаря этой методике волн. числа ли-

ф. 1966. 67

ний поглощения CO_2 были измерены с точностью $339.293 \pm 0,005 \text{ см}^{-1}$ по отношению к соответствующим волн. числам $\text{C}^{12}\text{O}^{16}$. Путем подгонки методом наименьших квадратов эксперим. данных к коэф. ур-ния для волн. чисел колебательно-вращательных полос $\text{C}^{12}\text{O}^{16}$ (Martin P. E., Barker E. F. «Phys. Rev.», 1932, 41, 291) определены постоянные $\Delta B = B' - B''$; $\Delta D = D' - D''$ и ν_0 для следующих пслос $\text{C}^{12}\text{O}^{16}$: $01^10 - 00^00$; $10^00 - 01^10$ и $02^00 - 01^10$. Кроме того, получены ΔB и ν_0 для полос $02^20 - 01^10$; $03^10 - 02^20$ и $11^10 - 02^20$. А. Покровский/

CO₂

Газовый.
Сущий

1965

6 Д156. Расчеты относительных интенсивностей для CO₂. Gray L. D., Selvidge Judith E. Relative intensity calculations for carbon dioxide. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1965, 5, № 2, 291—301 (англ.)

Произведен расчет колебательных и вращательно-колебательных статистич. сумм для ¹²C¹⁶O₂ в области т-р 150—1200° К. Результаты представлены в таблицах с интервалом 10° К. Для сопоставления табулированы также статистич. суммы для гармонич. осциллятора и жесткого ротатора. Различие между вычисленными значениями статистич. сумм и значениями, найденными в приближении гармонич. осциллятора и жесткого ротатора, меняется от 2% при 1200° К до 0,5—0,05% при 300° К. Произведен расчет относит. интенсивностей вращательных линий для переходов с колебательных уровней 00⁰0 и 01¹0 для ¹²C¹⁶O₂ при т-ре 300° К. Приведена таблица относит. интенсивностей для П—П, П—Δ, П—Σ, Σ—Σ, Σ—П-переходов в R, Q и P-ветвях. С. Ветчинкин

А. 1966. 69

Физ. 1

539.12.01

Tani S.

Padé approximant in potential scattering.
Phys. Rev., 1965, 139, N 4B, 1011—1020.

Апроксимант Падэ в потенциальном рассеянии. Библиогр.
18 назв.

1965

CO₂

термод.

ф-ции

м. н.

2 Б127. Расчет относительной интенсивности вращательных линий двуокиси углерода. Gray L. D. Selvidge Judith E. Relative intensity calculations for carbon dioxide. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1965, 5, № 2, 291—301 (англ.)

Произведены вычисления колебательно-вращательной суммы состояний CO₂ как с учетом, так и без учета ангармоничности колебаний и колебательно-вращательного взаимодействия при t -рах 150—1200° К с интервалом 10° К. Для расчета использованы литературные данные по значениям мол. постоянных ω_i , X_{ij} , B_0 , D , α_i и γ_{ij} . Значения B_v для нек-рых колебательных состояний вычислены заново с учетом резонанса Ферми и l -удвоения.

Х: 1967. 2

Отмечено, что учет ангармонич. поправки при вычислении колебательно-вращательной суммы по состояниям необходим лишь при высоких T -рах. Величина этой поправки при T -ре 1200°K составляет 2%, а при T -ре 300°K 0,5% от общей величины суммы. Вычислены относительные интенсивности вращательных линий в полосах, соотв-их переходам $\Sigma \rightarrow \Sigma$, $\Sigma \rightarrow \Pi$, $\Pi \rightarrow \Sigma$, $\Pi \rightarrow \Pi$ и $\Pi \rightarrow \Delta$ при T -ре 300°K для идеального газа. Расчеты проведены для линий со значением J вплоть до 103. М. Алиев

1965

CO₂

uncopyable
crossed out

Spectral emissivity calculations for the parallel bands of CO₂ at 4.3 μ . L. D. Gray (California Inst. of Technol., Pasadena). *J. Quant. Spectry. Radiative Transfer* 5(4), 569-83(1965)(Eng). The quasistatistical band model was used to machine compute the spectral emissivity due to the parallel bands in the 4.3- μ region of CO₂; no allowance was made for line wing emission beyond the band head. The transmission was calcd. for the spectral range 2100 to 2400 cm.⁻¹ at 5-cm.⁻¹ intervals. Computed spectral emissivity at various temps., pressure, and amts. of absorber were compared with literature results, with good agreement.
G. G. Mannella

C.A. 1966-64.1
166 a

12 C 16 O 2

1965

The 15- μ bands of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$: Howard R. Gordon and T. K. McCubbin, Jr. (Pennsylvania State University, University Park). *J. Mol. Spectry.* 18(1), 73-82(1965)(Eng). The 15- μ bands of CO_2 were measured by using a prism-grating echelle vacuum spectrograph capable of giving a resolu. of 0.08 cm.^{-1} at 15μ . ν_0 , ΔB , and ΔD were obtained for the 01^10-00^00 , 10^00-01^10 , and 02^00-01^10 bands, and ν_0 and ΔB were obtained for the 02^20-01^10 , 03^10-02^20 , and 11^10-02^20 transitions. RCKP

C. A. 1965. 63. 11
14235 49

CP
Pun

279



CO₂

Bq-V4190

1965

~~NH₂; ND₂; BO₂~~; (forst. const.)

Kuchitsu K., Morino Y.

Bull. Chem. Soc. Japan, 1965, 38 (5), 805-
-813

Estimation of anharmonic potential ...

CA, 1965, 63, N 4, 3634e

ESTIM. OF ANH.

F

J

CO₂

1965

17621d Absorption spectrum of carbon dioxide in the vacuum ultraviolet. Kosinskaya, I. V.; Startsev, G. P. (USSR). *Spektrosk., Tr. Sib. Soveshch.*, 4th 1965 (Pub. 1969), 92-4 (Russ). Edited by Prilezhaeva, N. A. Izd. "Nauka": Moscow, USSR. The spectra were obtained by using a He-continuum in a 2-meter spectrograph and were recorded photographically in the 2nd order at exposure times of 3 and 9 min for the intense and weak spectral regions, resp. The absorption line of Ne were photographed at CO₂ pressures of 10⁻² to 10⁻⁴ torr in the app. A graph was constructed enabling detn. of CO₂ concn. from the dependence of the absorption lines on CO₂ pressure. The absorption cross section was calcd. for each spectrum. The dependence of absorption cross section on CO₂ pressure remains const. Results on the absorption cross section and structure of the absorption spectra agree with data published in the literature.
Marv A. Kersten

спектр
нормы.
в ак. 490

C.A. 1971. 84. 4

CO₂

Yassette E. N.,
Shiloff F. C.

1965

J. Chem. Phys., 43, 560

Collision cross-section study
of CO₂.

CO

Myers B.F., Sulzmann 1965

CO₂

K. G. P., Bartle & R.

J. Chem. Phys., 43, 1220.

Oxidation of CO. II. Influence
of H₂ on the induction pe-
riod preceding rapid CO₂
formation in shock-heated

CO-O₂-Ar mixtures.

1965

CO₂

(E₁)

вероятн.
переход

12 Д124. Силы осцилляторов для некоторых пиков в спектре электронного удара двуокиси углерода. Спин-орбитальное взаимодействие. Moyer Vincent D., Lassettre Edwin N. Oscillator strengths of several peaks in the electron-impact spectrum of carbon dioxide Spin-orbit coupling. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 10, 3436—3441 (англ.)

Исследовались спектры потерь энергии электронов с начальной кинетич. энергией 150, 200, 300, 400 эв, рассеянных на молекулах CO₂ (угол рассеяния 0°). Измерения проводились на установке с повышенной разрешающей силой. Положения максимумов потерь энергии (МПЭ) в спектре хорошо согласуются с положениями полос в УФ-спектре поглощения CO₂. На основании теории МО в приближении ЛКАО с учетом спин-орбиталь-

ф. 1965.

12Д

ного взаимодействия произведен расчет энергетич. уровней CO_2 и отождествлены наблюдавшиеся МПЭ. В опытах со смесями $\text{CO}-\text{He}$ с помощью относит. метода определены силы осцилляторов для ряда переходов CO_2 (в скобках указано положение МПЭ в эв): $0,0049 \pm \pm 0,0004$ (8,52); $0,0072 \pm 0,0006$ (9,30); $0,16 \pm 0,007$ (11,07); $0,076 \pm 0,001$ (11,40). Полученные величины сравниваются с найденными методами оптич. спектроскопии.

В. Скурат

1965

CO₂, O₃,
SO₂nonpolar-
molecule

Bond and molecular polarizabilities in some linear and non-linear triatomic molecules. G. Nagarajan (Univ. of Maryland, College Park). *Acta Phys. Polon.* 28(6), 869-74(1965)(Eng). The electronic configurations of CO₂, CS₂, CSe₂, OCS, OCSe, SCSe, SCTe, O₃, SO₂, and SeO₂ were examd. in the light of the Lewis-Langmuir octet rule modified by Linnett as a double quartet of electrons. Bond and mol. polarizabilities were computed by the method of Lippincott-Stutmann, employing the δ -function model of chem. bonding. Good agreement was found between the calcd. and exptl. values of mol. polarizabilities in the case of CO₂, O₃, and SO₂, while slightly higher calcd. values were obtained for CS₂ and OCS, which may be attributed to the uncertainty in the exptl. data. It was also observed that the π and σ electrons did not make equal contributions to the bond parallel component of the polarizability. While the values of bond perpendicular component could be transferred from 1 mol. system to another having similar chem. bonds irresp. of the accuracy in the values of internuclear distances, such a transfer would be possible in the cases of bond parallel component only when the latter were nearly identical. Vishnu

C. A. 1966. 65.5

63192

1965

CO₂
(7)
1 Д192. Коэффициенты поглощения и фотоионизации CO₂ в области 580÷1670 Å. Nakata R. S., Watanabe K., Matsunaga F. M. Absorption and photoionization coefficients of CO₂ in the region 580—1670 Å. «Sci. Light», 1965, 14, № 1, 54—71 (англ.).

В вакуумной УФ-области с помощью фотоэлектрич. техники определены значения коэф. поглощения (в области 580÷1670 Å) и коэф. фотоионизации (в области 580÷900 Å) CO₂. Использовались водородный и гелиевый источники сплошного излучения и спектрометр с высоким разрешением (0,2 Å); длина оптической ячейки варьировалась от 1,05 до 27,1 см при давлении газа 0,006÷102 мм рт. ст. Приведены кривые зависимости коэф. поглощения и фотоионизации от длины

ф. 1966 196

волны. Выход фотоионизации составлял от 60 до 95%.
Обнаружено, что большинство наблюдавшихся полос
являются предъионизованными. Дублетные потенциалы
ионизации (13,786 и 13,766 эв) подтверждены кривой
фотоионизации. Определены также частоты диффузных
полос CO_2 в области 1239—1380 Å. Библ. 19 назв.

С. Бурейко

10 Д196. Уточнение ангармонических силовых постоянных по методу наименьших квадратов: применение к $^{12}\text{CO}_2$ и $^{13}\text{CO}_2$. Pariseau M. A., Suzuki I., Overend John. Least-squares adjustment of anharmonic potential constants: application to $^{12}\text{CO}_2$ and $^{13}\text{CO}_2$. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 7, 2335—2344 (англ.)

В случае ангармонич. колебаний потенц. энергия молекулы выражается через криволинейные естественные колебательные координаты. Введены в рассмотрение силовые постоянные, имеющие вид производных второго, третьего и четвертого порядков от потенц. энергии по этим координатам. Эти координаты преобразуются к разностным декартовым координатам и затем к декартовым координатам атомов в неподвижной системе отсчета. К декартовым координатам преобразуются и сило-

ф. 1945. 108

вые постоянные, что позволяет представить кинетич. и потенц. энергию в одних и тех же координатах. Полная колебательная энергия выражается через постоянные ангармоничности, которые имеют вид сложных ф-ций от силовых и вращательных постоянных, нулевых частот и постоянных Корнолиса. Силовые постоянные определяются по методу наименьших квадратов с использованием матрицы производных от частот по силовым постоянным. В полученные ф-лы для постоянных ангармоничности вносятся поправки, необходимые в случае резонанса Ферми. Метод расчета применен к молекулам $^{12}\text{CO}_2$ и $^{13}\text{CO}_2$, для которых определены численные значения силовых постоянных, постоянных ангармоничности, нулевых частот и постоянных колебательно-вращательного взаимодействия. Зависимость потенц. энергии молекулы CO_2 от декартовой координаты атома О представлена графически. М. Ковнер

1965

Line intensity and pressure broadening studies in hydrogen fluoride and other problems in infrared spectroscopy.. Alvin H. Nielsen, Robert J. Lovell, Norman M. Gailar, W. Edward Deeds, and William F. Herget (Univ. of Tennessee, Knoxville). AD 618401. Avail. CFSTI, 119 pp.(1965)(Eng). The shapes, shifts, and effects of self-broadening of spectral lines have been studied by using the vibration-rotation lines in the fundamental ir band of HF as the medium for measurement. All measurements were made with a high-dispersion vacuum-grating ir spectrometer capable of resolution to better than 0.1/cm. in the region of the HF fundamental. Slit functions were detd. carefully by using absorption lines from the fundamental of CO at very low pressures. Computational methods were developed making it possible to det. true line shapes accurately. Measured line shapes were compared with predicted Lorentz line shapes. The Lorentz parameter was obtained by the equiv.-width method for the pressure-broadened spectral lines in the HF fundamental from $m = -6$ to $m = +12$. Investigations of the ir spectra of several mols., such as CO_2 , T_2O , and CH_3Cl , are included. Mol. consts. are listed. From U.S. Govt. Res. Develop. Rept. 40(17), 59(1965). TCVL

 CO_2
 T_2O CH_3Cl

Mol. Tags

(Bund)

C. A - 1966

64.5

5938 d



CO₂
расчет
II-11-456
V22 Б37. Уточнение ангармонических силовых постоянных по методу наименьших квадратов: применение к C¹²O₂ и C¹³O₂. Pariseau M. A., Suzuki I., Overend John. Least-squares adjustment of anharmonic potential constants: application to ¹²CO₂ and ¹³CO₂. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 7, 2335—2344 (англ.)

Отмечено, что в случае ангармонич. колебаний потенциальная энергия молекулы выражается через криволинейные естественные колебательные координаты. Рассмотрены силовые постоянные, имеющие вид производных 2-го, 3-го и 4-го порядков от потенциальной энергии по этим координатам. Эти координаты преобразуются к разностным декартовым координатам и затем к декартовым координатам атомов в неподвижной системе отсчета. К декартовым координатам преобразуются и силовые постоянные, что позволяет представить кинетич. и потенциальную энергию в одних и тех же координатах. Полная колебательная энергия выражается через постоянные ангармоничности, имеющие вид сложных функ-

1.1965.22



ций от силовых и вращательных постоянных, нулевых частот и кориолисовых постоянных. Силовые постоянные определяются по методу наименьших квадратов с использованием матрицы производных от частот по силовым постоянным. В полученные ф-лы для постоянных ангармоничности вносятся поправки, необходимые в случае резонанса Ферми. Метод расчета применен к молекулам $C^{12}O_2$ и $C^{13}O_2$, для которых определены численные значения силовых постоянных, постоянных ангармоничности, нулевых частот и постоянных колебательно-вращательного взаимодействия. Зависимость потенциальной энергии молекулы CO_2 от декартовой координаты атома кислорода представлена графически. М. Ковнер

CO₂

1965

Péresse Joseph

Riv. Groupem. avancem. méthodes
spectrogr., janv.-juin, 34-36 (pp. 1-10)

Полное директивное сечение
потенциала многоатомных молекул

см. O₂ III

1965

CO₂

2 Д274. Излучательная способность молекул CO₂ при температурах до 1200° К в области спектра 4, T=4,6 м.м. Подкладенко М. В. «Ж. прикл. спектроскопии», 1965, 3, № 1, 76—82 (рез. англ.)

С помощью спектрометра среднего разрешения (ИКС-12) и кварцевой кюветы исследована зависимость излучательной способности молекул CO₂ в области основного вал. кол. ν_3 при $300 \leq T \leq 1200^\circ \text{K}$, $100 \leq P \leq 750 \text{ мм рт. ст.}$ и $0,18 \leq P_{\text{CO}_2} l \leq 4 \text{ атм} \cdot \text{см.}$ Проведено сравнение эксперимента с результатами вычислений по схематизированным моделям полос поглощения. Показано, что при соответствующем выборе параметров (средней интегр. интенсивности линий, полуширины линий и расстоянии между ними) все рассмотренные модели дают достаточно хорошее совпадение с эксперим. кривыми. Библ. 10 назв.

ф. 1966. 20

CO₂

Roncin F. - Y.,
Damany N.

1965

C. R. Acad. Sci., 260, 6069

Spectres d'absorption, dans
l'ultra violet lointain, de
l'oxyde de carbone et de
l'azote solides a basse
temperature.

CO₂

121

1390-4885-121

3

✓ 4 Д216. Статистическое вычисление равновесного распределения O¹⁸ и O¹⁷ в системах CO₂/H₂O и CO₂/D₂O по молекулярным спектрам. Staschewski Dieter. Statistische Berechnung der O¹⁸- und O¹⁷-Gleichgewichtsverteilung in den Systemen CO₂/H₂O und CO₂/D₂O aus molekülspektroskopischen Daten. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1965, 69, № 5, 426—440 (нем.; рез. англ.)

Отношения статич. сумм для изотопич. молекул CO₂ и H₂O выражены через вращательные постоянные и колебательные статистич. суммы. Для вычисления этих сумм используются соотношения между частотами колебаний, постоянными резонанса Ферми и постоянными ангармоничности изотопич. молекул. Приводятся численные значения этих величин для четырех молекул CO₂, шести молекул H₂O и D₂O. Определены их нулевые частоты и вращательные постоянные. Эти данные использованы для вычисления статистич. сумм и постоянных распределения изотопич. молекул. Сравняются вычисленные и опытные значения этих постоянных. М. Ковнер

ф. 1966. 48



1965

1965

CO₂

Warneck P.

germany

J. Chem. Phys., 43 (5), 1849-
50, (1965)

Excited oxygen atoms in
the photolyses of CO₂ and
N₂O.

⊠

CO₂

Energy levels of polyat- 1966
Gilbert (7) molecule
C. Amat.

Final report 1 February
1960 - 31 January 1966

Chapter VI

General discussion of Fermi
resonance in CO₂ with a new
assignment of vibrational
levels

Amat 3390

CO₂

1966

уфр.

интенсив.

20 Б230. Измерения интенсивности полос CO₂ у 1 μ
Boese Robert W., Miller Jacob H., Inn Ed
dard C. Y. Intensity measurements of the 1 μ CO₂ bands.
«J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1966, 6,
№ 6, 717—725 (англ.)

При разрешении до 0,1 см^{-1} исследованы спектры поглощения слабых полос CO₂ у 1 μ , полученные в многоходовой кювете при длинах пути до 900 м и кол-вах поглощающего в-ва до 4,8 $\text{км} \cdot \text{атм}$. Измерены интегр. интенсивности R-ветвей, равные для полос 20°3—00°0, 12°3—00°0 и 04°3—00°0, соответственно, 1,27; 3,50 и 0,59 $\text{см}^{-1} \cdot \text{км}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$. Для наиболее сильной 12°3—00°0 полосы измерены интенсивности и полуширины отдельных линий P-ветви от $I=4$ до $I=22$. Найдено, что среднее значение полуширин линий равно 0,084 $\text{см}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$, а интенсивность наиболее сильной линии P(16) равна $0,250 \pm 0,15 \text{ см}^{-1} \cdot \text{км}^{-1} \cdot \text{атм}^{-1}$. К. Василевский

Х. 1967. 20

CO₂

1986

ref.
reference.

6754n Intensity measurements of the 1- μ CO₂ bands. Robert W. Boese, Jacob H. Miller, and Edward C. Y. Inn (NASA, Moffett Field, Calif.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 6(6), 717-25(1966)(Eng). The quant. intensity of the weak CO₂ triad in the 1- μ spectral region has been measured. Integrated R-branch intensities were obtained by using pressure broadening techniques with absorbing paths up to 4.8 km.-atm. The R-branch intensities for the transitions 20⁰3 $\leftarrow$ 00⁰0, 12⁰3 $\leftarrow$ 00⁰0, and 04⁰3 $\leftarrow$ 00⁰0 are 1.27, 3.50, and 0.59 cm.⁻¹ km.⁻¹ atm.⁻¹ S.T.P., resp. Intensities and half-widths of the J₄ through J₂₂ lines in the P branch of the 12⁰3 $\leftarrow$ 00⁰0 transition have been detd. 15 references. RCHR

C.A. 1987. 66.2

CO₂

1986

9 Д212. Измерения интенсивности полос CO₂ у 1 м.
Boese Robert W., Miller Jacob H., Inn
Edward C. Y. Intensity measurements of the 1 м CO₂
bands. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1966,
6, № 6, 717—725 (англ.)

При разрешении до 0,1 см⁻¹ исследованы спектры поглощения слабых полос CO₂ у 1 м, полученные в многоходовой кювете при длинах пути до 900 м и кол-вах поглощающего в-ва до 4,8 км·атм. Измерены интегр. интенсивности R-ветвей, равные для полос 20°3—00°0, 12°3—00°0 и 04°3—00°0, соответственно, 1,27; 3,50 и 0,59 см⁻¹·км⁻¹·атм⁻¹. Для наиболее сильной 12°3—00°0-полосы измерены интенсивности и полуширины отдельных линий P-ветви от J=4 до J=22. Найдено, что среднее значение полуширин линий равно 0,084 см⁻¹·атм⁻¹, а интенсивность наиболее сильной линии P(16) равна 0,250±0,015 см⁻¹·км⁻¹·атм⁻¹. К. Василевский

9. 1987. 92

CO₂

1966

2 Д217. Лабораторное исследование поглощения и испускания ИК-излучения. Burch Darrelle E., Gryvnak David A. Laboratory investigation of the absorption and emission of infrared radiation. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1966, 6, № 3, 229—240 (англ.)

+1
Изучены спектры поглощения H₂O и CO₂ в области 0,6—5,5 мк, близких к комнатной. Использовались абсорбционные кюветы многократного прохождения с оптич. длиной 2—933 м при давлениях образцов от нескольких микрон рт. ст. до 15 атм. Определено и идентифицировано около 30 новых полос CO₂ и рассчитаны силы важнейших полос. Для H₂O найдены силы и ширины нескольких сот наиболее важных линий. Обнаружена зависимость формы крыла линий поглощения CO₂ от т-ры, уширяющего газа (применялось либо

ф. 1967. 28

☒

самоуширение, либо уширение азотом или гелием) и длины волны, которая не объясняется имеющимися теориями. Исследовано также поглощение H_2O и CO_2 в области 1—5 μ при т-рах до 1800° К. Рассмотрено пропускание излучения из горячих CO_2 и H_2O через холодные CO_2 и H_2O соответственно для изучения влияния совпадения линий испускания с линиями поглощения. Приведены некоторые данные, иллюстрирующие результаты упомянутых исследований. Библ. 11 назв.

С. Бурейко

CO₂

1966

3 Д249 РЕЦ. Рассчитанные значения частот и интенсивностей спектральных линий CO₂ в областях 2,05 и 2,7 м. Calfee Robert F., Benedict William S. Carbon dioxide spectral line positions and intensities calculated for the 2.05 and 2.7 micron regions. Washington, D. C., Nat. Bur. of Standards, 1966, 110 pp., 0.60 doll. (англ.) [Рец. Williams Dudley. «Appl. Optics», 1966, 5, № 10, 1695—1696]

В книге дан детальный расчет частот и интенсивностей линий CO₂ в областях 2,05 и 2,7 м. Интенсивности рассчитаны для т-ры 296°К. Таблицы содержат данные для всех переходов, включая все вращательные состояния вплоть до $J=100$.

Э. Броун

ф. 1967. 320

CO₂

1966

Carbon dioxide spectral line positions and intensities calculated for the 2.05- and 2.7- μ regions. Robert F. Calfee and William S. Benedict (Inst. for Telecommun. Sci. & Aeronomy, Boulder, Colo.). *Natl. Bur. Std. (U.S.), Tech. Notes No. 332*, 110 pp.(1966)(Eng). The spectral line positions and intensities for the CO₂ bands occurring in the 2.05- and 2.7- μ regions of the ir spectrum are listed. Lines with intensities down to 10^{-7} cm.⁻¹/atm. cm. are listed for a temp. of 296°K.

VNJZ

C.A. 1966 · 65 · 4

4853 f

CO₂

600-1000 Å
спектр

9 Д162. Поглощение, фотоионизация и флуоресценция CO₂. Cook G. R., Metzger P. H., Ogawa M. Absorption, photoionization, and fluorescence of CO₂. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 8, 2935—2942 (англ.)

Измерены коэф. абсорбции и фотоионизации CO₂ в области сильных полос поглощения и в области непрерывного спектра в спектральном интервале 600—1000 Å. Наличие непрерывного спектра поглощения приписано процессам ионизации и диссоциации в исследуемой системе. Обнаружено интенсивное флуоресцентное излучение CO₂ при 715,7 Å, обладающее колебательной структурой. Изучена зависимость относит. выхода флуоресценции CO₂ от длины волны возбуждающего света. Проведен анализ наблюдаемой в спектре флуоресценции колебательной структуры. На основании полученных данных проведена оценка вклада процессов ионизации и диссоциации в спектр полного поглощения CO₂. Библиография 25 назв.

Е. Викторова

ф. 1966. 92

1966

CO₂

1966

№18 Б267. Молекулярная спектроскопия с помощью лазерного источника. Исследование полосы 1064 см⁻¹ CO₂. Farrenq Robert, Rossetti Colette, Bourbonneux Françoise, Barchewitz Pierre. Spectroscopie moléculaire avec source laser. Etude de la bande de CO₂ à 1064 cm⁻¹. «C. r. Acad. sci.», 1966, 263, № 3, B241—B243 (франц.)

м.н.

Методика измерения параметров вращательных компонентов колебательно-вращательных ИК-полос с помощью лазерного источника (CO₂) (РЖХим, 1966, 22Б163) применена для измерения ширины и интегральной интенсивности вращательных компонентов P_{16} — P_{22} и R_{17} , R_{19} полосы 1064 см⁻¹ CO₂. Вычислены моменты чисто вращательного перехода $R_{0'}^{0'} = (2,95 \pm 0,02) \cdot 10^{-2} D$

ж. 1967. 18

и соотв-щая вероятность перехода $A_{v''}^{v'} = 0,33 \text{ сек}^{-1}$.

Определено эффективное сечение ударного уширения линий. $Q = (10,2 \pm 1,0) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$. Изучено влияние собственного давления CO_2 и давление постороннего газа (N_2) на ширину линий. Определено сечение $Q(\text{CO}_2 - \text{N}_2) = (5,0 \pm 0,5) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$.

Г. Жижин

CO₂

1966

Molecular spectroscopy with a laser source. Study of the CO₂ band at 1064 cm.⁻¹ Robert Farrenq, Colette Rossetti, Francoise Bourbonneux, and Pierre Barchewitz (Fac. Sci., Orsay, France). *Compt. Rend., Ser. A, B* 263B(3), 241-3 (1966)(Fr). The vibrational-rotational transition moment and the collision half-width have been detd. for the lines P₁₆, P₁₈, P₂₀, R₁₇, and R₁₉ in the CO₂ absorption band centered at 1064 cm.⁻¹ This was done by using a laser to measure the absorption coeff. at the center of the lines (following abstr.). The method was also used to det. collision half-widths in mixts. of CO₂ and N, by using the line P₂₀ in the band centered at 961 cm.⁻¹

N. D. Clare

C.A. 1966 15.12
17898 ab

CO₂

Freed K. F.

1966

J. Chem. Phys., 45, № 2, 591.

Изучение вращательных и ко-
лебательных переходов
молекулы.

(см. Расчеты
и.и.)

CO₂

1966

/ 14 Б234. Микроволновое поглощение в сжатой CO₂.
Frenkel L., Woods D. Microwave absorption in com-
pressed CO₂. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 5, 2219
(англ.)

м.в.

показание

X. 1967. 14

CO₂

BP-M2050-IV

1966

(E_i, V_i, u.n.)

Frapard C.,
Lauers P., ...

C. z. Acad. sci., 1966,
A13262, N20,

B1340-B1343

CO₂

1966

U.K.

unsp

The infrared spectrum of CO₂ in the 2.8- and 15-micron regions.
Howard Robert Gordon (Pennsylvania State Univ., University
Park). Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-
4807, 85 pp.; *Dissertation Abstr.* 26(11), 6781(1966)(Eng);
cf. CA 64, 13591a. SNDC

C.A. 1966. 65. 6

8194 f

CO₂

1966

З Д248. Полосы 2,8 μ CO₂. Gordon Howard R.,
McCubbin T. K., Jr. The 2.8-micron bands of CO₂.
«J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 2, 137—154 (англ.)

Получен спектр CO₂ в области 2,8 μ при точности
регистрации вращательных линий $\pm 0,005$ см⁻¹. Произ-
веденный анализ показал, что расстояние между уров-
нями 020 и 100 в невозмущенном состоянии составляет
 $2,5 \pm 0,1 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹. Библ. 15.

ф. 1967. 320

CO₂

1966

6 Б144. Полосы CO₂ в области 2,8 м. Gordon Howard R., McCubbin T. K., Jr. The 2,8-micron bands of CO₂. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 2, 137—154 (англ.)

Исследован колебательно-вращательный спектр CO₂ в области 2,8 м. Проведен анализ вращательной структуры 10 полос C¹²O₂¹⁶, 1 полосы C¹³O₂¹⁶ и 2 полос C¹²O₂¹⁶O¹⁸. В этой области появляются интенсивные полосы, соответствующие переходам 10⁰1—000, 02⁰1—000 и «горячие» полосы, связанные этими же переходами. Найдены значения колебательных и вращательных постоянных с учетом резонанса Ферми (K₁₂₂). На основе данных, полученных при анализе полос при 15 м вычислены положения вра-

х. 1967.6

щательных линий во всех исследованных полосах и сопоставлены с их опытными значениями. При расчете коэф. ангармоничности K_{122} кроме резонанса Ферми в 5 днадах уровней учтен также малый резонансный эффект Тейлора — Бенедикта — Стронга и определены значения параметров, характеризующих этот эффект. Аномальные значения некоторых постоянных α_i и γ_{ij} приписаны корнолисовому резонансу и влиянию резонанса Ферми на l -удвоение. Отмечено, что невозмущенные уровни $1\ v_2'v_3$ в 5 днадах расположены ниже невозмущенных уровней.

М. Алиев

1966

CO₂

Микроволно-
вое поглоще-
ние

7 Б197. Микроволновое поглощение в сжатом CO₂.
Ho W., Kaufman I. A., Thaddeus P. Microwave
absorption in compressed CO₂. «J. Chem. Phys.», 1966,
45, № 3, 877—880 (англ.)

Исследовано микроволновое поглощение CO₂ при
т-рах от 270 до 500° К и давлениях до 95 атм. Метод
основан на измерении коэф. диэлектрич. потерь в зави-
симости от плотности газа, проводящемся на фиксиро-
ванной частоте 9620 Мгц. Плотность газа определялась
по величине диэлектрич. постоянной, вычисленной из
резонансной частоты камеры при данном давлении.
Определены первые 2 члена вириального разложения
коэф. диэлектрич. потерь. Из первого вириального коэф.
вычислен квадрупольный момент молекулы. Получен-
ные результаты сопоставляются с данными других
авторов. Б. Н.

г. 1967. 7

CO₂

1966

У 3 Б153. Новые излучательные системы в CO₂. I. π — π -переход. Howe John A., McFarlane R. A. New emission systems in CO₂. Part I. π — π transition. «J. Molec. Spectrosc.». 1966, 19, № 2, 224—226 (англ.)

Получена генерация на CO₂ в области 11—18 μ при возбуждении сильноточными импульсами постоянного тока. Точно измерены длины волн 16 линий вблизи 11 μ , к-рые отнесены к P -ветви перехода $\Pi_g \rightarrow \Pi_u$ и $01^11 \rightarrow 11^10$. Добавление N₂ увеличивает выходную мощность генератора. Оптимальное давл. смеси 2,6 мм, скорость прокачки газа 0,4 м·сек⁻¹. Э. Бурхард

х. 1967. 3

1966

CO₂

1 Д678. Новые излучательные системы в CO₂. I. П—П-переход. Howe John A., McFarlane R. A. New emission systems in CO₂. Part I. П—П transition. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 19, № 2, 224—226 (англ.)

Получена генерация на CO₂ в области 11—18 м при возбуждении сильноточными импульсами постоянного тока. Точно измерены длины волн 16 линий вблизи 11 м, которые отнесены к Р-ветви перехода $\Pi_g \rightarrow \Pi_u$ и $01^{11} \rightarrow 11^{10}$. Добавление N₂ увеличивает выходную мощность генератора. Оптимальное давление смеси 2,6 мм.рт.ст., скорость прокачки газа 0,4 м.сек⁻¹.

спектр

ф. 1967. 1А

1966

CO₂

High-resolution absorption measurement in CO₂ with a tuned laser. B. F. Jacoby and R. K. Long (Ohio State Univ., Columbus). *Appl. Phys. Letters* 8(8), 202-4(1966)(Eng). A relatively new technique of tuned laser spectroscopy was used to measure directly a single line in the *P* branch of the CO₂ 13¹1 to 01¹0 vibro-rotational absorption band near 2 μ . The laser was based on a mixt. of 80 torr of He and 0.25 torr of Xe. The utility of this technique for the measurement of very weak absorption lines was demonstrated by the results, in which the absorption cell output is given as a function of the magnetic field for various pressures of CO₂. BGJN

C.A. 1966. 65. Y
4849h

CO₂ U. S. Journal of 1966
Canad J. Phys. 44, 707
Transp. Res. Board
of Canada. Inter. Comm.
for the Study of
CO₂.

14. D₂

CO₂
Лазеры

1966

8 Д860. Изучение молекулярных переходов при помощи молекулярных лазеров с модулированной добротностью. Kovacs M. A., Flynn G. W., Javan A. Q switching of molecular laser transitions. «Appl. Phys. Letters», 1966, 8, № 3, 62—63 (англ.)

Описана эксперим. методика использования молекулярных лазеров с модулированной добротностью для измерения времен релаксации колебательных и вращательных состояний молекул. При использовании молекулярного лазера на смеси N₂—CO₂—He с мощностью генерации в непрерывном режиме около нескольких вт максим. скорость повторения импульсов составляла 500 гц и достигалась с помощью вращающейся призмы. Из измерения зависимости мощности импульсов излучения от частоты их повторения получена оценка времени жизни колебательных уровней молекулы CO₂: $\tau \leq 2 \cdot 10^{-3}$ сек.

В. Ходовой

ф. 1966. 88

CO₂

1966

22 Б137. Инфракрасные спектры CO₂, адсорбированной на галогенидах щелочных металлов, полученных конденсацией из парообразного состояния. Kozigovski Y., Folman M. Infra-red spectra of CO₂ adsorbed on evaporated alkali halides. «Trans. Faraday Soc.», 1966, 62, № 6, 1431—1438 (англ.)

При различных t -рах исследованы ИК-спектры CO₂, адсорбированной на пленках галогенов щелочных металлов с большой площадью поверхности, полученных конденсацией из парообразного состояния на подложку при -196° . Колебание ν_3 CO₂ представляет собой узкую и сильную линию. С длинноволновой стороны ν_3 имеется слабая линия, отнесенная к асим. вал. кол. C¹³O₂. Для пленок NaCl и NaI ν_2 появляется всегда как хорошо разрешенный дублет, причем интенсивности компонент

x. 1967. 22

примерно равны. Полагают, что дублет появляется в результате снятия вырождения в адсорбированном состоянии. Для CsCl и CsJ ν_2 расщеплена на 3 компоненты. Полагают, что в этих солях представлены две кристаллические структуры, имеющие различную адсорбцию. В результате на адсорбентах одной кристаллич. структуры ν_2 расщепляется, а другой — не расщепляется. Анализ формы полос ν_2 и ν_3 и их нечувствительность к изменению т-ры позволили сделать вывод, что в адсорбированном состоянии CO_2 не вращается. Я. Кимельфельд

CO₂

1966

42063r High-temperature spectral emissivities and total intensities of the 15- μ band system of CO₂. C. B. Ludwig, C. C. Ferriso, and L. Acton (Space Sci. Lab., Gen. Dyns. Convair, San Diego, Calif.). *J. Opt. Soc. Amer.* 56(12), 1685-92(1966)(Eng). Spectral-emissivity measurements of the 15- μ band of CO₂ were made at 1000-2300°K. The hot gas was produced in a supersonic burner, which used gaseous CO and O as propellants. Many "hot" transitions were observed which were identified through their Q-branches even when the spectral resolution of the spectrometer was not very high. The total intensity of the ν_2 -fundamental band system was detd. at the highest temps. and a value of $240 \pm 15\%$ cm.⁻¹/cm. at standard temp. and pressure was obtained in the present expt. which is in agreement with other measurements at room temp. The max. error resulting from the presence of the strong central Q-branch (at 670 cm.⁻¹) at a temp. of 2300°K. was estd., utilizing detailed line calcs. for the fundamental transition and band-model calcs. for the higher-order transitions. RCKX

C. A. 1967. 66. 10

CO₂

1966

6 Д259. Высокотемпературные спектральные излучательные способности и полные интенсивности системы полос CO₂ у 15 μ . Ludwig C. B., Ferriso C. C., Acton L. High-temperature spectral emissivities and total intensities of the 15- μ band system of CO₂. «J. Opt. Soc. America», 1966, 56, № 12, 1685—1692 (англ.)

При t -рах 1000—2300°K в области 1000—500 см^{-1} с разрешением 2—9 см^{-1} получены в абсолютных единицах спектры излучения молекулы CO₂ (колебание ν_2).

Рассчитаны средние значения коэф. поглощения Q -ветвей 16 полос, обусловленных переходами типа $0(\nu_2+1)^{l+1}0 \rightarrow 0\nu_2^l0$ и $1(\nu_2+1)^{l+1}0 \rightarrow 1\nu_2^l0$. Отмечается, что при t -ре 2300°K суммарная интенсивность Q -ветвей составляет ~16% от общей интенсивности системы полос ν_2 , равной $240 \pm 15\%$ см^{-2} при нормальных t -ре и давлении.

В. Байков

09.1967. 620

CO₂

Malkmus, Ludwig, 1966
and Ferriso.

J. Chem. Phys., 45, 3953.

Temperature dependence
of the total intensity of
difference band systems:
the 10 μ band system
of CO₂.

CO₂

ИК-спектр

№ 7 Д281. ИК-спектры пленок двуокиси углерода при косом падении света. Pandey Gopal Krishna, Chandra Suresh. On the matrix spectra of the HF molecule. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 11, 4369—4370 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения тонких пленок CO₂, осажденных на подложку при t -ре 53° K, в области фундаментальных колебаний ν_2 (650—680 см⁻¹) и ν_3 (2270—2400 см⁻¹). Спектры каждой пленки изучались при норм. падении светового пучка и при угле падения 40°. Основные полосы поглощения (654,5; 659,6; 2344,0 см⁻¹) не изменяются при увеличении угла падения от 0 до 40°; отмечено появление новых полос 678,3 и 2383,0 см⁻¹ при неперпендикулярном падении. Высказано предположение, что зависящие от угла максимумы объясняются продольными колебаниями. Получено удовлетворительное согласие эксперим. данных с частотами полос, вычисленными при этом предположении по ф-ле Веддера — Хорнига. Библ. 7. С. Бурейко

X. 1967. 7D

1966

CO₂

Peters D.

1966

J. Chem. Phys., 45; 3474.

Ionization energies of
some small molecules.

(Lit. CH₄) III

11-1963-100

№ 1966
Росле Т. А., Седат Т. А.

Т. Chem. Phys., 44, 13, 3289-3296.

Триблассная теория само
сбалансированных молекулярных
орбит. III. Результаты, полу-
ченные с помощью метода
ПНДП для систем AB_2 и AB_3 .

(или BH_3)

CO₂

Ron A.,
Shepp O.

1966

Israel J. Chem., 4, n 1a, 46.

Сенсор колебаний решетки
твёрдых N₂, CO₂ и CO.

(см. N₂) III

CO₂

1966

Molecular spectroscopy with a laser source: determination of the vibrational transition moment and of the vibration-rotation line widths of the $\nu_3-\nu_1$ transition of CO₂. Colette Rossetti and Pierre Barchewitz (Fac. Sci., Orsay, France). *Compt. Rend., Ser. A, B* 262B(18), 1199-202(1966)(Fr). Mol. spectroscopy with a laser source permitted a direct measure of the absorption coeff. of CO₂ for each vibration-rotation band of the laser transition. This method was applied to the transition 1000 $\rightarrow$ 0001. The absorption coeff. $\alpha = (1/L) \log (J_b/J_t)$ was obtained for each band: P_{24} , P_{20} , and R_{17} . Values of integrated absorption coeffs. $S_0 = 8\pi^3 \sigma_{v'J'}^2 / 3hc |R_{v'J'}|^2 [(N_{vJ}/g_{vJ}) - (N_{v'J'}/g_{v'J'})]$, (where the transition is $vJ \rightarrow v'J'$; N_{vJ} , $N_{v'J'}$, g_{vJ} , and $g_{v'J'}$ are populations and degeneracy degrees of vJ , and $v'J'$ levels; $\sigma_{v'J'}$ is the wave no.; and $|R_{v'J'}|$ is the matrixial element of elec. moment for the transition studied), were obtained under 1 atm. and at 300°K. The vibrational transition moment was deduced. Its value is in good agreement with those given in the literature. The widths of bands γ_0 were also obtained. A. R. Cambon

C.A. 1966. 65. 11

16265ab

CO₂

1966

Molecular spectroscopy with a laser source. Vibrational-rotational transition moment for the 00^01-10^00 transition of CO₂. Colette Rossetti, Francoise Bourbonneux, Robert Farrenq, and Pierre Barchewitz (Fac. Sci., Paris). *Compt. Rend., Ser. A, B* 262B(26), 1684-6(1966)(Fr). An earlier report (CA 65, 16265a) gave some results on the use of a mol. CO₂ laser for the detn. of the absorption coeff. at the center of the vibrational-rotational lines of the transition 00^01-10^00 of CO₂. Improved precision has allowed measurements to be made on all of the lines that can be obtained with the laser source used. The value of the absorption coeff. at the center of the lines P_{12} to P_{24} and R_{13} to R_{24} of the transition 10^00-00^01 of CO₂ has allowed the detn. of the collisional half-width, the integrated absorption, and the sq. of the vibrational rotational transition for each line. The results obtained lead to the detn. of the vibrational-rotational interaction factor.

G. W. Cleek

C.A. 1966. 65. 12

17898c

CO₂

(7)

BΦ - N 1632 - IV | 1966

Sjögren H.

K.T.H. - Avhandling, 1966,
N 213, 4 pp

M2015 - IV - BP

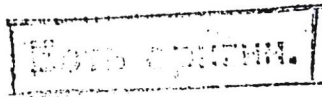
1966

CO₂ (A, P, O⁺)

Sjörge H.,

Arkiv. fys., 1966, 32, №6, 529-35,

Formation of carbon dioxide ions after electron and ion impact.



M , J

F¹

RJFiB1967

Dr. Smith Wm. Hayden, Leroi

1966

George E.

J. Chem. Phys., 45, 1784.

Корреляция элекτροонной
структуры и слововой констан-
ты всегда в некоторых мо-
лекулах.

★ Км 63/III

CO₂

1966

5 Д730. Вероятности переходов между уровнями CO₂ Statz H., Tang C. L., Koster G. F. Transition probabilities between laser states in carbon dioxide. «J. Appl. Phys.», 1966, 37, № 11, 4278—4284 (англ.)

Определены вероятности излучательных переходов между участвующими в генерации колебательными уровнями CO₂ путем диагонализации больших гамильтоновых матриц (до 30×30 членов). Необходимый для расчета дипольный момент найден сравнением теоретич. и эксперим. коэф. поглощения. Получено хорошее соответствие расчетных и измеренных ранее вероятностей переходов. Показано, что при рассмотрении времен релаксации излучательные процессы можно не рассматривать, т. к. вычисленные радиационные времена жизни для большинства колебательных уровней достаточно велики и релаксация, по-видимому, имеет место при столкновениях между молекулами.

И. Елькина

Ф. 1967. 52

CO₂

1966

8 Д235. Определение интегральной интенсивности полосы CO₂ около 15 μ . Varanasi P., Lauer J. L. A redetermination of the integrated intensity of the 15 micron bands of carbon dioxide. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1966, 6, № 1, 127—130 (англ.)

С помощью техники самоуширения (при давлении газа в оптич. ячейке до 10 атм) определена интегр. интенсивность полосы 15 μ двуокиси углерода при 300° К. Большое внимание обращено на устранение рассеянного света и определение геометрич. длины ячейки, т. к. точное измерение эффективного увеличения оптич. пути при повышении давления существенно для нахождения интегр. интенсивности. Рассмотрено изменение контура полосы с давлением. Полученное значение интегр. интенсивности составляет $200 \pm 10 \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$. Библ. 10 назв.
С. Бурейко

ф. 1966. 82

CO₂

1967

24 Б114. Определение момента колебательного перехода $00^{\circ}1 \rightarrow 00^{\circ}0$ для газообразного CO₂ из дисперсионных измерений. Arcas Philippe, Hochard — Demollière Lucette. Détermination du moment de transition vibrationnel pour la transition $00^{\circ}1 \rightarrow 00^{\circ}0$ du gaz carbonique par des mesures de dispersion. «C. r. Acad. sci.», 1967, 264, № 17, 1258—1260 (франц.)

На основании измерения дисперсии газообразного CO₂ в области $2400\text{--}2500\text{ см}^{-1}$ получено значение интенсивности основной полосы ν_3 , равное $2327 \pm 11\text{ см}^{-2}\text{ атм}^{-1}$, что на 10—15% ниже литературных данных, полученных непосредственными измерениями интенсивности. Подчеркивается, что метод позволяет получать значения интенсивностей, не зависящие от предположений о форме контура линий в колебательно-вращательной полосе. Библ. 11. Э. В. Б.

х. 1967. 24

CO₂

1967

(Ref. 100)

14235s Determination of numerical values of the rotational constant D_{eff} for the molecules $^{12}\text{C } ^{16}\text{O}_2$ and $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$. Andrade e Silva, Maria Helena (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Sci. Paris, Fr.). *Ann. Phys. (Paris)* 1967, [14] 2(4), 217-24 (Fr). In ir spectroscopy, high order energy corrections are needed for the interpretation of high resolu. vibration-rotation spectra. A theoretical study has been made of vibration-rotation spectra of linear mols., esp. CO₂. A rotational anal. was made of sym.

C.A. 1968. 69. 4

triat. mols. XY_2 with a Fermi resonance between the bands ν_1 and $2\nu_2$, esp. the CO_2 mol. The consts. B_{eff} and D_{eff} relative to the mols. XY_2 were calcd., with consideration of all of the energy corrections up to the 4th order. The coeffs. δ , δ' , β_1 , β_2 , and β_3 of the matrix elements from the r^3P^2 4th-order Hamiltonian operators were calcd. as functions of the mol. parameters. The differences $\Delta D_{calc.}$ between the values of D_{eff} relative to the upper and lower levels of the transition were calcd. for a large no. of transitions observed in the spectra of $^{12}C^{16}O_2$ and $^{13}C^{16}O_2$. The $\Delta D_{calcd.}$ were compared with published exptl. results. 15 references.

GRJF

CO₂

1987

3 Д199. Изучение перехода $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ N₂O. Влияние постороннего газа на колебательно-вращательный переход $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ в CO₂. Boutin Robert, Brulebois Daniel, Rossetti Colette. Etude de la transition $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ de N₂O. Influence d'un gaz perturbateur sur les largeurs des raies de vibration-rotation de la transition $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ de CO₂. «C. r. Acad. sci.», 1967, 265, № 3, B195—B197 (франц.)

Измерен коэф. поглощения в центре линий полосы $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ N₂O ~ 938 см⁻¹. Определен момент колебательно-вращательного перехода и полуширины при соударениях для каждой изучаемой линии. Изучено влияние различных искажений на ширины линий CO₂ для перехода $00^{\circ}1-10^{\circ}0$ в области 961 см⁻¹, что позволило сделать вывод об эффективном сечении соответствующих соударений. Резюме

9.1968. ЗД

⊠.

CO₂

N₂O

(конд.)

спектр
KP

20 Б177. Спектры комбинационного рассеяния поликристаллических CO₂ и N₂O. Cahill J. E., Treu-
il K. L., Miller R. E., Leroy G. E. Raman spectra of
polycrystalline CO₂ and N₂O. «J. Chem. Phys.», 1967, 47,
№ 9, 3678—3679 (англ.)

Получены низкочастотные спектры КР поликристаллич.
CO₂ и N₂O при т-рах 90 и 170° К. Спектры возбуждались
как ртутной лампой низкого давления, так и He—Ne-ла-
зером. В спектрах обоих соединений наблюдается по три
линии, которые при изменении т-ры смещаются в неболь-
ших пределах; при т-ре 170° К для CO₂ линии имеют ча-
стоты 70, 85 и 124 см⁻¹, а для N₂O 61, 71, 110 см⁻¹, соотв.
Линии отнесены к вращательным качаниям молекул в
элементарной ячейке. Сходство спектров еще раз под-
тверждает сходство св-в изоэлектронных молекул CO₂ и
N₂O. Несколько большая ширина линий в спектре N₂O
приписана неоднородности кристалла. А. Бобров



CO₂

XIV - 9796a

1967

M. P.

43360p Vibrational analysis of the $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ molecule. Alain Chedin and Zdenek Cihla (Fac. Sci., Paris). *Cah. Phys.* 21 (199-200), 129-11(1967)(Fr). The terms in the Hamiltonian considered up to the fourth order of approxn. are set out for calcg. the vibrational const. of the $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ mol. An analysis yields the B_{0000} , α_1 , α_2 , α_3 const., and the δ const. in the nondiagonal contribution of the third order of the form $J(J+1)\delta$, showing good general agreement between the exptl. and theoretical values for the vibration energies. Rhys Matthews

C.A. - 1968. 68.10

1967

C¹²O¹⁶
2
9/9/68
11/1

4 Д117. Колебательный анализ молекулы $C^{12}O_2^{16}$
Chedin Alain, Cihla Zdenek. Analyse vibration-
nelle de la molécule $^{12}C^{16}O_2$. «Cahiers phys.», 1967, 21
№ 199—200, 129—141 (франц.; рез. англ.)

В четвертом приближении составлена ф-ла для коле-
бательной энергии молекулы. Затем в эту ф-лу внесены
поправки, обусловленные резонансом Ферми. Для опре-
деления входящих в эту ф-лу параметров по спектро-
скопич. данным применен итерационный метод. Рассмотр-
ены случаи линейных и нелинейных зависимостей уров-
ней энергии от искоемых параметров. В расчете исполь-
зовано вычисление производных от энергии по
параметрам. В результате расчета определены нулевые
частоты, постоянные аугармоничности 2-го и 3-го поряд-

09.1968. 4

ков x и y и коэф. в ф-ле, выражающей матричный элемент возмущения через колебательные квантовые числа. Дана оценка погрешностей. Вычисленные с найденными постоянными значения энергии многих уровней очень близки к опытным значениям.

М. А. Ковнер

CO₂

Dibeler V. H.

Walker J. A.

1947

J. Opt. Soc. Amer., 57, ~ 8,
1007.

Масс-спектрометр. изыс-
ние фотомонохроматизма VI.

O₂, CO₂,  COS и CS₂

(см. O₂) III

CO₂

Richardt H.,
Kresling A.

1964

I
D.

Z. Naturforsch., 22a, n 12,
2036.

Диссоциативная иониза-
ция N_2 , O_2 , H_2O , CO_2 и
прана.
(см. N_2) III

CO₂

1987

25218u Relative intensity calculations for carbon dioxide.
III. Relative line intensities of transitions from the vibrational
ground state for temperatures from 160° to 280°K. L. D. Gray.
(Jet Propulsion Lab., Pasadena, Calif.). *J. Quant. Spectrosc.
Radiat. Transfer.* 7(5), 795-803(1967)(Eng); cf. CA 63: 1347g.
Rotational line intensities, relative to the integrated intensity of a
vibration-rotation band, are tabulated from 160 to 280°K. at
intervals of 20°K. These tables are intended to cover the temp.
range of interest for the atm. of Earth and Mars. RCHR

C.A. 1988. 68.6

1967

CO₂

91576f Absorption and emission spectra of carbon dioxide at 4.3 microns. Hahn, Yu Hak (Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). 1967, 106 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 68-8700. From *Diss. Abstr. B* 1968, 29(1), 338. SNDC

chem

C.A. 1968-69-22

CO₂

1967
6 Б130. Флуоресценция с третьего колебательного уровня двуокиси углерода. Houghton J. T. Fluorescence from the ν_3 vibration of carbon dioxide. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 91, № 2, 439—448 (англ.)

Исследована флуоресценция (Ф) с третьего колебательного уровня (2349 см^{-1}) CO₂. Время релаксации при дезактивации соударением для этого уровня измерено при помощи модуляции возбуждающего излучения $4,3 \text{ м}$ с частотой 350 или 750 гц и наблюдением фазового сдвига между возбуждающим сигналом и Ф. В случае CO₂—CO₂ соударений при $t \sim 290^\circ \text{ К}$ и давлении 1 атм время релаксации равно $7 \pm 1 \text{ мсек}$. Относительная эффективность дезактивации соударениями CO₂—Ar по сравнению с CO₂—CO₂ равна $0,09 \pm 0,03$. Величина интенсивности Ф хорошо согласуется с полученной из теоретич. расчета для уширенных давлением линий поглощения.
О. Г. Гаркуша

X. 1968. 6

1967

Cinnabar

nocturnal

CO₂

108401h Correlation of force constants with bonding in the dichalcogenides of carbon. Llewellyn H. Jones (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *Inorg. Chem.* 6(2), 29-30(1967) (Eng). For XCR mols. where X, R equals O, S, Se, and Te there are 10 possible species. A general expression for the interaction consts. in terms of primary force consts. was derived with the following hypotheses. For XCR any change in the CX bond order gives a proportional change of opposite sign for the CR bond order independent of R. The proportionality const., γ , is the same for all X. A small change in bond order causes a proportional change of opposite sign in bond length and vice versa. The proportionality const. depends on the atoms involved. The harmonic frequencies of the 10 species were calcd. from γ and the approx. values for the primary stretching force consts. The calcd. and observed harmonic frequencies agree well. DWJN

+10

C.A. 1967. 66. 24



мономеры

+ сеп. нос.

CO_2 , CS_2 , CSe_2 , CTe_2

OCS , OCSe , OCTe

SCSe

SCTe , SeCTe

1967

CO₂ ω_3^0, x_{33}^0 y_{333}

73641y Infrared emission of CO₂-N₂ and CO₂-N₂-He plasmas. T. K. McCubbin, Jr., and Yu. Hak Hahn (Pennsylvania State Univ., University Park). *J. Opt. Soc. Amer.* 57 (11), 1373-5(1967)(Eng). A high-resoln. spectroscopic study has been made of the emission in the 4.3- μ region of elec. excited CO₂-N₂ and CO₂-N₂-He plasmas. CO₂-rich plasmas emit an intense spectrum in which *P*-branch and low-*J* *R*-branch lines appear in absorption. The *R*-branch band heads ($J \cong 120$) appear as emission features in such spectra and there is a region of mixed absorption and emission. CO₂-N₂ plasmas which would sustain laser oscillations in a suitable cavity exhibit emission lines and derive most of their intensity from the fundamental and four hot bands of the naturally abundant CO₂ isotope. With the mixt. ratio and pressure carefully adjusted, the CO₂-N₂-He plasma emits lines of the 00⁰3-00⁰2 and 00⁰2-00⁰1 bands. Bands from ¹³C¹⁶O₂, ¹³C¹⁶O¹⁸O, and ¹³C¹⁸O¹⁸O, which are prominent in the CO₂ absorption spectra, do not appear in the plasma spectra. The mol. const. ω_3^0 , x_{33}^0 , and y_{333} are derived from bands in the 00 v_3 -00(v_3-1) sequence. RCKX

C.A. 1968. 68. 16

CO₂

1967

10 Д100. Изучение линейных растяжений в полиатомных молекулах: точные самосогласованные МО волновые функции для CO₂ и BeF₂. Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J., Whitten Jerry L. Study of linear stretch in polyatomic molecules: accurate SCF MO wavefunctions for CO₂ and BeF₂. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 5, 1707—1716 (англ.)

Точные самосогласованные МО расчеты были проведены для CO₂, BeF₂ и различных AN₂ и AN₃ молекул с целью изучения поведения различных энергетич. характеристик в зависимости от межъядерных расстояний. Кривая, соответствующая сумме орбитальных энергий, имеет минимум при гораздо более коротких расстояниях, чем кривая полной энергии. Т. обр., сумма валентных орбитальных энергий не дает представления о правильном равновесном расстоянии, хотя и правильно указывает равновесные углы.

М. А. Долгушин

+1

09.1967. 10

☒

CO₂

1967

Д151. Важность квадратичных силовых постоянных для расчета Ферми-резонанса. Reichman, Sander, Overend John. Importance of quadratic force constants in Fermi resonance. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 4, 1525—1530 (англ.)

сим. пост.

Проведены вычисления кубич. силовых постоянных норм. координат, определяющих величину связи между двумя резонирующими состояниями при ферми-резонансе, в некоторых простых типичных случаях: для молекул CO₂, N₂O, ClCN, BrON, HOD, D₂O и некоторых атомных групп. При вычислениях использовалось представление кубич. силовой постоянной норм. координат через квадратичные и кубич. силовые постоянные внутренних координат (координат растяжений валентных связей и деформаций валентных углов), причем связь норм.

ф. 1968. 28

18

координат с внутренними была нелинейной. Результаты вычислений приводятся в таблицах. Обнаружено, что основной вклад в кубич. силовую постоянную, определяющую величину ферми-резонанса, вносят квадратичные валентные силовые постоянные, а квадратичные деформационные и кубич. постоянные валентного и деформационного взаимодействий дают намного меньшие вклады. Этот факт позволяет предсказывать величину ферми-резонанса из знаний только квадратичных валентных силовых постоянных, которые известны для большого числа молекул. Обсуждается возможность распространения полученных выводов на большие молекулы.

В. А. Морозов

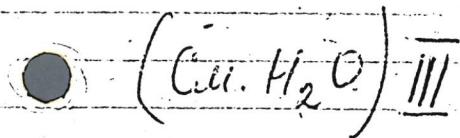
CO₂

Segal G.A., Klein M.L.

1967

J. Chem. Phys., 47, N10, 4236

Структурное исследование
в ИК-спектрах по
методу CNDO.



CO₂

Spurling T.H.
Mason E.A.

1964

J. Chem. Phys., 46, N1, 322

Определение квадратурных
моментов молекулы
из коэффициента вязкост-
ти и второго вириаль-
ного коэффициента.



(см. O₂ III)

CO₂

Вар - М 23.50 - IV

1967

10 Д273. Множители Франка — Кондона при ионизации: использование молекулярной фотоэлектронной спектроскопии. II. Turner D. W., May D. P. Franck — Condon factors in ionization: experimental measurement using molecular photoelectron spectroscopy. II. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 3, 1156—1160 (англ.)

С помощью 180° магн. анализатора скоростей электронов исследована тонкая колебательная структура молекулярных фотоэлектронных спектров, возбужденных фотонами резонансной линии He ($h\nu=21, 21$ эв) в молекулах CO₂, COS, CS₂ и N₂O. Выполнено полное колебательное отнесение всех полос CO₂ и N₂O и для двух полос COS. Определены эксперим. значения множителей

09.1967.10

18

Франка — Кондона для ионизации из уровней, лежащих у CO_2 и N_2O выше 21,21 эв; для двух состояний CO_2^+ (X и A) произведено сравнение полученных величин с расчетными значениями. В молекуле COS проанализировано одно (C) состояние; у CS_2 тонкой структуры разрешить не удалось. Вычислены значения вертикальных ионизационных потенциалов для всех уровней. Библ. 1; Ч. 1 см. РЖФиз, 1967, 8Д177. С. 17

CO₂

Вар - 2350 - М IV

1967

3 Б96. Коэффициенты Франка — Кондона в процессах ионизации: экспериментальное измерение с применением молекулярной фотоэлектронной спектроскопии. II. Tur-
per D. W., May D. P. Franck — Condon factors in ionization: experimental measurement using molecular photoelectron spectroscopy II. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 3, 1156—1160 (англ.)

Для выяснения тонкой колебательной структуры молекулярных фотоэлектронных спектров, возбуждаемых фотонами резонансной линией гелия ($Rv=21,21$ эв) в молекулах двуокиси углерода, сульфокиси углерода, сероуглерода и закиси азота, использован ранее описанный скоростной электронный анализатор с 180° отклю-

Х. 1968. 3

IX

нием магнитного поля. Экспериментально определены коэффициенты Франка—Кондона для случаев ионизации с уровней CO_2 и N_2O , лежащих выше 21,21 эв; для двух состояний (X, A) иона CO_2^+ экспериментальные данные сравнены с расчетными. В случае COS анализ приведен только для одного состояния (C); в CS_2 детальная структура не достигается нужной степенью разрешения. Для всех этих уровней определены значения вертикальных потенциалов ионизации. Сообщ. I. см. РЖХим, 1967, 18Б104.

Резюме

CO₂

1967

6 Д397. Влияние температуры на ближний ИК-спектр поглощения молекул в конденсированном состоянии. I. Двуокись углерода. Waggener W. C., Weinberger A. J., Stoughton R. W. Effects of temperature on the near-infrared absorption spectra molecules in the condensed states. I. Carbon dioxide. «J. Phys. Chem.», 1967, 71, № 13, 4320—4325 (англ.)

Изучены ИК-спектры (1,2—2,5 μ) жидкого CO₂. В указанной области спектра обнаружены 13 полос поглощения. Все эти полосы в спектре разреженного газа характеризуются *D*-, *Q*-, *R*-вращательной структурой и являются парал. полосами. При переходе CO₂ из газообразного состояния в жидкое *P*- и *R*-ветви смещаются к центру полосы и совмещаются с *Q*-ветвью, в результате чего интенсивность в максимуме полосы резко возрастает. Все полосы отнесены. Получена температурная зависимость спектра в области 1,19—1,66 μ в интервале

ср. 1968. 68

т-р от -80 до 60° . Спектр CO_2 в твердом состоянии снимался для двух точек: -80° , $0,9 \text{ атм}$ и $-56,6^\circ$, $5,1 \text{ атм}$ (тройная точка). Спектр CO_2 в жидком и газообразном состояниях измерялся для ряда точек в интервалах тройная точка — критич. точка ($31,1^\circ$, $72,9 \text{ атм}$) и критич. точка — 65° , 136 атм соответственно. Измерены зависимости полуширин полос ($\Delta\nu_{1/2}$) от т-ры. С ростом т-ры до 0° величина $\Delta\nu_{1/2}$ возрастает на $25-75\%$ и при 65° — на $200-400\%$. Показано, что полоса $1,6 \text{ м}$ в спектре жидкого CO_2 во всем интервале т-р имеет форму, описываемую ф-лой Лорентца, что говорит о том, что молекулы CO_2 в конденсированном состоянии не образуют ассоциатов и, по-видимому, участвуют в случайных, заторможенных вращательных движениях. Обнаружено, что интегр. интенсивность полос (221) и (141) изменяется нелинейно в зависимости от т-ры и плотности от $0,2\%/град$ в тройной точке до $5\%/град$ в критич. точке. Обнаружено также, что интенсивность полос возрастает с ростом т-ры и уменьшением плотности.

И. В. Кумпаненко

CO₂

1967

1 Б169. Определение силы уширенных давлением полос CO₂ в области 15 μ методом цифрового интегрирования спектров. Wolk Martin. The strength of the pressurebroadened CO₂ bands at 15 microns by digital integration of spectra. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1967, 7, № 1, 1—5 (англ.)

Значение силы полосы CO₂ для интервала 590—800 см^{-1} найдено равным $225 \pm 7 \text{ см}^{-1}/\text{атм}$ при величине оптич. пути от 0,004 до 0,08 $\text{атм} \cdot \text{см}$., давлении 57 атм , t -ре 25° с использованием N₂ в качестве уширяющего агента. При определении систематич. ошибок измерения вводилась поправка на адсорбцию. Экспериментальные значения пропусканий получались в цифровой форме и интегрировались с помощью вычислительной машины при шаге интегрирования 0,1 см^{-1} . Автореферат

x. 1968. 1

CO₂

1987

7 Б118. Внутримолекулярный обмен колебательной энергией в CO₂. Yardley James T., Moore C. Bradley. Intramolecular vibraton—to—vibration energy transfer in carbon dioxide. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 11, 4491—4495 (англ.)

Измерена скорость затухания флуоресценции молекул CO₂, возбужденных в состояние (00°1) (антисимметричное деформационное колебание) излучением газового лазера на CO₂. По наклону кривой интенсивности определено время (и вероятности) колебательной дезактивации молекул CO₂ в смеси с CO₂, He³, He⁴, Ne, Ar, Kr и Xe. Интенсивность дезактивации слабо зависит от массы парт-

X. 1968. 7

нера по столкновению, достигая максимума при условии $\Delta E/n\tau \sim 1$, где ΔE — разность энергий колебательных уровней, а τ — продолжительность столкновения. Для объяснения полученных результатов автор использует теорию колеблющихся сфер в варианте Танзоса (РЖФиз, 1957, 7, 16900). Согласно с экспериментом удается получить лишь в том случае, если учесть смешивание колебаний (волновых функций) молекулы CO_2 за счет ангармоничности и кориолисова взаимодействия.

При этом среди всех возможных каналов дезактивации наибольшей вероятностью отмечен процесс $(00^01) \rightarrow (11^10)$. Измеренная вероятность дезактивации в чистом CO_2 примерно на порядок меньше вероятности дезактивации при столкновении молекулы CO_2 с атомами инертных газов. Отмечается, что для метана наблюдается противоположная зависимость.

А. И. Осипов

CO₂

Yonekawa T., Yamaguchi K., Kato H. 1987

Chem.

Bull. Soc. Japan, 40, n3,
536.

После химического рас-
соединения смеси
валентных электро-
нов и молекул само-
согласованных моле-

кулярыных орбиталей.
I. Массовые моменты

(сое. СВЧ)

CO₂

Do

Yoshimine M.,
McLean A.D.

1967

Int. J. Quantum. Chem.,
Symp. 1967 (N1)

(see. LiF)

III

CO_2

Абсар Т.

1968

расчет
флуктур.
суп-ро

Диссертация 1968г., 117 стр.

N 69-9303

Diss. Abstr.,

B, 1969, 29, N 12, 4607

HCNO

HCN

$\text{NCO}, \text{CO}_2^+$



CO₂

7 Д165. Определение численных значений вращательной постоянной для молекул $C^{12}O_2^{16}$ и $C^{13}O_2^{16}$. Andrade e Silva Maria Helena. Détermination des valeurs numériques de la constante rotationnelle D_{eff} pour les molécules $C^{12}O_2^{16}$ et $C^{13}O_2^{16}$. «Ann. phys.», 1967(1968), 2, № 4, 217—224 (франц.)

М.И.

Эффективные значения вращательных постоянных $B_{эф}$ и $D_{эф}$ линейной молекулы выражаются через поправки 3- и 4-го порядков к колебательно-вращательной энергии. Приводятся ф-лы зависимости этих поправок от нулевых частот, постоянных анагармоничности, коэф. β в разложении D_v по колебательным квантовым числам v и от квантовых чисел l, v . Составлена таблица численных значений этих молекулярных постоянных, для $C^{12}O_2^{16}$ и

09. 1968. 7 Я

$\text{C}^{13}\text{O}_2^{16}$. Для многих уровней, участвующих в резонансе Ферми, l -резонансе и резонансе Куртуа, вычислены разности $D_{\text{эф}} - D_{000}$. D_{000} относится к фундаментальным уровням и принимает значения $13,5 \cdot 10^{-8}$ и $13,7 \cdot 10^{-8} \text{ см}^{-1}$ для двух молекул. Такие же разности вычислены в приближении, в котором значения β принимаются равными нулю. Вычисленные разности сравниваются с их опытными значениями. Расхождения находятся в пределах ошибок измерений.

М. А. Ковнер

1968

CO₂

Корр. 1001

10 Д285. Интенсивность полос CO₂ в области 1,6 м.
 Boese R. W., Miller J. H., Inn E. C. Y., Givert L. P. Intensity of the 1.6 μ bands of CO₂. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1968, 8, № 3, 1001—1011 (англ.)

Проведены количеств. измерения интенсивности и полуширины для ~30 линий каждой из четырех полос C¹²O₂¹⁶ в области 1,6 м. Полные интенсивности полос, полученные из интенсивностей линий для (30°1)_I, (30°1)_{II}, (30°1)_{III}, (30°1)_{IV}, соответственно равны 127, 1050, 1070 и 122 см⁻¹ км⁻¹ атм⁻¹ при стандартных т-ре и давлении. Наблюдаемое распределение интенсивностей вращательных линий полосы (30°1)_{III} немного откло-

99. 1968. 102

няется от больцмановского распределения. Удовлетворительное объяснение наблюдаемому распределению дано на основе слабого колебательно-вращательного взаимодействия. Ширина линий полосы $(30^{\circ}1)_{IV}$ на 50% больше, чем ширина линий остальных трех полос. Наблюдалось изменение ширины линий в зависимости от вращательного квантового числа. Приведены спектры сравнения наблюдаемой и расчетной интенсивностей для некоторых линий каждой из полос. М. В. Дедюлина

1968

C¹²O₂ 18
2

2 Б189. Инфракрасный спектр C¹²O₂¹⁸. Chackeri-
an Charles, Jr, Eggers David F., Jr. The infrared
spectrum of ¹²C¹⁸O₂. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 27,
№ 1—4, 59—71 (англ.)

В области 2000—5000 см⁻¹ исследованы вращ.-кол.
ИК-спектры поглощения молекул C¹²O₂¹⁸ (8 полос) и
C¹³O₂¹⁸ (2 полосы). Из анализа этих полос определены
значения ν_0 , B' , B'' — постоянных, а для нек-рых полос
также значения D' — постоянной (при анализе принима-
лось $D'=D''$ или $D'=D''=0$). А. Александров

л. 1969. 2

CO₂

1Д338. Обнаружение ионизации, преионизации и конверсии внутренней энергии в CO₂, COS и CS₂ с помощью фотоэлектронной спектроскопии. ~~Colt~~ Jacques E., Natalis Paul. Ionization, preionization and internal energy conversion in CO₂, COS and CS₂ by photoelectron spectroscopy. «Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.», 1968, 1, № 2, 121—132 (англ.)

В связи с зависимостью сечения фотоионизации от энергии фотонов произведено сравнение фотоэлектронных спектров, полученных с разными источниками облучения. При сопоставлении спектров CO₂, COS и CS₂, возбуждаемых излучением резонансных линий гелия, неона и аргона, обнаружены новые слабые полосы, обусловленные преионизацией. Предлагаемый механизм появления полос связан со сверхвозбужденными состояниями; далее, при внутренней конверсии происходит каскадное заселение автоионизационных состояний, проявляющихся в спектре. Существование такого процесса подтверждается наблюдаемой зависимостью интенсивности автоионизационных полос от давления газа. Библи. 21.

Спектры

1968

(+2)

AT

Ф. 1974 № 1

CO₂, COS
CS₂
(Y)

+ 2ms

E.A. 1968. 69. 16.

(63282p) Ionization, preionization, and internal energy conversion in carbon dioxide, carbon oxysulfide, and carbon disulfide by photoelectron spectroscopy. Collin, Jacques E.; Natalis, Paul (Univ. Liege, Liege, Belg.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1968, 1(2), 121-32 (Eng). Photoelectron spectra for CO₂, COS, and CS₂ were recorded. The expts. were performed with 3 different monochromatic resonance lines: the 584-A. (21.21-ev.) line of He, the 736-744-A. (16.83-16.65-ev.) doublet of Ne, and the 1048-1067-A. (11.82-11.61-ev.) doublet of Ar. For CO₂ (1st *IP* = 13.78 ev.), only He and Ne sources were used. As a general result, certain ionization processes not detected with the 584-A. radiation could be observed either with the Ne or Ar lines. In CO₂, COS, and CS₂ many direct photoionization processes are detected. The use of the various light sources revealed ionization processes not reported previously. The new processes may be explained by assuming that the mols. are 1st superexcited and then decay from 1 superexcited state to another by internal conversion without fluorescence till they reach very short-lived preionized states from which autoionization takes place. The internal conversion occurs easily since a considerable pressure effect is observed. 31 references.

JDJN

1968



CO₂

1968

1 Б142. Исследование процессов ионизации, преионизации и конверсии внутренней энергии в CO₂, COS и CS₂ с помощью фотоэлектронной спектроскопии. Collin Jacques E., Natalis Paul. Ionization, preionization and internal energy conversion in CO₂, COS and CS₂ by photoelectron spectroscopy. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1968, 1, № 2, 121—132 (англ.)

спектр

Изучены фотоэлектронные спектры CO₂, COS, CS₂ при возбуждении излучением He-I и Ne-I. Энергии ионизации валентных уровней хорошо согласуются с данными, полученными др. физ. методами. При использовании излучения Ne-I обнаружены доп. максимумы с энергией 14,65 эв в CO₂, 12,33 и 13,53 эв в COS и 11,0 эв в CS₂. Доп. максимум в случае молекулы CO₂ объяснен первоначальным образованием сверхвозбужденного состояния $^2\Pi_g$ CO₂⁺ с колебательной энергией 2,8 эв в результате поглощения кванта излу-

(+3)

☒

X. 1974. M

чения Ne-I. Это состоит в том, что непосредственно или через автоионизационный уровень с энергией 15,75 эв переходит в состояние 2P_g СО с колебательной энергией 0,75 эв. Эмиссия фотоэлектронов с энергией 2 эв наблюдается в виде максимума в фотоэлектронном спектре с энергией 14,65 эв. Аналогичным образом объяснены остальные добавочные максимумы фотоэлектронного спектра.

В. И. Нефедов

¹²¹⁸
CO₂

1968

8 Д274. ИК-спектр C¹²O₂¹⁸. Chackerian Charles, Jr. Eggers David F., Jr. The infrared spectrum of ¹²C¹⁸O₂. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 27, № 1—4, 59—71 (англ.)

Получен ИК-спектр C¹²O₂¹⁸ в области 2000—5000 см⁻¹. Наблюдено восемь колебательно-вращательных полос C¹²O₂¹⁸ и две C¹³O₂¹⁸ при разрешении 0,3—0,6 см⁻¹. Приведено обсуждение полученных из анализа вращательных постоянных. Библ. 9. Резюме

ф. 1969. 8А

CO₂

1968

· 8 Д191. Масс-спектрометрия на основе последовательных электронных столкновений. III. Ионы и осколки из CO₂ и CS₂. Cuthbert J., Farren J., Prahallada Rao B. S., Preece E. R. Sequential mass spectrometry. III. Ions and fragments from carbon dioxide and

оп. 1968. 8А

17

disulphide. «J. Phys. (Proc. Phys. Soc.) [formerly «Proc. Phys. Soc.», 1968, В 1, № 1, 62—70 (англ.)

С помощью ионной ловушки, создаваемой объемным зарядом ионизирующих электронов, изучались столкновения медленных молекул CX_2 (CO_2 или CS_2) с электронами, приводящие к образованию CX_2^{2+} , CX^+ , C^+ и X_2^+ , X^+ . Ионы X^+ образуются также из атомов X , возникающих при диссоциации молекул CX_2 на горячем катоде. Определены потенциалы двукратной ионизации CS_2 и CO_2 , равные соответственно $25,5 \pm 0,3$ эв и $36,3 \pm 0,5$ эв. Потенциал появления S_2^+ из CS_2 равен $18,2 \pm 0,3$ эв в согласии с величиной, ожидаемой из значения потенциала ионизации S_2 , равного $10,8 \pm 0,3$ эв. Приводятся относит. вероятности переходов для 19 наблюдаемых процессов. Ч. II см. РЖФиз, 1967, 12Д215.

Г. К.

CO_2

1968

Dibeler V.H.,
Walker J.A.

протокол
записи;
 D_0^0

Advances Mass Spect
rom. Vol 4, London,
1968, 767.

(Cis. O_2) III

CO₂, CS₂, SO₂ (Y)

1968

(Y: uoist)

63292s Photoelectron spectra and ionic structure of carbon dioxide, carbon disulfide, and sulfur dioxide. Eland, J. H. D.; Danby, C. J. (Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1968, 1(2), 111-19 (Eng). Photoelectron spectra of CO₂, CS₂, and SO₂ excited by 584-A. radiation have been measured at a resoln. of 20 mv. over the whole energy range. Ionization potentials, vibration frequencies of the ions, and relative vibrational transition probabilities are presented for CO₂ and CS₂ and are used to derive structural information about the ionic states. A vibrational anal. of the photoelectron spectrum of SO₂ leads to est. of the ionic geometry in different states and to the conclusion that $d-\pi$ bonding is effective in one of the $4b_2$ or $1a_2$ orbitals. IDJN

(+2nd)

C. A. 1968 69: 16

[X]

1962

CO₂фотоэл.
спектры

I; VI; гол.

(42)

S

ф1974/2

2 Д355. Фотоэлектронные спектры и структура ионов CO₂, CS₂ и SO₂. Etanp J. H. D., Danby C. J. Photoelectron spectra and ionic structure of carbon dioxide, carbon disulphide and sulphur dioxide. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1968, 1, № 2, 111—119 (англ.)

Фотоэлектронные спектры CO₂, CS₂ и SO₂, возбуждаемые резонансным излучением HeI 584 Å, записаны с разрешением 20 мэв в области энергии до 20 эв. Определены потенциалы ионизации, колебательные частоты и относит. вероятности возбуждения различных колебательных уровней для ионов CO₂⁺ и CS₂⁺ и рассчитана геометрия ионов в возбужденных состояниях. Проведен анализ структуры более сложного спектра SO₂, состоящего в основном из 3 полос: 12,305; 13,01 и 15,986 эв, каждая из которых образована двумя ионизационными переходами. Максимум при 16,73 эв, по-видимому, обусловлен диссоциацией с образованием SO⁺ или S⁺. Обсуждаются структура возбужденных состояний иона и свойства молекулярных орбиталей исходных молекул.

В. А.

Библ. 13.

1968

CO₂коэф.
поглощ.

19 Б216. Определение интенсивности полосы CO₂ у 667 см⁻¹ из спектров низкого разрешения. H a r - ward C. N., P a t t y R. R. Low-resolution determination of the strength of the 667-cm⁻¹ CO₂ band. «J. Opt. Soc. Amer.», 1968, 58, № 2, 188—191 (англ.)

В области 610—730 см⁻¹ получены спектры поглощения смесей CO₂÷N₂ при оптич. толщинах от 0,00773 до 0,2063 атм·см и общих давлениях смеси до 13 атм. Для уменьшения ошибок, вызванных адсорбцией и десорбцией CO₂, измерения поглощения проведены при непрерывном потоке предварительно смешанных газов через кювету. Получены кривые спектрального хода коэф. поглощения в P-, R- и Q-ветвях полосы CO₂ и определено значение интегральной интенсивности полосы, равное $240 \pm \pm 20$ см⁻² атм⁻¹ при стандартных условиях. Обсуждены данные других работ по измерению интенсивности полосы ν_2 молекулы CO₂.

К. Василевский

X. 1968. 19

CO₂

Kesh. 1102

1968

82718f Low-resolution determination of the strength of the 667-cm.⁻¹ carbon dioxide band. C. N. Hayward and R. R. Patty (North Carolina State Univ., Raleigh, N.C.). *J. Opt. Soc. Amer.* 58(2), 188-91(1968)(Eng). A different exptl. technique involving continuous flow of premixed samples through a 1.25-cm. absorption cell was used to det. the strength of the 667-cm.⁻¹ region of CO₂; a value of 240 ± 20 (atm.-cm.)⁻¹ cm.⁻¹ was obtained. Plots of absorption coeff. vs. frequency are presented and compared with results of other investigators; the interval over which absorption is significant differs from some recently published results. The contribution of the Q branch to the strength is estd. and compared with theoretical calcs.

RCKX

C.A. 1968. 68.18

CO₂

1968

Q28492e Thermophysical properties of carbon dioxide in the near-critical range. Kessel'man, P. M.; Kotlyarevskii, P. A.; Kamenetskii, V. R. (USSR). *Tr. Vses. Nauch.-Tekh. Konf. Termodin., Sb. Dokl. Sekts. "Termodin. Fazovyykh Perekhodov, Poloka Neobratimyykh Protseessov"* "Teplofiz. Svoistva Veshchestv," 3rd 1968 (Pub. 1970), 365-71 (Russ). Leningrad. Tekhnol. Inst. Kholod. Prom.: Leningrad, USSR. Values of the sp. vol., enthalpy, entropy, isobaric sp. heat c_p , viscosity, and thermal cond. were calcd. and are given in tables for 300-20°K and 60-80 bars with accuracies of 1%, 4-5 kJ/kg, 0.3-0.5%, 3-7%, 1-3%, and 2-3%, resp. J. Pietkiewicz

Cp
S°
H_T - H

C.A. 1972. 76. 6

CO₂

1968

7) 8 Д175. Абсолютные сечения ионизации и возбуждения CO₂ электронным ударом. McConkey J. W., Burns D. J., Woolsey J. M. Absolute cross sections for ionization and excitation of CO₂ by electron impact. «J. Phys. (Proc. Phys. Soc.) [formerly «Proc. Phys. Soc.»], 1968, В 1, № 1, 71—76 (англ.)

С помощью пересекающихся молекулярного и электронного пучков измерены абс. сечения ионизации с возбуждением молекулы CO₂ электронным ударом. Измерялись абс. интенсивность излучения полос переходов из возбужденных состояний иона CO₂⁺ A²Π_u⁺ и B²Σ_u⁺ в основное X²Π_g⁺ и относит. интенсивности переходов между различными колебательными уровнями. Для ка-

ф. 1968. 8А

либровки использовалось известное сечение перехода N_2^+ с длиной волны 3914 Å. Максим. значения сечений ионизации с возбуждением, наблюдавшиеся при энергии электронов 160 эв, оказались равными $22,4 \times 10^{-18}$ и $74,4 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$, соответственно для состояний $B^2\Sigma_u^+$ и $A^2\Pi_u^+$. Найдено, что ф-ции возбуждения указанных состояний CO_2^+ подобны кривой зависимости полного сечения ионизации CO_2 от энергии и что примерно 1/5 и 1/15 всех ионов образуется в состояниях $^2\Pi$ и $^2\Sigma$.

Ю. Н. Беляев

CO₂

Murphy J. S.,
Bogg J. S.

1968

J. Chem. Phys., 49(8), 3333

измерения
моделей

(see. OCS) III

1968

43914j High-resolution vibration-rotation spectra of polyatomic molecules. Nielsen, Harald H.; Rao, K. Narahari (Ohio State Univ. Res. Found., Columbus, Ohio). *U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform.*, AD 1968, AD-683339, 107 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rep.* 1969, 69(9), 75. Detailed studies were conducted on the rotational structure of the ir bands of linear mols., sym. tops, and asym. rotors by employing high resolu. and high precision ir equipment. The specific mols. dealt with are CO_2 , H_2O , C_2H_2 , AsH_3 , HF , and DF . Usefulness of the results obtained for interpretation of the water vapor laser emissions was recognized. Some of the lab. spectra also play a significant role in the understanding of the high resolu. ir spectra of planets. The techniques developed in the identification and interpretation of overlapping bands which normally occur in the ir region were highly successful. The computer programs developed are also of use in processing speedily high resolu. ir spectra of small mols.

TCVL

+5

C.A. 1969. 71.10



CO₂

И. К. Сива

колебат.
уровни

XIV - 9724

1968

22 Б180. Полосы поглощения двуокиси углерода в области 4,3 м. Oberly Ralph, Rao K. Narahari, Hahn Y. H., McCubbin T. K., Jr. Bands of carbon dioxide in the region of 4,3 microns. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 25, № 2, 138—165 (англ.)

Измерены полосы поглощения двуокиси углерода в области 4,3 м. Наблюдаемые полосы отнесены к основным колебаниям ν_3 четырех изотопич. модификаций исследуемого соединения. С использованием полученных данных определены мол. константы двуокиси углерода. Результаты дают новые критерии для идентификации колебательных уровней CO₂.

Резюме

X. 1968 - 22

CO₂

Culliff

118173r Bands of carbon dioxide in the region of 4.3 microns. Ralph Oberly, K. Narahari Rao, Y. H. Hahn, and T. K. McCubbin, Jr. (Ohio State Univ., Columbus). *J. Mol. Spectrosc.* 25(2), 138-65(1968)(Eng). The high resolu. spectrum of CO₂ was obtained in the ν_3 region at 4.3 μ . For the ¹²C¹⁶O₂ mol., the following mol. consts. were obtained (vibrational transition, ν_0 (cm.⁻¹); $(B' - B'') \times 10^3$ (cm.⁻¹), $(D' - D'') \times 10^3$ (cm.⁻¹) given): 00⁰1-00⁰0, 2349.142, -307.8 $\pm$ 0.3, -0.05 $\pm$ 0.05; 01¹c1-01¹c0, 2336.633 $\pm$ 0.003, -304.4 $\pm$ 0.5, 0.0 $\pm$ 0.1; 01¹d1-01¹d0, 2336.633 $\pm$ 0.003, -306.4 $\pm$ 0.5, 0.0 $\pm$ 0.1; 02²c1-02²c0, 2324.142 $\pm$ 0.005, -302.3 $\pm$ 1.0, + 0.6 $\pm$ 0.6; 02²d1-02²d0, 2324.142 $\pm$ 0.005, -302.3 $\pm$ 1.0, + 0.6 $\pm$ 0.6; 10²-10⁰0, 2326.600 $\pm$ 0.006, -312.8 $\pm$ 1.0, —; 02⁰1-02⁰0, 2327.434, -298.0 $\pm$ 1.0, —. For the ¹²C¹⁶O¹⁸O mol., these consts. are 00⁰1-00⁰0, 2332.115 $\pm$ 0.006, -291.0 $\pm$ 1.0, —. The consts. obtained for ¹³C¹⁶O₂ are 00⁰1-00⁰0, 2383.490 $\pm$ 0.004, -296.3 $\pm$ 1.0, —; 01¹c1-01¹c0, 2271.764 $\pm$ 0.005, -292.8 $\pm$ 1.0, —; 01¹d1-01¹d0, 2271.764 $\pm$ 0.005, -293.6 $\pm$ 1.0, —. For the ¹³C¹⁶O¹⁸O mol., the consts. are 00⁰1-00⁰0, 2265.973 $\pm$ 0.010, -275.8 $\pm$ 0.7, —.

W. J. Lafferty

1968

C.A. 1968. 68. 26

XIV. 9724

CO₂

Petropoulos B.,
Botter R.

1968

Comptes Rendus, 266B, 404

Facteurs de Franck-Condon pour
l'ionisation de CO₂.

CO₂

Ray R. S.

1968

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

An empirical relation -
ship between bond length
and frequency.



(see. CH₄) III

CO₂

Rothe D. S.

1968

McLara D. J.

U.S. At. Energy Comm.,
CA2-TR-165, 70 pp.

check

(all. N₂) III

CO₂

1968
Skerbele H., Dillon M. A.,
Lassetter E. N.

J. Chem. Phys., 49, N 11,
85042

сменит
колебаний
переходов

(M₂O) III

1968

CO₂

11 Д161. Общие ангармонические силовые постоянные двуокиси углерода. Suzuki Isao. General anharmonic force constants of carbon dioxide. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 25, № 4, 479—500 (англ.)

Составлена потенц. ф-ция молекулы CO₂ в естественных колебательных координатах, содержащая 12 силовых постоянных 2-го, 3-го и 4-го порядков. Недиagonalные матричные элементы векового уровня, определяющего уровни колебательной энергии резонанса Фер-

им. иосиф.

V₀;

д.и.

ф. 1968. 118

ми, содержат коэф. $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ при колебательных квантовых числах ν_1, ν_2, ν_3 и член $\delta J(J+1)$. По опытным значениям колебательной энергии для отдельных диад и полиад определены все 12 силовых постоянных и значения $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \delta$ для $\text{C}^{12}\text{O}_2^{16}$ и $\text{C}^{13}\text{O}_2^{16}$. В расчете использован метод наименьших квадратов. Переход от естественных колебательных координат к норм. координатам позволил вычислить нулевые частоты, постоянные ангармоничности x в ф-ле, выражающей колебательную энергию через колебательные квантовые числа, постоянные α в ф-ле для вращательной постоянной и силовые постоянные в норм. координатах. Построены потенц. поверхности. Вычислены нулевые частоты, постоянные x, α , вращательные постоянные, уровни энергии диад и полиад и постоянные взаимодействия Ферми для молекул $\text{C}^{12}\text{O}^{16}\text{O}^{18}$, $\text{C}^{13}\text{O}_2^{16}$, $\text{C}^{13}\text{O}^{15}\text{O}^{18}$. М. А. Ковнер

1968

CO₂

u.n.

90036x General anharmonic force constants of carbon dioxide. Isao Suzuki (Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 25(4), 477-98(1968)(Eng). Twelve force consts. in the general quartic force field of CO₂ were detd. by the least sqs. method from spectroscopic data on ¹²C¹⁶O₂ and ¹³C¹⁶O₂ together with the four 3rd-order parameters, i.e., λ_1 , λ_2 , λ_3 , and δ which appear in the Fermi coupling off-diagonal elements. Inclusion of these 3rd-order parameters is indispensable to obtain a reasonable set of anharmonic force consts. From these force consts., consistent sets of vibrational consts. (ω_s , χ_{ss}'), Fermi coupling consts. (W_s), and rotation-vibration coupling consts. (α_s) were derived for ¹²C¹⁶O₂, ¹³C¹⁶O₂, ¹²C¹⁶O¹⁸O and ¹³C¹⁶O¹⁸O. The calcd. vibrational energy levels and rotational consts. agree with those obtained exptl. A potential energy contour map of CO₂ is given. 18 references.

RCKP

C.A. 1968. 68. 20

1968

CO₂

7 Д312. Спектры излучения CO₂, возбужденного активным азотом, в области 4,3 и 2,7 м. Val Jean-Louis. Spectre d'émission de CO₂ excité par de l'azote activé dans les regions de 4,3 et 2,7 м. «С. г. Acad. sci.», 1968, 266, № 7, В 408—В 411 (франц.)

Получены спектры излучения CO₂, возбужденного активным азотом, в области 2300 и 3600 см⁻¹ на спектрометре с решеткой. Приведена схема кюветы и описаны установка и условия измерений. Произведена идентификация полос. Показано, что активный азот сильно возбуждает уровни ν₃CO₂. Отмечено, что наличие самопоглощения ослабляет интенсивность полос, соответствующих следующим переходам: 00⁰1—00⁰0, 00⁰2—00⁰1 и 00⁰3—00⁰2. М. Дедюлина

ф. 1968. 7х

CO₂

1968

118236p Emission spectrum of carbon dioxide excited by activated nitrogens in the regions of 4.3 and 2.7 microns. Jean Louis Val (Lab. Photophys. Mol., C.N.R.S., Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. A B* 266B(7), 408-11(1968)(Fr). N-excited (2450 MHz.) emission spectra of CO₂ are shown for 2370-2275 cm.⁻¹ and 3755-3580 cm.⁻¹. In the former region the following systems were observed: 00⁰1-00⁰0, 00⁰2-00⁰1, 00⁰3-00⁰2, 01¹1-01¹0, 01¹2-01¹1, 02⁰1-02⁰0, and 10⁰1-10⁰0. In the latter region the following systems were observed: 10⁰1-00⁰0, 11¹1-01¹0, 12⁰1-02⁰0, 02⁰1-00⁰0, and 03¹1-01¹0. Edgar S. Peck

C.A. 1968. 68. 26

CO₂.

ВФ-ХIV-635а 1968

2 Б58. Фотоионизация CO₂ и принцип Франка-Кондона для многоатомных молекул. Villarejo Don, Stockbauer Roger, Inghram Mark G. Photoionization of CO₂ and the Franck-Condon principle for polyatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 7, 3342—3343 (англ.)

Сообщаются результаты измерений энергии пороговых электронов, ведущих при фотоионизации CO₂. Приведенные в форме графика результаты сравниваются с рассчитанными вероятностями колебательных переходов. Найденный потенциал ионизации CO₂ находится в полном согласии со значением, полученным из спектроскопич. измерений. Отмечается хорошее качественное согласие эксперим. результатов с известными расчетами.

И. 1969. 2

B99-XIV-635a 1968

CO₂

1) 2 Д297. Фотоионизация CO₂ и принцип Франка — Кондона для многоатомных молекул. Villarejo Don, Stockbauer Roger, Inghram Mark G. Photoionization of CO₂ and the Franck—Condon principle for polyatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 7, 3342—3343 (англ.)

(7)

С помощью диффер. анализатора изучены пороговые энергии электронов, образующихся при фотоионизации молекул CO₂ с $\lambda=870-905$ Å. Ионизационный потенциал найден равным $899,9 \pm 0,5$ Å в хорошем согласии с величиной, определенной спектроскопически по средней длине волны дублетного перехода $^2\Pi_g \rightarrow ^1\Sigma_g^+$. Обнаружено два дополнительных максимума, расстояние между которыми $0,159 \pm 0,006$ эв соответству-

09. 1969. 2. 2

13
ет частоте симметричного валентного колебания молекулярного иона CO_2^+ ($0,1587 \text{ эв} = 1280 \text{ см}^{-1}$). Три наблюдавшиеся полосы отнесены к образованию ионов с колебательными уровнями 0,0,0; 1,0,0; 2,0,0; таким образом, подтверждено, что имеется малая вероятность перехода на уровень 2, 0, 0. Выполнено сравнение с рассчитанными ранее вероятностями колебательных переходов и с величинами множителей Франка—Кондона, вычисленными в гармонич. приближении; отмечено хорошее соответствие с эксперим. результатами. Библ. 11.

С. Ф. Б.

1968

CO₂

Кодг. погаш.

~~оценка
погаш.~~

1 Д158. Оценка пропускания Q-ветви полосы CO₂.
 Yamamoto G., Aida M. Evaluation of the transmission of the Q branch of the CO₂ band. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1968, 8, № 6, 1307—1317 (англ.)

Проведено точное вычисление сглаженного коэф. поглощения Q-ветви в спектре молекулы CO₂. При вычислениях использовались табулированные ф-ции. Предложены два способа коррекции метода расчета пропускания на основе использования сглаженного коэф. поглощения, в результате которой этот метод можно применять для расчета пропускания и в случае неперекрывающихся линий. Применение предложенных способов иллюстрируется на примере вычисления пропускания Q-ветви молекулы CO₂ при малых давлениях поглощающего газа. Результаты обсуждаются. В. А. Морозов

ф. 1968. 19

1988

CO₂

1 Д159. Уравнения для пропускания полос 2 μ молекул CO₂. Zachor A. S. Equations for the transmittance of the 2 μ CO₂ bands. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1968, 8, № 6, 1341—1349 (англ.)

На основе использования четырехпараметрич. ф-ции пропускания (точнее двух двухпараметрич. ф-ций, предложенных ранее (РЖФиз, 1968, 11Д585), вычислено среднее пропускание газа CO₂ в интервале 5 см^{-1} в области спектра 4590—5346 см^{-1} при различных давлениях газа и длинах пути света в газе. Метод расчета сравнивается с методами, использующими другие ф-ции пропускания. Результаты подробно обсуждаются. В. А. Морозов

ф. 1969. 19

2 Д187. Вычисление квадратичных силовых постоянных и преобразование координат для молекулы. Ар-

1969

ты м Р. И. «Докл. Научно-техн. конференции по итогам научно-исслед. работ за 1968—1969 гг. (апр. 1970 г.). Секц. Теплоэнергетическая. Подсекц. Теплофизическая. Ч. 1». М., 1969, 40—52

На примере линейной трехатомной симметричной молекулы XY_2 подробно проанализирована процедура расчета квадратичных силовых коэф. Вычислены силовые коэф. молекулы CO_2 . Получено нелинейное преобразование между декартовыми смещениями и внутренними координатами молекулы XY_2 .

CO_2

Сил. коэф.

9.1970. 28

1969

CO₂ $T'_e (\tilde{A}' B_2)$

29445d) Calculations of carbon dioxide energy levels. $\tilde{A}' B_2$ state. Benedict, W. S. (Inst. Mol. Phys., Univ. Maryland, College Park, Md.). *Planet. Atmos., Symp.* 1969 (Pub. 1971), 43 (Eng). Edited by Sagan, Carl. D. Reidel Publ. Co.: Dordrecht, Neth. New calcs. of the high vibrational levels of the ground state ($\tilde{X}^1 \Sigma_g^+$) give improved fits to the obsd. vibration-rotation bands and confirm the anal. by R. N. Dixon (1963), except that the v_2'' numbering must be lowered by 2. The energy of the $v = 0, K = 0$ level of $^1 B_2$ is $45,210 \pm 10 \text{ cm}^{-1}$.

D. M. Roessler

C.A. 1972. Pb. 6

1969

CO₂H₂O

UK. chem.

(Ozop)

84472c Infrared spectra of simple molecules. Benedict, William S. (Inst. for Mol. Phys., Univ. of Maryland, College Park, Md.). U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform., AD 1969, AD-692943, 43 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From U.S. Govt. Res. Develop. Rep. 1969, 69(21), 85. A summary is given of work on new interpretation of features in the spectra of CO₂ and water vapor, and of the compilation of tables of lines of those and other mols. for identification of mol. lines in the ir spectra of the earth and planets. TCVL

+1

C.A. 1970. 72. 16



1969

CO₂

1 Д849. Спектры спонтанного излучения мощных лазеров на CO₂ в ближней ИК-области. Bleekrode R. Near-infrared spontaneous emission spectra of high-power CO₂ lasers. «IEEE J. Quant. Electron.», 1969, 5, № 6, 297—298 (англ.)

спектр

Экспериментально исследованы спектры спонтанного излучения отпаянного лазера на смеси CO₂—N₂—He—H₂ в диапазоне 5000—9000 Å при помощи сканирующего монохроматора с отражательной решеткой. Установлено, что спектр спонтанного излучения содержит линии, соответствующие переходам первой положит. системы полос N₂(B³Π_g—A³Σ_u⁺), полосы Ангстрема, принадлежащие CO, а также ряд линий кислорода около 7773 и

09.1970. 12

8447 Å, что указывает на присутствие атомарного кислорода в разряде. Измерены интенсивности переходов при максимальной и минимальной (нулевой) выходной мощности излучения лазера. На основании полученных данных вычислена колебательная т-ра, равная $4300 \pm 300^\circ \text{K}$. По радиационному времени жизни состояния $B^3\Pi_g$ оценено время обмена колебательной энергией между CO_2 и $\text{N}_2(B^3\Pi_g)$. Библ. 13. А. И. Сербин

BGP - 1166 - XIV

1969

CO₂

(brou
uoci.)

110431u Accurate rotational constants of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ from measurement of cw [continuous-wave] beats in bulk gallium arsenide between carbon dioxide vibrational-rotational laser lines. Bridges, T. J.; Chang, T. Y. (Bell Teleph. Lab., Holmdel, N.J.). *Phys. Rev. Lett.* 1969, 22(16), 811-14 (Eng). A room-temp. bulk GaAs mixer is used to mix frequencies of pairs of cw vibrational-rotational CO₂ laser lines, each stabilized to line center. The beat frequencies, in the mm.-wave region of 50-80 GHz., are measured for 37 pairs of transitions to better than 1 MHz. The deduced rotational consts. for the relevant vibrational levels (00⁰1, 10⁰0, 02⁰0) are 25 to 200 times more accurate than the best previous results (from conventional spectroscopy). RCZV

C.A. 1969. 70.24

CO₂

1969

Исп.
фотолиз

I Б1046 Д. Импульсный фотолиз двуокиси углерода в дальней ультрафиолетовой области. Barat François. Photolyse-éclair de l'anhydride carbonique dans l'ultra-violet lointain. Thèse Doct.-ingr Fac. sci. Orsay Univ. Paris, 1969, 57 p., ill. (франц.)

Изучена кинетика образования СО при импульсном фотолизе газ. СО₂, чистого (давл. 6,4; 300 и 760 мм) и в присутствии добавок СО, СН₄, Н₂, Хе, Аг, Не. Изучены также р-ции атомов О(³P) и О(¹D), образующихся при импульсном фотолизе О₂ в смесях с СО, Н₂, Хе, Аг, Не, SF₆.

В. Е. Скурат

X. 1972. I

CO₂

Brundolle C. R.
Turner A. W.

1969

3

Internat. J. Mass Spectrom.
and. Ion Phys. 1969, 2, 13
195-220



(Cer. NgO) III

CO₂

P. R. Buniker
D. Papoušek.

1969
908

"J. Mol. Spectrosc."

1969, 32, N3, 419-429

"The Symmetry Groups of Linear
Molecules."

CO₂

вращай.
возбужд.

09. 1970.

12

2 1 Д215. Вращательное возбуждение молекул CO₂ при столкновениях. Chan F. T., Tang C. L. Rotational transition of CO₂ molecule by collisions. «J. Appl. Phys.», 1969, 40, № 7, 2806—2810 (англ.)

1969

Для расчета вращательного возбуждения молекулы CO₂ принята модель взаимодействия жесткого ротатора с бесструктурной частицей. Энергия взаимодействия выбрана в виде

$$V(r\gamma) = V_0(r) [1 + \lambda P_2(\cos\gamma)],$$

где γ — угол между осью ротатора и направлением пучка, λ — параметр асимметрии и ф-ция $V_0(r)$ аппроксимирует короткодействующую часть потенциала Леннарда—Джонса для CO₂—CO₂. Для описанной модели вычислены сечения вращательных переходов $J \rightarrow J+2$, времена вращательной релаксации, число столкновений Z и температурная зависимость Z . Из эксперим. данных по среднему числу столкновений в газе CO₂ при $T=300^\circ\text{K}$ ($\bar{Z}=1,5$) найдено, что $\lambda=0,31$. В. О.

CO₂

1969

107335f Raman spectra of solid carbon dioxide, nitrous oxide, nitrogen, and carbon monoxide. Cahill, J. E.; Leori, George E. (Princeton Univ., Princeton, N.J.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(4), 1324-32 (Eng). See CA 71:8235s. VNJZ

107336g Raman spectroscopic study of metal ion coordination: chloride, bromide, and nitrate complexes of bismuth (III). Oertel, Richard P. (Cornell Univ., Ithaca, N.Y.). 1968, 90 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 69-5773. From *Diss. Abstr. B* 1969, 29(11), 4083.

SNDC

Pennant-
mushp

(NO, N₂, CO)

+3

C.A. 1969. 71.22



CO₂

1969

2 Б176. Спектроскопия с помощью лазерного источника. Изучение колебательно-вращательных переходов $\nu_3-\nu_1$, $\nu_3-2\nu_2$ и $(\nu_3+\nu_2)-(\nu_1+\nu_2)$ CO₂. Cousin Catherine, Rossetti Colette, Meyer Claude. Spectroscopie avec source laser. Etude des transitions de vibration-rotation $\nu_3-\nu_1$, $\nu_3-2\nu_2$ et $(\nu_3+\nu_2)-(\nu_1+\nu_2)$ de l'anhydride carbonique. «C. r. Acad. sci.», 1969, 268, № 25, B1640—B1643 (франц.)

Изучены полосы поглощения, соответствующие колебательно-вращательным переходам $\nu_3-\nu_1$, $\nu_3-2\nu_2$ и $(\nu_3+\nu_2)-(\nu_1+\nu_2)$ CO₂. В качестве источника света использовался одномодовый лазер на CO₂, исследуемый газ находился в многоходовой кювете (эффективная толщина кюветы

X. 1970. 2

6,36—54 м). Изучалась зависимость коэф. поглощения и ширины полос от давл. CO_2 , получаемые значения пересчитывались для т-ры 300°K . Изучение аномалий в поглощении на полосе $\nu_3 - 2\nu_2$ позволило оценить также порядок коэф. поглощения на переходе $\nu_3 + \nu_2 - 3\nu_2$. Зависимость уширения полос от давл. хорошо согласуется с теорией уширения спектральных линий, вызываемого соударениями молекул.

А. В. Бобров

1969

CO₂

Collin Y. E.,
Natalis P.

8i

Bull. Cl. Sci., Acad. Roy.
Belg., 1969, 55, 24, 352.

Determination of electro-
nic states and of vibration-
al levels of molecular
ions by photoelectron
spectroscopy

(C. R. Acad. Sci. Paris) III

CO₂

Cunliffe - Jones D.B.

1969

Spectrochim. acta, A25,
N 4, 779.

U.K. chemip
v parihore

(cu. CCl₄) III

1969

CO₂

4 Д193. Интенсивности инфракрасных полос и полярности связей. Ч. 1. Постоянные моменты связей в молекулах CO₂, OCS, CS₂, CSe₂ и ScSe. Davies P. Rowland, Orville—Thomas W. J. Infrared band intensities and bond polarities. Part I. Bond moment constants in CO₂, OCS, CS₂, CSe₂ and SCSe. «J. Molec. Struct.», 1969, 4, № 2—4, 163—177 (англ.)

длина
связей ;

Приводится таблица длин связей и силовых постоянных в молекулах CO₂, OCS, CS₂, CSe₂, ScSe. По этим данным вычислены элементы матриц обратных форм колебаний. По опытным значениям интегр. интенсивностей в ИК-спектрах этих молекул вычислены абс. значения производных от их дипольных моментов по норм. координатам. Получены ф-лы, связывающие эти производные

сил. пост.

+4

ф. 1940. 42

☒

с производными от дипольных моментов отдельных связей по их длинам. Расчеты выполнены в нулевом приближении валентно-оптич. теории. Определены численные значения дипольных моментов связей и их производных по длинам связей в газообразном, жидком и твердом состояниях. Сопоставление полученных величин между собой и с электронной структурой исследованных молекул приводит к выводу о недостаточности нулевого приближения.

М. А. Ковнер

1969

CO₂

Le Reilhac L.
Damany Astoin N.,
Romand J.

Косф. норо-
уеиуеу в
бан. 4. ф.

Spectrochim. Acta,
Part A, 25(1), 19.

(Cec. CHy) III

CO₂

1969

1 Б68. Расчет относительной интенсивности для двуокиси углерода — IV. Расчеты функции распределения для изотопозамещенных молекул CO₂. Gray L. D., Young A. T. Relative intensity calculations for carbon dioxide. IV. Calculations of the partition function for isotopes of CO₂. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1969, 9, № 5, 569—589 (англ.)

Затабулированы колебательно-вращательные и колебательные функции распределения C¹²O₂¹⁶ (I), C¹³O₂¹⁶, C¹²O¹⁶O¹⁸, C¹²O¹⁶O¹⁷ и C¹³O¹⁶O¹⁸ в области т-р 180—300° К с интервалом 10° К. Для 5 низших кол. состояний этих молекул вычислены также вращательные функции распределения. Для I функции распределения пересчитаны с большей точностью, чем ранее. (Пред. сообщ. см. РЖХим, 1967, 2Б127).

Резюме

X. 1970.1

CO₂

UK-счекер

B9p-1620-XIV
Hocher - Demollière L. 1969

Ann. phys., 1969(1970),
4(2), 89.

(see. McN) III.

1969

CO₂

(82430j) Nonlaser phenomena in sealed carbon dioxide laser.
 II. Dissociation of carbon dioxide molecules. Karube, Norio;
 Yamaka, Eiso (Matsushita Res. Inst. Tokyo, Kawasaki, Japan).
Nat. Tech. Rep. (Matsushita Elec. Ind. Co., Osaka) 1969,
 15(5), 577-84 (Japan). The dissocn. of CO₂ in a sealed CO₂
 laser during operation has been studied by mass spectroscopy.

helium neon laser. Boersch, Hans; Stahl, H. (I. Phys. Inst.,
 Tech. Univ. Berlin, Berlin, Ger.). *Z. Phys.* 1970, 237(1),
 58-68 (Ger). A double laser device of high stability was used to
 det. the threshold bandwidth of a He/Ne-laser amplifier and
 oscillator. By using 1-laser as a single-mode oscillator and the
 other as an amplifier, resonance curves of the amplifier with
 bandwidths between $1\Delta\nu = 2.5 \times 10^3$ and 1.7×10^6 Hz were
 recorded. By operating the 2 lasers as single-mode oscillators,
 beat frequencies with a bandwidth $11\nu \simeq 100$ Hz were obsd.
 Extrapolating these results to the threshold noise power, the
 threshold bandwidths $1\Delta\nu_R^* = 1.4 \times 10^3$ and $11\Delta\nu_R^* = 2.0 \times 10^3$
 Hz, resp., are obtained.

RCQW

C.A. 1970. 13. 16

CO₂

oblique bounce?

1969

24880d Measuring the population of the 00°1 level of carbon dioxide molecules. Levinson, G. R.; Sviridov, A. N.; Tychinskii, V. P.; Frolova, V. G. (USSR). *Radiotekh. Elektron.* 1969, 14(4), 682-5 (Russ). The population in abs. units (n) of the 00°1 CO₂ vibrational level was detd. in gas mixts. of CO₂-He-air by comparing the relative intensity of the spontaneous irradiation from this level on connecting and disconnecting a resonator. The differential equation for the spontaneous decay of the 00°1 level was integrated to a form proper for the app. used. Results are given graphically. Under optimum conditions, $n = 10^{15}$ /cc. for the CO₂ partial pressure $p = 0.35$ torr and the power output 0.02 w./cc. in a continuous regime, and $n = 1.5 \times 10^{16}$ /cc. for $p = 1.5$ torr, 1 w./cc. in a pulse regime.

Karel A. Hlavaty

C.A. 1969. 41.6

CO₂

1969

7 Д333. Ридберговы серии малых молекул. V. Ридберговы серии CO₂. Lindholm Einar. Rydberg series in small molecules. V. Rydberg series in CO₂. «Arkiv fys.», 1969, 40, № 2, 125—128 (англ.).

Уточненные значения квантовых дефектов ридберговских серий (D) CO₂ получены путем сопоставления спектров поглощения с фотоэлектронными спектрами и спектрами энергетич. потерь. Значения D для CO₂ совпадают с таковыми для двухатомных молекул. Исключение составляют $nd\sigma$ -состояния, где $D > 0,31$. Главное отличие от двухатомных молекул состоит в том, что в CO₂ наблюдались переходы, запрещенные правилами $g \leftrightarrow g$, $u \leftrightarrow u$. Библ. 17. Ч. IV см. рф. 7Д332. И. Дворников

ф. 1970. 78

1969

CO₂

13 Б187. Ридберговые серии малых молекул. V. Ридберговые серии молекулы CO₂. Lindholm Einar. Rydberg series in small molecules. V. Rydberg series in CO₂. «Arkiv fys.», 1969, 40, № 2, 125—128 (англ.)

Идентифицированы ридберговые серии электронных полос молекулы CO₂. Отмечено нарушение альтернативного запрета для ряда полос. Показано, что квантовые дефекты для всех уровней за исключением уровней $nd\sigma$, согласуются с соотв-щими квантовыми дефектами двухатомных молекул, а для уровней $nd\sigma$ квантовый дефект выше и составляет 0,34. Сообщ. IV см. пред. реф.

М. Р. Алнев

ридберговые
серии

X. 1970.

13

CO₂

XIV-137

1969

(105453u) General model of anharmonic interaction force constants in polyatomic molecules. Machida, Katsunosuke; Overend, John (Kyoto Univ., Kyoto, Japan). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(6), 2537-42 (Eng). A model, previously postulated in a 2-dimensional form and applied to the discussion of anharmonic stretch-stretch interaction force consts. in triat. mol. has been extended to the polydimensional case. In this form it has been used to discuss the anharmonic interaction force consts. coupling the stretching and bending coordinates. Numerical values of the model parameters have been evaluated for CO₂ and HCN.

RCJO

+1

HCN

C. A. 1969.

71.22



XIV-137

1969

CO₂

10 Б76. Общая модель для ангармонических силовых постоянных взаимодействия многоатомных молекул. Machida Katsunosuke, Overend John. General model of anharmonic interaction force constants in polyatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 6, 2537—2542 (англ.)

коэффициент
ангармоничности

Модель, предложенная авторами в пред. работе (J. Chem. Phys., 1969, 50, 4429) для определения ангармонич. коэф. взаимодействия связей многоатомной молекулы, распространена на более общий случай, учитывающий еще ангармонич. коэф. взаимодействия связей с углами. Ангармонич. потенциальная функция в этой модели представляется в виде суммы членов, соотв-щих независимым нелинейным изменениям внутренних координат и членов, соотв-щих одновременному изменению двух или большего числа координат. Результаты применены к вычислению коэф. ангармоничности молекул CO₂ и HCN. М. Р. Алиев

X. 1970. 10



CO₂

1969

24803f, Anharmonic stretch-stretch interaction force constants of triatomic molecules. Machida, Katsunosuke; Overend, John (Fac. Pharm. Sci., Kyoto Univ., Kyoto, Japan). *J. Chem. Phys.* 1969, 50(10), 4429-36 (Engl.). A model is proposed which, using the generally accepted form of the potential-energy surface in the 2 bond stretching coordinates, allows the prediction of the anharmonic stretch-stretch interaction force consts. from the quadratic interaction force const. The model is applied to CO₂ and N₂O. HCN, OCS, and H₂O are also discussed. RCJQ

Chem. No. 1.

74

C.A. 1969. 71. 6



CO₂

1 Д277. Ангармонические силовые постоянные взаимодействия связей в трехатомных молекулах. Machida Katsunosuke, Overend John. Anharmonic stretch-stretch interaction force constants of triatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 10, 4429—4436 (англ.)

Предложен приближенный способ вычисления ангармонич. силовых постоянных взаимодействия связей 3- и 4-го порядков в трехатомных молекулах из диагональных силовых постоянных 2-, 3- и 4-го порядков, квадратичной силовой постоянной взаимодействия связей и равновесных длин связей. Этот способ основан на модели Хита и Линнета (Heath D. F., Linnett J. W., «Trans. Far. Soc.», 1949, 44, 556), в которой квадратичная силовая постоянная взаимодействия связей выражается через диагональные силовые постоянные, и на представлении диагональных силовых постоянных одной связи в виде ряда по степеням смещения по дру-

диагн.
постоянные
ангармонич.

9. 1971.

120

+1



гой связи. Предложен также упрощенный вариант этой модели, в котором при помощи эмпирич. соотношений между диагональными силовыми постоянными и межатомным расстоянием число параметров в потенц. ф-ции сокращается. Как исходный, так и упрощенный варианты модели применены к расчету постоянных ангармоничности молекул CO₂ и N₂O. Полученные значения силовых постоянных согласуются с их значениями, найденными из эксперим. данных по спектроскопич. постоянным.

М. Р. Алиев

1969

CO₂

Нефедов В.И.

ж. Окружность.

жизни, 1969, 10,

№ 5, 938



(Сел. О₂) И

CO₂

1969

12 Д318. Спектроскопия с использованием лазера. Исследование и интерпретация аномалий в интенсивности линий P_{56} перехода $\nu_3-\nu_1$ двуокиси углерода. Rossetti Colette, Meyer Claude, Barchewitz Pierre. Spectroscopie avec source laser. Etude et interprétation des anomalies d'absorption de la raie P_{56} de la transition $\nu_3-\nu_1$ de l'anhydride carbonique. «С. г. Acad. sci.», 1969, 268, № 26, В1735—В1738 (франц.)

Исследована зависимость интенсивности колебательно-вращательной линии поглощения P_{56} перехода $\nu_3-\nu_1$ молекулы CO_2 . В качестве источника использован лазер на CO_2 . При возрастании давления коэф. поглощения линии монотонно увеличивается, достигая $(1,1 \pm 0,2) \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.

ср. 1969. 12Д

В области давл. 200—760 мм рт. ст. коэф. поглощения не
меняется. Основываясь на сравнении вычисленной и
определенной эксперим. зависимости коэф. поглощения
от давления, авторы делают вывод, что поглощение в
этой области определяется наложением линии P_{56} пере-
хода $\nu_3 - \nu_1$ и линии P_{23} «горячего» перехода $(\nu_3 + \nu_2) -$
 $(\nu_1 + \nu_2)$, отстоящих на $0,001 \text{ см}^{-1}$. М. В. Тонков

$\text{CO}_2, \text{CN}_2, \text{CS}_2, \text{CSe}_2$

1969

(м.н.)
раотс

4 Д175. Исследование некоторых линейных молекул XY_2 с помощью функций Грина. Ramaswamy K., Srinivasan K. Green's function analysis of some XY_2 linear molecules. «J. Molec. Struct.», 1969, 4, № 2—4, 135—143 (англ.)

Изотопическое замещение рассматривается как возмущение, и частоты колебаний возмущенной молекулы вычисляются из векового уравнения $|\varepsilon \omega^2 G(\omega^2) + I| = 0$, в котором $\varepsilon = (m^{(i)} - m)/m$, I — единичная матрица, функция Грина определяется ф-лой

$$G_{ij}(\omega^2) = \sum l_{ik} l_{jk} (\omega^2 - \omega_k^2)^{-1},$$

+3

+3

9.1970. 42



где l — элементы матрицы, связывающей массово взвешенные декартовы и норм. координаты. Применение метода к молекуле XYY_i позволило получить новые изотопич. правила, связывающие частоты колебаний молекул XYY_i и XY_2 . Вычислены частоты колебаний, силовые постоянные, средние амплитуды колебаний, постоянные

вращательного искажения и постоянные Кориолиса для различных изотопич. модификаций молекулы CO_2 и радикала CN_2 . Такие же величины найдены для молекул CS_2 и CSe_2 по опытным значениям частот. Во всех случаях получено хорошее совпадение вычисленных и опытных значений молекулярных постоянных. М. А. Ковнер

1969

CO₂

8 Б82. Анализ колебаний некоторых линейных молекул XY₂ методом функции Грина. Ramaswamy K., Srinivasan K. Green's function analysis of some XY₂ linear molecules. «J. Molec. Struct.», 1969, 4, № 2-4, 135—143 (англ.)

Методом функции Грина получены соотношения между частотами изотопических разновидностей линейной молекулы типа XY₂. Эти соотношения применены к вычислению частот различных сим. и несим. изотопозамещенных молекул CO₂, CS₂, CSe₂ и CN₂. Результаты согласуются с эксперим. данными. Вычислены также силовые постоянные, средне-квадратичные амплитуды колебаний, постоянные центробежного искажения и коррировочного взаимодействия этих молекул. М. Р. Алиев

расчет

v_i,

м. н.,

см. ност.

X. 1970. 8

+ 3



CO₂

Snyder L. C.,
Basch H.

1969

формовые

группы

кв.-сех
расчет

J. Amer. Chem. Soc.,
1969, 91, n 9, 2189



(C₆H₅Cl₄)^{III}

00223.4947

Ph, Ch

C'0 (6; 4.4)
XIV-9825

II25

1969

Schwartz S.E., Thrush B.A. Energies of vibrational levels 22 to 33 of carbon monoxide $X' \Sigma_g^+$. "J. Molec. Spectrosc.", 1969, 32, N 2, 343-346 (англ.)

0050

8 36

0

4

1

40

ВИНИТИ

1969

CO₂

8 Д381. Возбуждение колебаний вблизи порога в CO₂ и N₂O. Stamatovic A., Schulz G. J. Excitation of vibrational modes near threshold in CO₂ and N₂O. «Phys. Rev.», 1969, 188, № 1, 213--216 (англ.)

Измерены сечения возбуждения различных видов колебаний в молекулах CO₂ и N₂O потоком электронов с энергией, близкой к пороговой. В качестве источника электронов использовался трохондальный монохроматор с энергетич. распределением 0,05 эв в полумаксимуме. Газообразный SF₆ использовался в качестве детектора электронов с нулевой энергией, образующихся в результате колебательного возбуждения молекул. Обнаружено, что сечения возбуждения всех основных колебаний имеют один порядок величины. Этот факт рассматривается как свидетельство неприменимости для оптически запрещенных переходов вблизи порога борновского приближения, использующего дипольное взаимодействие. Библи. 16.

И. Дворников

сечения
возбужде-
ния различ-
ных видов колеб.

ф. 1920.

8Д

+1



1969

CO₂

22 Б274. Оценка ширины вращательных линий полос CO₂. Yamamoto G., Tanaka M., Aoki T. Estimation of rotational line widths of carbon dioxide bands. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1969, 9, № 3, 371—382 (англ.)

При помощи теории уширения спектральных линий неадиабатич. соударениями, развитой Андерсоном, выполнен расчет ширины вращательных линий 4-х полос переходов 000—01¹0, 01¹1—02²0, 01¹0—02²0 при 15 мкм 000—001 при 4,3 мкм молекулы CO₂, обусловленной соударениями CO₂—CO₂ и CO₂—N₂ с учетом лишь квадруполь-квадрупольного межмолек. взаимодействия. Вычисления проведены для максвелловского распределения скоростей при различных значениях квадрупольных моментов CO₂ и N₂. Путем сопоставления результатов расчета с эксперим. данными для чистого CO₂ оценен квадрупольный момент CO₂. Резюме

ж. 1969. 22

ВФ-2373-XIV

1969

CO₂

3 Д170. Изучение изотопических молекул CO₂ и пропускание лазерного излучения атмосферой C¹²O₂¹⁸.
 Yin, P. K. L. Studies on CO₂ isotope molecules and atmospheric transmission of ¹²C¹⁸O₂ laser radiation. «Appl. Optics», 1969, 8, № 5, 997—1006 (англ.)

Из частот нулевых колебаний ω_i и постоянных ангармоничности x_{ij} вычислены ангармонич. коэф. k_{ijk} и k_{ijkl} в нормальных координатах 18 изотопич. разновидностей молекулы CO₂. С учетом ангармонич. резонансов вплоть до 3-го порядка из k_{ijk} и k_{ijkl} вычислены энергии ряда колебательных уровней и соответствующие им вращательные постоянные. Результаты использованы для расчета частот и коэф. поглощения различных лазерных колебательно-вращательных переходов изотопов CO₂. В частности, показано, что лазерное излучение на переходе $P(20)$ молекулы C¹²O₂¹⁸ практически не поглощается атмосферой.

М. Р. Алнев

 $\epsilon_i,$
 в.р. коэф.

09. 1970. 27

Prun 280

