

1982

H₂

Ommux 13560

1982

консп.,
кв. мех.
присен

Carsky P., Huebac I., et al.,
Theor. chim. acta, 1982, 60,
N5, 445-450

H₂

[Ommuck 13720]

1982

диссоци-
ация
при
электро-
ударе

Higo M., Kamata S.,
et al.,

Chem. Phys., 1982, 66,
N 3, 243-248.



H₂

отт. 13424

1982

6 Д47. Неэмпирическая кривая потенциальной энергии $J^1\Delta_g$ состояния молекулы водорода. Ab initio potential energy curve for the $J^1\Delta_g$ state of the hydrogen molecule. Kołos W., Rychlewski J. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 128—136 (англ.)

В приближении Борна—Оппенгеймера рассчитана кривая потенц. энергии $J^1\Delta_g$ -состояния молекулы H₂. Используемая волн. ф-ция представлялась линейной комбинацией 60 ф-ций Джеймса—Кулиджа в эллиптич. координатах. Параметры этих ф-ций находились оптимизацией при некоторых выбранных межъядерных расстояниях, для промеж. значений экспоненты ф-ций определялись интерполяцией. Рассчитанная кривая потенц. энергии использовалась затем для решения уравнения Шредингера для колебательного движения в молекулах H₂, D₂ и HD, что дало в результате уровни энергии и вращательные постоянные. Проводится сравнение с известными эксперим. данными. Отмечается,

М.П., Li

9.1982, 18, № 8 (+2) D₂, HD

что адиабатич. поправки в приближении Борна—Оппенгеймера являются в основном ответственными за существующее расхождение теоретич. и эксперим. результатов. Для молекулы HD найденное расхождение в колебательных энергиях оказалось больше величины, ожидаемой из возможных погрешностей теории. Поэтому предполагается, что $J^1\Delta_g$ состояние в эксперименте по HD было ~~определено неправильно~~. А. А. Зембеков



H₂

Отт. 13424

1982

расчет
м.п;

⊠
(+2)

12 Б63. Неэмпирическая потенциальная кривая $J'\Delta_g$ -состояния молекулы водорода. Kolos W., Rychlewski J. Ab initio potential energy curve for the $J'\Delta_g$ state of the hydrogen molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 1, 128—136 (англ.)

Вариационным методом с 60-членной волновой функцией записанной в эллиптич. координатах; получена потенциальная кривая состояния $J'\Delta_g$ молекулы водорода в приближении Борна—Оппенгеймера. С ее помощью для молекул H₂, HD и D₂ вычислены энергии диссоциации, колебательные уровни энергии и вращательные постоянные B_v для различных колебательных состояний. На основе расчетов сделан вывод о неправильном эксперим. определении колебательного кванта $\Delta G(1/2)$ состояния $J'\Delta_g$ молекулы HD.

В. Б. Павлов-Веревкин

HD, D₂ ●

X. 1982, 19, N12.

H₂

Omni. 13424

1982

96: 58115q Ab initio potential energy curve for the $J^1\Delta_g$ state of the hydrogen molecule. Kolos, W.; Rychlewski, J. (Dep. Chem., Univ. Warsaw, 02-093 Warsaw, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 91(1), 128-36 (Eng). The Born-Oppenheimer potential energy curve for the $J^1\Delta_g$ state of H₂ was computed using highly flexible wave function in the form of a 60-term expansion in elliptic coordinates. The vibrational Schroedinger equation for the J state was solved for H₂, HD, and D₂. For H₂ the resulting energies are compared with the exptl. values and it is shown that the adiabatic effects are likely to be responsible for the main part of the existing discrepancy between theor. and exptl. values. For HD the disagreement is too great to be attributable to approxns. in the present work and therefore it is suggested that the J state of HD was incorrectly detd.

ab initio
pracem,
homem.
Kpuvad

C.A. 1982, 96, 28

H₂

3 Д688. От. 15068 1982
Лабораторные исследования УФ-спектров,
удара. Системы полос Вернера и Лаймана. Laboratory
studies of uv emissions of H₂ by electron impact. The
Werner- and Lyman-band systems. Ajello J. M.,
Srivastava S. K., Yung Yuk L. «Phys. Rev.
A: Gen. Phys.», 1982, 25, № 5, 2485—2498 (англ.)

Измерены абс. сечения испускания лаймановских
($B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) и вернеровских ($C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) полос
H₂, возбуждаемых электронным ударом. Получены
ф-ции возбуждения состояний $B^1\Sigma_u^+$ и $C^1\Pi_u$ в области
энергий электронов от порога возбуждения до 400 эВ.
Установлено, что при $E=20$ и 100 эВ вклад каскадных
переходов в возбужденные состояния B равен соответ-
ственно $51 \pm 20\%$ и $24 \pm 10\%$. Сечения испускания из-
лучения ($B \rightarrow X$) и ($C \rightarrow X$), соответствующие прямому
возбуждению состояний B и C , при $E=100$ эВ равны
соответственно $2,7 \cdot 10^{-17}$ и $3,1 \cdot 10^{-17}$ см². Каскадный
механизм возбуждения состояния C при $E=100$ эВ не
играет заметной роли. Библ. 35. А. В. Н.

спектр

ср. 1983, 18, №3

H₂

Omnium 15068

1982

 $(B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+)$ $(C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+)$

197: 30649p Laboratory studies of UV emissions of molecular hydrogen by electron impact. The Werner- and Lyman-band systems. Ajello, J. M.; Srivastava, S. K.; Yung, Yuk L. (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91109 USA). *Phys. Rev. A* 1982, 25(5), 2485-98 (Eng). A lab. measurement is reported of abs. emission cross sections of both the Lyman bands ($B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) and Werner bands ($C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) of H₂ by electron impact over the energy range from threshold to 400 eV with the same optical system. The emission cross section for the $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ transition at 100 eV is $(3.55 \pm 0.8) \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ ($2.7 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, direct excitation, $0.85 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, cascading) and the emission cross section for the $C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ transition at 100 eV is $(3.1 \pm 0.6) \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ (cascading is estd. to be not present). The cross-section ratio Q_c/Q_B for direct excitation is 1.21 ± 0.30 at 300 eV in excellent agreement with published values for this ratio from theor. calcns. and exptl. data of the optical oscillator strengths. The cross section for cascading to the B state is $24 \pm 10\%$ of the total emission cross section both at 100 and 300 eV. Cascading increases to $51 \pm 20\%$ of the total cross section of the B state at 20 eV. The vibrational population distribution of the B state is a function of electron-impact energy as the importance of cascading relative to direct excitation changes with electron-impact energy.

C.A. 1982,
97, 14

M₂

(Ommuck 14299)

1982

Mr. R.,
X Uer.
CB336

Arcoa R., Robinson E. A.,

J. Phys. Chem. 1982, 86,

N6, 894-899.

H₂ (K)

1982

96: 132464w Infrared spectrum of hydrogen in the condensed phase with high-sensitivity spectrometers: experiments with a 0.04 cm⁻¹ Fourier transform spectrometer in the range 1.5-12 μm. Balasubramanian, T. K.; Lien, Chen Hsin; Gaines, James R.; Rao, K. Narahari; Damon, E. K.; Nordstrom, R. J. (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 92(1), 77-84 (Eng). The IR spectrum of solid and liq. H₂ was recorded by using a Fourier spectrometer. The pure rotational U transitions, $U_0(0)$ in solid para-H₂ and $U_0(1)$ in solid normal H₂, with the accompanying phonon branches were obsd. for the 1st time. In addn., the rotational double transitions $S_0(0) + S_0(1)$ and $S_0(1) + S_0(1)$ were identified. The identifications of these transitions are based on positions calcd. by making use of gas phase mol. consts. In the liq., the double transitions were preserved, but the single transitions $U_0(0)$ and $U_0(1)$ are entirely absent. The region of $Q_{1-0}(J)$ reveals structure which has not been reported before. Its interpretation is presented.

UK crexip

C. A. 1982, 96, N16

H₂ (к)

1982

ИК спектр

17 Б194. Инфракрасный спектр водорода в конденсированной фазе, полученный на высокочувствительных спектрометрах. Эксперименты с фурье-спектрометром в области 1,5—12 мкм при разрешении 0,04 см⁻¹. Balasubramanian T. K., Lien Chen-Hsin, Gaines James R., Narahari Rao K., Damon E. K., Nordstrom R. J. Infrared spectrum of hydrogen in the condensed phase with high-sensitivity spectrometers. Experiments with a 0,04-cm⁻¹ Fourier

Х. 1982, 19, N 17

transform spectrometer in the range 1,5—12 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 92, № 1, 77—84 (англ.)

Изучены с разрешением $0,04 \text{ см}^{-1}$ ИК-спектры поглощения (область $1,88\text{—}11,1 \text{ мкм}$, $5300\text{—}900 \text{ см}^{-1}$) обычного водорода (I) в тв. и жидк. состоянии, а также спектр пара-водорода (II) в тв. состоянии. Проведен анализ тонкой структуры полосы $Q_{1-0}(I)$ I $\sim 4150 \text{ см}^{-1}$. В спектре тв. I проявляются $U_0(1)$ — переходы ($\Delta I=4$) с частотами $\sim 1619, 1663 \text{ см}^{-1}$, а в спектре II $U_0(0)$ — переходы с частотами ~ 1167 и 1208 см^{-1} , кроме того, для I впервые наблюдали двойные ($\Delta I=2$) $S_0(0) \pm S_0(1)$ - и $S_0(1) + S_0(1)$ -переходы с частотами ~ 940 и 1173 см^{-1} , а в спектре II — $S_0(0) + S_0(1)$ переходы с частотой $\sim 940 \text{ см}^{-1}$. В спектре жидк. I найдены только двойные переходы. А. В. Б.

H₂

[Ommuck 14270]

1982

I.P.

Banerjee A., Mukherjee D.,
et al.,

Ac, *Иерме*
всхуны.

J. Chem. Phys., 1982,
76, ● N 4, 1995-2002

H₂

1982

1 Д101. Применение многоконфигурационной теории связанных кластеров. Applications of multiconfigurational coupled-cluster theory. Banerjee Ajit, Simons Jack. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 9, 4548—4559 (англ.)

расчет
энерг.

($1\Sigma_g$)

Описан формализм теории связанных кластеров для случая многоконфигурац. ф-ции начального приближения. Рассмотрен ряд примеров, в которых необходимо использовать предложенную методику. Разработанная схема использована для расчета энергий систем $H_2(1\Sigma_g)$, $Li_2(S)$, $HeH_2(1A_1)$ и $CH_2(3B_1; 1A_1)$. Полученные результаты сравнены с «точными», известными из расчетов, проведенных с полным учетом конфигурац. взаимодей-

(+3) 17

р. 1983, 18, n1

ствия. Сравнение показывает, что в методе связанных кластеров можно достигнуть быстрой сходимости разложения при условии правильного выбора многоконфигурац. ф-ции начального приближения. В частности, для рассчитанных молекул оказалось достаточным ограничиться двойными коммутаторами в разложении $e^{-T}\hat{H}e^T$ и вторым порядком в разложении кластерного оператора T . А. И. Дементьев

H_2

оттиск 14054 1982

8 Д138. Расчет молекул методом плавающих сферических гауссовых функций. I. Малые молекулы и ионы. Борисов Ю. А., Мусаев Д. Г. «Ж. структур. химии», 1982, 23, № 1, 10—15

Метод плавающих сферических гауссовых функций Фроста использован для расчета полных энергий и межъядерных расстояний следующих молекулярных систем: H_2 , LiH , Li_2 , H_3^+ , Li_3^+ , BH_3 , CO , N_2 , Be_2 , Be_4 и H_4 .

расчет
полных
энергий
и
межъядерных
расстоян. (НО) ✓

Ф. 1982, 18, № 8.

№

Оттиск 14054

1982

16 Б13. Расчет молекул методом плавающих сферических гауссовых функций. I. Малые молекулы и ионы. Борисов Ю. А., Мусаев Д. Г. «Ж. структур. химии», 1982, 23, № 1, 10—15

теоретический
расчет

Метод плавающих сферич. гауссовых ф-ций Фроста использован для расчета полных энергий и межъядерных расстояний молекул H_2 , LiH , Li_2 , H_3^+ , Li_3^+ , BF_3 , CO , N_2 , Be_2 , Be_4 и H_4 . Результаты расчетов сравнены с экспериментом и расчетами более точными методами. Для Be_2 рассчитан отталкивательный Пт, к-рый сопоставлен с результатами расчета более точным методом. На основании расчетов H_2 и H_4 (и форме квадрата) определена энергия активации изотопного обмена водорода, равная 202 ккал/моль. Описана вычислительная программа. Резюме

70

Х. 1982, 19, № 16.

H₂

1982

Borisov Yu. A.

теорет.
расчет
энергии

Chem. Phys. Lett.,
1982, 93, №2, 197 -
-200.

(ср. H⁻; III)

H₂

1982

98: 24/84h Atomic fine structure in a space of constant curvature. Bessis, N.; Bessis, G.; Shamseddine, R. (Lab. Spectrosc. Theor., Univ. Claude Bernard, 69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Phys. A: Math. Gen.* 1982, 15(10), 3131-44 (Eng). As a contribution to a tentative formulation of at. physics in a curved space, the detn. of at. fine-structure energies in a space of const. curvature is investigated. Starting from the Dirac equation in a curved space-time, the analog of the Pauli equation in a general coordinate system is derived. When particularizing these results to the model of a spherical 3-space with a Coulombic field, the curved form of the 1-electron fine-structure Hamiltonian is obtained, i.e. the curved form of the Lande spin-orbit interaction and of the relativistic correction of the kinetic energy and some addnl. terms which vanish at the traditional flat limit. The theor. curvature-induced shifts and splittings of the fine-structure energy levels are examd. for the particular case of the hydrogenic $n = 2$ levels.

CNEXMP

C. A. 1983, 98, N4.

H₂

1982

U 98: 116089p Far infrared spectra of molecular hydrogen and mixtures of molecular hydrogen-methane and molecular hydrogen-helium. Birnbaum, George (Natl. Bureau Standards, Washington, DC 20234 USA). NASA Conf. Publ. 1980 (Pub. 1982). NASA-CP-2223, Vibr.-Rotational Spectrosc. Planet. Atmos., N82 26135-N82 26151, 449-71 (Eng). Lab. measurements are reported of the far-IR absorption of H₂ and of mixts. of H₂ with CH₄ and He, and fits to the pure H₂ spectra with a semi-empirical line shape are described. Such results are needed in analyzing the thermal emission from the atms. of the outer planets. The spectra discussed are forbidden in the isolated mol. They occur in groups of mols. due to dipoles induced in colliding mols. by their elec. fields. At the relatively low densities of interest, where biomol. collisions predominate, the absorption coeff. ($\alpha(\nu)/\text{cm}^{-1}$) is proportional to the d. squared at every frequency throughout the band. This is because the line shape, which is controlled by the duration of collision, is independent of the d. Because the time of collision is so small, the line widths encountered in collision-induced absorption are large and, except for H₂ where the rotational const. is unusually great, unresolved rotational bands of overlapping lines are obsd.

гандекуи
ук енеке

C.A. 1983, 98, N 14

H₂

1982

97:171722u Lowest Rydberg state of molecular hydrogen in a neon matrix. Boehmer, W.; Haensel, R.; Schwentner, N.; Boursey, E.; Chergui, M. (Inst. Experimentalphys., Univ. Kiel, Kiel, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 91(1), 66-8 (Eng). The absorption spectrum of H₂ mols. in a Ne matrix at 11-12.2 eV due the vibrational levels $v' = 0, \dots, 7$ of the $B^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ Rydberg transition is reported.

низкие
рубер. сос-
тоит. в Ne
матрице

C.A. 1982, 97, N 20.

42

1982

2 Д488. Низшее ридберговское состояние H_2 в Ne-матрице. Lowest Rydberg state of H_2 in a Ne matrix. Böhmer W., Haensel R., Schwentner N., Boursey E., Chergui M. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 91, № 1, 66—68 (англ.)

Спектр поглощения молекулы H_2 в Ne-матрице исследован с разрешением $\sim 1,5$ А в области 11—12,2 эВ. В спектре идентифицированы колебательные полосы $v'=0-7$ низшего ридберговского перехода $B^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 . Проанализированы особенности взаимодействия $H_2(B^1\Sigma_u^+)$ с веществом матрицы. Библ. 23.

М.П.

гр. 1983, 18, № 2

H₂

1982

§ 4 Б189. Самое низкое ридберговское состояние H₂ в Ne-матрице. Lowest rydberg state of H₂ in a Ne-matrix. Böhmer W., Haensel R., Schwentner N., Boursey E., Chergui M. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 91, № 1, 66—68 (англ.)

Ридберговское
состояние

Измерен вакуумный УФ-спектр поглощения молек. водорода изолированного в неоновой матрице ($T = 5 \pm 1$ К, подложка LiF, $M/R = 1:200$). В области 11—12,2 эВ наблюдалась группа полос с полушириной 125 ± 10 мэВ, интерпретированная как прогрессия по $v' = 0-7$ самого низкого по энергии ридберговского перехода $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$. По сравнению со спектром газообразного водорода полосы с $v' \leq 6$ незначительно сдвинуты в область больших энергий, а величина колебательного интервала (Δv) меняется в прогрессии от 0,15 до 0,13 эВ, что несколько меньше, чем для газовой фазы (для газ. H₂ Δv меняется от 0,163 до 0,138 эВ).

В. М. Ковба

X. 1983, 10, № 4

H_2

1982

11 Д106. Преддиссоциация H_2 в состоянии $D^1\Pi_u$ вблизи порога. Predissociation of the $D^1\Pi_u$ state of H_2 near threshold. Borondo F., Eguiaga-gay L. R., Riera A. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys», 1982, 15, № 6, 899—908 (англ.)

Для процесса преддиссоциации молекулы H_2 в состоянии $D^1\Pi_u$ проведен квантовомеханич. расчет отношения ветвления, $\Omega = \frac{\sigma(2s)}{\sigma(2s) + \sigma(2p)}$, показывающего относит. выход $H(2s)$ и $H(2p)$. Волн. ф-ции и энергии H_2 в состояниях $|\psi_1\rangle (B^1\Sigma_u^+)$, $|\psi_2\rangle (B'^1\Sigma_u^+)$ и $|\psi_3\rangle (B''B^1\Sigma_u^+)$ рассчитывались методом полного конфигурац. взаимодействия в базисе ГФ ($6s3p$) для межъядерных расстояний (R) в районе от 3 до

преддиссоциация в состоянии $D^1\Pi_u$;

ар. 1982, 18, n 11

20 ат. ед. Полученные ф-ции использовались далее для расчета матричных элементов $\langle \psi_i | d/dR | \psi_j \rangle$ и $\langle \psi_i | d^2/dR^2 | \psi_j \rangle$, необходимых для решения динамич. задачи. Найденное в результате расчета значение $\Omega = 0,7$ показывает, что использованное ранее для оценки Ω приближение Ландау—Зинера не приемлемо.

А. И. Дементьев

H₂

1982

/ 97: 44672c Predissociation of the D $^1\Pi_u$ state of hydrogen near threshold. Borondo, F.; Eguiagaray, L. R.; Riera, A. (Dep. Quim. Fis. Quim. Cuantica, Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain). *J. Phys. B* 1982, 15(6), 899-908 (Eng). A rigorous quantum-mech. treatment of the predissocn. of the D $^1\Pi_u$ state of H₂ near threshold gave a branching ratio of 0.70. The results show that the calcs. of I. V. Komarov and V. N. Ostrovsky (1979) are based on invalid dynamical assumptions and that the correctness of a calcn. cannot be inferred from the accuracy of a single phys. quantity.

негусто-
белый

D $^1\Pi_u$.

C.A. 1982, 97, 26

H₂

Ommuck 160631

1982

cremp

Bragg S.L., Brault
J.W.,
et al.,
Astrophys. J., 1982,
263, N2, Pt. 1, 999-
1004

H₂

1982

| 96:151751d An experimental study of the vibrational-rotational spectrum of molecular hydrogen. Bragg, Susan Lynn (Washington Univ., St. Louis, MO USA). 1981. 118 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. 8201729. From *Diss. Abstr. Int. B* 1982, 42(8), 3315.

neopemur.
pacrem
cnekmpa

@:A. 1982, 96, N18

$H_2 (K, \alpha)$

1982

UK chempr

/ 97: 190579u Far infrared absorption spectra in liquid and solid molecular hydrogen. Buontempo, U.; Cunsolo, S.; Dore, P.; Nencini, L. (Ist. Fis. "G. Marconi", Univ. Roma, Rome, Italy). *Can. J. Phys.* 1982, 60(10), 1422-8 (Eng). The far-IR absorption spectra of H_2 were measured in solid and liq. phases in the frequency range 300-800 cm^{-1} . A remarkable similarity between the liq. and solid spectra exists. (In the solid phase, measurements were performed at different ortho- H_2 concns., in order to investigate the influence of ortho- H_2 mols. In particular, the behavior of the S(0) line at low ortho- H_2 concns. was studied.

C.A. 1982, 97, w22

H₂

1982

2 Д446. Длинноволновые спектры ИК-поглощения жидкого и кристаллического H₂. Far infrared absorption spectra in liquid and solid H₂. Buontempo U., Cunsolo S., Dore P., Nencini L. «Can. J. Phys.», 1982, 60, № 10, 1422—1428 (англ.; рез. фр.)

Получены спектры ИК-поглощения жидкого при 18 К и кристаллического при 1,6 К водорода в области 300—800 см⁻¹ при различных конц-ях орто-пара водорода. В спектре нормального водорода наблюдаются

спектр

линии S(1) и S(0) при частотах соответствующих линий комб. рас. и их высокочастотные фононные спутники. В спектре кристаллич. параводорода ширина линии S(0) становится < 0,1 см⁻¹, в жидкой фазе эта линия исчезает. Оставшаяся широкая полоса аналогична фононному спектру кристалла. При интерпретации спектров жидкости и кристалла использованы представления делокализации вращательного возбуждения. Расчет показывает, что ширина линии S(0) возрастает при увеличении конц-ии ортоводорода C₀ по закону C₀^{2/3}, опытные данные подтверждают эту закономерность. Библ. 14. М. В. Т.

ср. 1983, 18,
N2

H_2

1982

5 Б289. Спектры поглощения жидкого и твердого H_2 в длинноволновой инфракрасной области. Far infrared absorption spectra in liquid and solid H_2 . Buon-tempo U., Cunsolo S., Dore P., Nencini L. «Can. J. Phys.», 1982, 60, № 10, 1422—1428 (англ.)

H_2 ;
На интерференционном спектрометре типа Майкельсона измерены в области частот $300-800\text{ см}^{-1}$ ИК-спектры поглощения молек. водорода, H_2 , в жидкой и тв. фазах. Измерены спектры низкого разрешения (5 см^{-1}) пара- H_2 и нормального H_2 . Проанализирована структура спектра в области экситонной линии и фоновой ветви в тв. пара- H_2 и проведено сравнение спектров в жидкой и тв. фазах. Установлено, что роль вращательных экситонов в процессах поглощения сходна как в жидкой, так и в тв. фазах. Однако спектральное разрешение 5 см^{-1} оказывается недостаточным для получения детальной информации об экситонной линии. Измерения с высоким разрешением ($0,1\text{ см}^{-1}$) выполнены для линий S(0) и S(1) тв. пара- H_2 при конц-ях

Х. 1983, 19, NS.

орто-Н₂ 3 и 10%. Изменение конц-ии орто-Н₂ оказывает сильное влияние на интенсивность и полуширину линии $S(0)$ и практически не влияет на полуширину линии $S(1)$. Полученные результаты хорошо описываются теор. моделью с использованием лоренцевского контура линии, асимметризованного в соответствии с принципом детального равновесия. С. Н. Мурзин

H₂

Am. 1453 1982

6 Д81. Многоконфигурационный метод самосогласованного поля (МК ССП) для возбужденных состояний. Multiconfiguration-self-consistent field (MC—SCF) method for excited states. Colle Renato, Salvetti Oriano. «Mol. Phys.», 1982, 47, № 4, 959—972 (англ.)

Предложен метод расчета различных возбужденных состояний одного типа симметрии в многоконфигурац. приближении ССП (МК ССП). Волн. ф-ции возбужденных состояний оптимизируются независимо при учете дополнительных условий ортогональности к низшим состояниям той же симметрии. Учет дополнительных условий проводится при построении обобщенного оператора Фока, в результате чего схема расчета возбужденных состояний для модифицированного оператора Фока совпадает со схемой расчета основного состояния. Метод проиллюстрирован на примере расчета трех низших состояний типа $^1\Sigma_u^+$ для молекулы водорода.

Е. А. Ж.

расчет, Σ_i ;

фр. 1983, 18, № 6

H₂

От. 16153

1982

16 Б9. Многоконфигурационный метод самосо-
гласованного поля (МК ССП) для возбужденных состоя-
ний. Multiconfiguration-self-consistent field (MC—SCF)
method for excited states. Colle Renato, Salvetti
Oriano. «Mol. Phys.», 1982, 47, № 4, 959—972 (англ.)

Предложен способ расчета возбужденных состояний
молекул в рамках метода МК ССП. Коэф. перед кон-
фигурациями и орбитали волновых ф-ций возбужден-
ных состояний оптимизируются отдельно для каждого
состояния с учетом ортогональности по отношению к
нижележащим состояниям той же симметрии. Условие
ортогональности учитывается при построении обобщен-
ного оператора Фока. При использовании этого моди-
фицированного оператора - вычислительная схема
остается в остальном такой же, как и для основного
состояния. Для определения самосогласованных орби-
талей использован модифицированный метод парных
вращений, при к-ром параметры вращений определяют-

расчет
потенц.
кривых,
1Σ⁺_g

X. 1983, 19, N16

ся при минимизации функционала энергии методом наискорейшего спуска, а тригонометрич. ф-ции заменяются их тейлоровским разл. с учетом членов до 2-го порядка. Отмечено, что время, необходимое для оптимизации орбиталей, имеет тот же порядок величины, что и для обычного метода ССП. Предложенный метод использован для расчета потенциальных кривых трех низших состояний молекулы H_2 симметрии $^1\Sigma_u^+$.

А. А. Сафонов.

H₂

Om. 1453

1982

(Fors. eocm.)

meopem.
pacem

/ 98: 95818h Multiconfiguration-self-consistent field (MC-SCF) method for excited states. Colle, Renato; Salvetti, Oriano (Sc. Norm. Super., 56100 Pisa, Italy). *Mol. Phys.* 1982, 47(4), 959-72 (Eng). A method was derived to calc. the MC-SCF wave functions for the various excited states of a given symmetry. The appropriate orthonormality constraints were taken into account in the construction of the generalized Fock operators. A simplification of the two by two rotation method was suggested for deriving the SCF orbitals. The method was applied to the calcn. of the wave functions for the 1st 3 states of H₂ with $^1\Sigma_u^+$ symmetry.

C.A. 1983, 98, N12.

H₂

1982

1 Д119. Карты плотности распределения импульсов в молекулах. Momentum density maps for molecules. Cook J. P. D., Brion C. E. «Moment Wave Funct. 2 Meet., Adelaide, 18—24 Febr., 1982». New York, 1982, 278—296 (англ.)

На примере молекул H₂, N₂ и CO проведено сравнение карт распределения электронной плотности в координатном и импульсном представлениях с усредненным импульсным распределением, экспериментально измеряемым с помощью неупругого рассеяния электронов (e, 2e) на молекулах. Обсуждены различия во вкладах от отдельных МО.

Е. А. Ж.

Карты
плотности
распределен.
импульсов

(42)

ф. 1983, 18, №1

H₂

оттиск 14910 1982

расчет E;

3 Б37. Эффекты квазивыврождения и эффективность расчетов молекулярных свойств методами МТВ. Кривая поляризуемости H₂. Near-degeneracy effects and efficiency of MBPT calculations of molecular properties. Polarizability curve of H₂. Diercksen Geerd H. F., Jaszuński Michał, Sadlej Andrzej J. «Chem. Phys.», 1982, 71, № 1, 105—115 (англ.)

Методами многочастичной теории возмущений (МТВ) рассчитаны энергии и компоненты поляризуемости молекулы H₂ в области межъядерных расстояний R от 1 до 6 ат. ед. Использовано приближение конечного электростатич. поля напряженности 0,005 ат. ед. Компоненты поляризуемости вдоль и перпендикулярно межъядерной оси получены численным дифференцированием наведенного дипольного момента. Вычисления выполнены в базисе ОГТ типа $(10s4p)/[6s4p]$. По отношению к одноконфигурац. волновой функции нулевого приближения, выбранной как решение хартри-фоковской задачи, по МТВ учитывались поправки 2-, 3- и 4-го порядков с волновыми функциями, включаю-

X. 1983, 19,
113

щими одно- и двукратные возбуждения. Результаты сопоставлены с данными расчетов методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений, с результатами многоконфигурац. метода ССII и с эксперим. данными. Найдено, что в окрестности равновесного межъядерного расстояния $R \sim 1,4$ ат. ед. результаты, полученные в 4-м порядке МТВ, близки к точным значениям как для энергии, так и для поляризуемостей. Однако, при $R \geq 3,6$ ат. ед. становятся существенными эффекты квазивыврождения, к-рые не могут быть учтены с одноконфигурац. волновой функцией нулевого приближения. А. В. Немухин

H₂

1982

3 Д1549. Корректирующие факторы в интенсивности комбинационного рассеяния, связанные с колебательной ангармоничностью. Их влияние на температурные измерения. Rotational Raman intensity-correction factors due to vibrational anharmonicity: their effect on temperature measurements. Drake Michael C. «Opt. Lett.», 1982, 7, № 9, 440—441 (англ.)

Показано, что в спектре когерентного антистоксовского комб. рас. относительная интенсивность двух колебательно-вращательных линий с одинаковыми номерами, но относящихся к разным колебательным переходам, определяется не только отношением заселенностей соответствующих уровней вследствие зависимости матричного элемента анизотропии поляризуемости от колебательного квантового числа. Пренебрежение этим эффектом приводит к значительным ошибкам при определении τ -ры по относит. интенсивностям линий. Рассчитаны необходимые поправки для колебательных уровней $\nu=1,2$ молекул H_2 , N_2 , O_2 и CO . Библ. 14.

СКР

(+3) Δ

ср. 1983, 18, №3

М. Р. Т.

H₂

1982

99: 130657z The pure rotation and vibration-rotation Raman spectra of isotopically substituted species of hydrogen. Edwards, H. G. M.; Farwell, D. W.; Gorvin, A. C.; Long, D. A. (Sch. Chem., Univ. Bradford, Bradford/W. Yorkshire, UK BD7 1DP). *Raman Spectrosc., Proc. Int. Conf., 8th 1982*, 287-8 (Eng). Edited by Lascombe, Jean; Huong, Pham V. Wiley: Chichester, UK. The observation and anal. are reported of the S-branch and Q-branch Raman spectra of H₂, HD, and D₂. The accuracy obtained is higher than previously obtained. The std. deviation of the rotational and vibration-rotational consts. are smaller than previously reported. The bond lengths for the various isotopic mols. are given.

ручно гра-
улам. череп

⊗ (+2) HD, D₂

C.A. 1983, 99, N16

H_2

1982

№ 3 Д597. Вращательные и колебательно-вращательные спектры комбинационного рассеяния изотопически замещенных молекул водорода. The pure rotation and vibration-rotation Raman spectra of isotopically-substituted species of hydrogen. Edwards H. G. M., Farwell D. W., Gorvin A. C., Long D. A. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8 Int. Conf., Bordeaux, 6—11 Sept., 1982». Chichester e. a., 1982, 287—288 (англ.)

М.П.

Получены вращательный (ветвь S_0) и колебательно-вращательный (ветвь Q_1) спектры молекул H_2 , HD и D_2 в газовой фазе с разрешением $0,15 \text{ см}^{-1}$. С точностью $0,004 \text{ см}^{-1}$ определены частоты линий. Из расстояний между линиями определены константы центробежного растяжения D_0 и H_0 и колебательно-вращательного взаимодействия α и β . Вычислены межъядерные расстояния r_0 и r_1 . С использованием полученных ранее данных для изотопич. молекул, содержащих тритий, рассчитано среднее равновесное межъядерное расстояние в молекуле водорода $r_e = 0,74151 \text{ \AA}$. М. В. Т.

ор. 1983, 18, № 3

H₂

1982

5 B231. Чисто вращательный и колебательно-вращательный спектры комбинационного рассеяния света изотопных молекул водорода. The pure rotation and vibration-rotation Raman spectra of isotopically-substituted species of hydrogen. Edwards H. G. M., Farwell D. W., Gorvin A. C., Long D. A. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8th Int. Conf., Bordeaux, 6—11 Sept., 1982». Chichester c. a., 1982, 287—288 (англ.)

м.п., спектр,
Ze;

На дифракционном спектре с фотографич. регистрацией с использованием Ar⁺-лазера измерены вблизи длины волны 488,0 нм чисто вращательный (S-ветвь) и в области 612,5—517,7 нм колебательно-вращательный (Q-ветвь колебательного перехода $v=1 \leftarrow v=0$) спектры КР ¹H₂, ¹H²H и ²H₂. Точность определения частот переходов составляла около 0,004 см⁻¹. Анализ спектров выполнен с учетом центробежного искажения и колебательно-вращательного взаимодействия. С учетом данных

X. 1983, 19, N5

для $^2\text{H}^3\text{H}$, $^1\text{H}^3\text{H}$ и $^3\text{H}_2$ определено взвешенное среднее
межъядерное расстояние $r_e = 74,151$ (1) пм.
С. Н. Мурзин



H₂

Оттиск 16011 1982

лазерный
спектр

Eng R. S., Ke R. T.,
Spectrosc. Lett., 1982,
15, N 10-11, 803-929.

№2

1982

расчёт
потенци-
альных

18 Б7. Обычные теоретико-полевые методы для волновых функций метода ССП, описывающих образование связей и их диссоциацию. II. Случай коммутативной связи. Ordinary field-theoretic methods for self-consistent wave functions which describe bond formation and dissociation. II. Commutative coupling case. England Walter B. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4th Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20, June, 1982. Contrib. Pap., Pt 3, 905—914 (англ.)

† Для учета корреляции электронов в молек. расчетах предложено использовать теорию Хартри — Боголюбова — Валатина с гамильтонианом Липкина. Получаемые при этом волновые функции типа Бардина — Купера — Шриффера используются как вакуумные для диаграммной теории возмущений Фейнмана — Дайсона — Голдстоуна в представлении Намбу. Обсуждена связь развиваемого подхода с многоконфигурац. методом ССП и

(41)

X. 1983, 19, N 18

F2

обобщенным методом валентных связей. Рассмотрено приближение коммутативной связи, когда введено требование коммутации (в представлении вторичного квантования) операторов самосогласованной энергии и самосогласованного парного потенциала. На примере расчета потенциальных кривых основного состояния молекул H_2 и F_2 обсуждена точность рассмотренного приближения.

В. Б. Павлов-Веревкин



H₂

1982

98: 43441k Spectroscopy and lifetime measurements of some $N = 3$ and $N = 4$ levels of molecular hydrogen. Eyler, Edward Eugene (Harvard Univ., Cambridge, MA USA). 1982. 313 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8222620. From *Diss. Abstr. Int. B* 1982, 43(5), 1526.

fmn;

C. A. 1983, 98, N6.

H₂

От. 15947, а¹ 1982

5 Д379. Наблюдение состояния $4s^3\Sigma_g^+$ H₂. Observation of the $4s^3\Sigma_g^+$ state of H₂. Eyler E. E., Pipkin F. M. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 11, 5315—5318 (англ.)

Излучением в диапазоне 4200÷4600 Å от перестраиваемого одномодового лазера на красителе осуществлено возбуждение 14 переходов из метастабильного состояния $C(2p)^3\Pi_u$ молекул H₂ в более высокий ранее неизвестный электронный терм. В области 1800 Å измерен спектр люминесценции с этого терма и найдено, что радиационно распадаются колебат. уровни 1 и 2, а с более высоких колебат. уровней происходит преддиссоциация с характерным временем $5,4 \cdot 10^{-10}$ с. Из анализа спектров поглощения и люминесценции определены спектроскопич. постоянные терма: $\omega_e = 2356 \pm 4$ см⁻¹, $\omega_e x_e = 66 \pm 2$ см⁻¹. По мнению авторов, этим термом является триплетное состояние $4s^3\Sigma_g^+$. Б. Ф. Гордиец

М.А;

Фр. 1983, 18, N 5

H_2

Om. 15947, "a"

1982

97: 22627Sm Observation of the $4s^3\Sigma_g^+$ state of diatomic hydrogen. Eyler, E. E.; Pipkin, F. M. (Lyman Lab. Phys., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(11), 5315-18 (Eng). A blue continuous wave dye laser was used to excite 14 transitions from the metastable $c(2p)^3\Pi_u$ state to a previously unknown electronic state of H_2 , believed to be the $(4s)^3\Pi_g^+$ state. The obsd. transitions are all Q branches and are diagonal in vibrational quantum no. Levels with $v = 0$ and $v = 1$ are detected by their radiative decay, but all of the $v = 2$ levels are predissociative with lifetimes on the order of 500 ps. Approx. mol. consts. were derived from the spectra and are similar to those of the H mol. ion. The effective quantum no. is $n^* = 3.97$, in agreement with the quantum defect found for lower triplet s states.

 $4s^3\Sigma_g^+$ C.A. 1982, 97, 126

H₂

Ом. 15947,2" 1982

9 Б164. Наблюдение состояния $4s^3\Sigma_g^+H_2$. Observation of the $4s^3\Sigma_g^+$ state of H_2 . Eyler E. E., Pipkin F. M. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 11, 5315—5318 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера (420—460 нм) с разрешением 10—100 МГц измерены спектры возбуждения молекул H_2 из метастабильного состояния $c(2p)^3\Pi_u$. Возбуждение в состояние $c^3\Pi_u$ осуществлялось бомбардировкой электронами низкой энергии коллимированного молек. пучка H_2 . Наблюдено 14 переходов, являющимися Q-ветвями с $v'=v''$ и выполнено их отнесение. Показано, что возбужденное состояние для наблюдаемых переходов является состоянием $4s^2\Sigma_g^+H_2$. На основании колебательного и вращательного анализа новой системы рассчитаны молек. постоянные для состояния $4s$: $\omega_e=2356\pm 4$, $\omega_e x_e=66\pm 2$, $B_e=29,6\pm \pm 0,6$, $\alpha_e=1,8\pm 0,4$ см⁻¹. Полученные значения хорошо согласуются с данными для молек. иона H_2^+ . Обнару-

М.П.

Х. 1983, 19, № 9

жена предиссоциация уровней с $v=2$ верхнего состояния, обсужден ее механизм и предложена соотв. схема расположения потенциальных кривых. На основании сравнения расчетного положения уровня $v=0, N=0$ с основным состоянием H_2^+ рассчитано эффективное главное квантовое число $n^*=3,97$. Отмечено, что рассчитанный квантовый дефект (0,03) так же мал, как и для низших триплетных s -состояний ($n=2,3$) H_2 .

С. Б. Осин

H₂

1982

Ghodgaonkar A.M.,
Ramani K.

Рачеѐм
До;

Acta Phys. pol., 1982,
A 61, N 1-2, 151-154.

●
(cr. O_2^+ ; III)

H_2

1982

11 Д65. Расчеты двухатомных молекул методом ПДДП в расширенном базисе. Extended basis NDDO calculations on diatomic molecules. Gleghorn John Tyler, McConkey Frederick William. «Theor. chim. acta», 1982, 61, № 3, 283—293 (англ.)

На примере расчета потенц. кривых и спектроскопич. постоянных молекул H_2 , Be_2 , C_2 , OH^- , N_2 , BH , F_2 , LiH , CH^+ , HF , CN^- , CO , BF и LiF исследована корректность метода ПДДП (пренебрежение двухатомным диффер. перекрыванием) при расширении базисной системы АО. Полученные данные указывают, что расширение базиса в приближении ПДДП не уменьшает, а в ряде случаев увеличивает погрешность расчета. А. И. Дементьев

расчет

(113)

18

ор. 1982, 18, 111

H₂

1982

5 Д112. Двукратно возбужденные автоионизационные состояния H₂. The doubly excited autoionizing states of H₂. Guberman Steven L. «Int. J. Quantum Chem.», 1982, Quantum Chem. Symp. № 16: Proc. Int. Symp. Quantum Chem., Theory Condens. Matter, and Propag. Meth. Quantum Theory Matter, Flagler Beach, Fla, March 1—3, 7—13, 1982, 668 (англ.)

потенц.
кривые

Рассчитаны кривые потенц. энергии 24 двукратно возбужденных автоионизационных состояний H₂. Основные орбитали большинства изученных состояний соответствуют нижним $^2\Sigma_u^+$ и $^2\Pi_u$ -состояниям H₂⁺. Полученные кривые могут быть использованы при интерпретации результатов экспериментов по возбуждению H₂ электронным ударом. А. В. Зайцевский



④ H₂⁺

оп. 1983, 18, N5 ●

H₂

1982

9 Б36. Дважды возбужденные автоионизационные состояния молекулы H₂. The doubly excited autoionizing states of H₂. Gubert ~~man~~ Steven L. «Int. J. Quantum Chem.», 1982, Quantum Chem. Symp. N16: Proc. Int. Symp. Quantum Chem., Theory Condens. Matter, and Propag. Meth. Quantum Theory Matter, Flagler Beach, Fla, March 1—3, 7—13, 1982, 668 (англ.)

Li;

Краткое сообщение о расчете 24 возбужденных автоионизационных состояний молекулы H₂, представляющих интерес для интерпретации эксперим. данных по фотовозбуждению и возбуждению электронным ударом.

В. И. Пупышев

X. 1983, 19, N 9

H₂

1982

20 Б68. Адаптация потенциала: о применении потенциала Морзе вместо полиномиального потенциала осциллятора для решения задачи на собственные значения линейным вариационным методом. Gustav K., Gelditz R. Potentialsadaptation: Zur Verwendung des Morse-Potentials anstelle eines polynomischen Oszillatorpotentials beim Eigenwertproblem im Rahmen des linearen Variationsverfahrens. «Z. Chem.», 1982, 22, № 3, 115—116 (нем.)

Для нахождения колебательных уровней энергии двухатомных молекул предложено аппроксимировать потенциальную кривую кривой Морзе и решать соответствующее уравнение Шредингера в базисе собственных функций гармонич. осциллятора. Получены явные выражения для необходимых матричных элементов. Метод применен к вычислению колебательных уровней энергии в основном электронном состоянии молекул H₂ и HCl. Полученные результаты сопоставлены с результатами расчета др. методами и с эксперим. данными.

В. Б. Павлов-Веревкин

Л.В. Мух.
расчет

⊗
(H)

Х. 1982, 19, № 20

H_2

1982

5 Б26. Модель боровских орбит и рюденберговская теория происхождения энергии связывания для H_2 . Bohr orbit model and ruedenberg's theory of the origin of the binding energy for H_2 . Harcourt Richard D., Solomon Helen, Beckworth John, Chislett Leigh. «Amer. J. Phys.», 1982, 50, № 6, 557—559 (англ.)

расчет



Молекулы H_2 и H_2^+ рассмотрены с помощью модели, в рамках к-рой электрону отвечает круговая орбита, в плоскости, перпендикулярной оси молекулы. Параметры модели — радиус и смещение орбиты относительно центра симметрии молекулы определены из условия экстремума энергии. Отмечено, что такая простая модель позволяет качественно правильно описать равновесную геометрию и энергию диссоциации и подтвердить взаимобусловленность хим. связывания и понижения кинетич. энергии при образовании молекулы. Для H_2 рассмотрена также модель разных орбит для разных электронов.

В. И. Пупышев

Х. 1983, 19, № 5

H₂

1982

12 Д148. Орбитальная модель Бора и теория Рюденберга о природе энергии связи в молекуле H₂. Bohr orbit model and Ruedenberg's theory of the origin of the binding energy for H₂. Harcourt Richard D., Solomon Helen, Beckworth John, Chislett Leigh. «Amer. J. Phys.», 1982, 50, № 6, 557—559 (англ.)

расчет



Для вычисления энергии E молекулы H₂ предлагается вместо решения уравнения Шрёдингера использовать модель Бора, в которой два электрона движутся по одной и той же орбите радиуса $r(1)$ и по двум орбитам, центры которых находятся на расстояниях $r \operatorname{ctg} \theta$ (2); θ — угол между радиусом вектором проведенным от ядра к электрону, и линией ядер. В моделях (1) и (2) плоскости орбит перпендикулярны этой линии, а энергии определяются ф-лами (в ат. ед.):

Ф. 1982, 18, N 12

$$E = 1/r^2 - 4/(r^2 + R^2/4)^{1/2} + 1/2r + 1/R \quad (1) \text{ и}$$

$$E = 1/r^2 - 2/[r^2/\sin^2 \theta + R^2 - 2rR \operatorname{ctg} \theta]^{1/2} - 2 \sin \theta/r +$$

$$+ [r^2/\sin^2 \theta + R^2/2 - rR \operatorname{ctg} \theta]^{1/2}/2 + 1/R \quad (2).$$

Из (1) и условий равенства нулю производных от E по R (R — расстояние между ядрами) и r следует, что $R_e = 0,5825 \text{ \AA}$; $r = 0,5044 \text{ \AA}$ и $D_e = 2,734 \text{ эВ}$. По (2) минимум энергии достигается при совпадении обеих орбит и при тех же R_e , r , D_e . Точные значения R_e и D равны $0,741 \text{ \AA}$ и $7,747 \text{ эВ}$. Применение орбитальной модели Бора к H_2^+ приводит к выводу о нестабильности этого иона.

М. А. Ковнер

H₂

1982

97:79222h Bohr orbit model and Ruedenberg's theory of the origin of the binding energy for molecular hydrogen. Harcourt, Richard D.; Solomon, Helen; Beckworth, John; Chislett, Leigh (Dep. Phys. Chem., Univ. Melbourne, Parkville, 3052 Australia). *Am. J. Phys.* 1982, 50(6), 557-9 (Eng). By using the electron-particle orbit models of N. Bohr (1913) for the H atom and the H₂ mol., the dissocn. energy of H₂ was shown to result essentially from a large decrease of the kinetic energy when the 2 electrons are moved into the bond region, in agreement with the kinetic-energy-depression theory of K. Ruedenberg (1962, 1975).

No,
meop pacret

C:A.1982, 97, N10

H₂

От. 19215

1982

(обзор)

10 Б1161. Молекулярный водород в лаборатории и пространстве. Molecular hydrogen in the laboratory and in space. Herzberg Gerhard. «Trans. Roy. Soc. Can.», 1982, 20, 151—178 (англ.)

Обзор. Посвящен результатам эксперим. и теор. исследований спектров и нек-рых энергетич. св-в молек. водорода (H₂, HD, D₂, H₃, H₃⁺, D₃, D₃⁺) за последние 15 лет. Рассмотрен вопрос определения по электронным и колебательным спектрам молек. водорода в атмосфере планет, звезд и в межзвездном пространстве. Библ. 70.

В. М. Ковба

Журнал
и теор. и эксп.
спектров

(fE) ☒

Х. 1984, 19, N10

H₂

[Om. 17585] 1982.

6 Д425. Состояния молекул H₂ и D₂ с высоким орбитальным угловым моментом. High orbital angular momentum states in H₂ and D₂. Herzberg G., Jungen Ch. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 12, 5876—5884 (англ.)

В ИК-эмиссионном спектре молекул H₂ и D₂, возбужденных в полом катode, охлаждаемом жидким азотом, обнаружены две серии линий в области 2500—5700 см⁻¹. Первая серия вблизи 2500 см⁻¹ отнесена к вращательной структуре ридберговского комплекса переходов 5g—4f, а вторая серия вблизи 5500 см⁻¹ — к вращательной структуре переходов 4f—3d. Анализ спектров выполнен на основании расчета частот и интенсивностей линий в рамках модели, учитывающей поляризацию и квадрупольный момент ионного остова H₂, а также взаимодействие ридберговского электрона с вращением и колебанием остова H₂. Идентифицированы линии R- и Q-ветвей с $f < 10$ и $v \leq 5$ ($\Delta v = 0$)

спектр,
м.п;

④ ⊗

Op. 1983, 18, N 6

системы $5g-4f$. Показано, что вследствие полного разрыва связи электронного орбитального момента с осью молекулы структура этой системы сильно отличается от структуры обычных систем полос. Более 200 линий системы $4f-3d$ не идентифицировано. Малые ширины линий свидетельствуют об отсутствии преддиссоциации и преионизации ридберговских состояний H_2 с $n \leq 5$ в мксек масштабе времени. М. Р. Алиев



H₂

Om. 17585 1982

98: 43359q High orbital angular momentum states in diatomic hydrogen and diatomic deuterium. Herzberg, G.; Jungen, C. (Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(12), 5876-84 (Eng). A characteristic group of lines obsd. in the IR emission spectrum of H₂ was identified as representing the transitions between the 5g and the 4f group of levels. Because of nearly complete uncoupling of *l* from the mol. axis, the appearance of this group of lines is very different from a normal band spectrum. An anal. was possible on the basis of ab initio computations of the spectrum using the knowledge of the vibrational levels, quadrupole moment, and the polarizability of the H₂⁺ core. The validity of the assignments was further corroborated by agreement of the predicted spectra of D₂ with the obsd. spectra. In addn., similar transitions corresponding to 4f-3d were obsd.

cremp UK

~~(4)~~ D₂

C.A. 1983, 98, NB.

H₂

От. 17585

1982

11 Б186. Состояния с высокими орбитальными угловыми моментами в H₂ и D₂. High orbital angular momentum states in H₂ and D₂. Herzberg G., Jungen Ch. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 12, 5876—5884 (англ.)

ИК-спектры испускания (СИ) молекул H₂ и D₂, полученные при разряде в полом катоде, исследованы при высоком разрешении в области 2500 см⁻¹; кроме того наблюдаются спектры испускания H₂ в области 5700 см⁻¹. Анализ спектров выполнен на основе неэмпирич. расчетов спектров с использованием известных величин колебательных уровней энергии, квадрупольного момента и поляризуемости остова H₂⁺. Наблюдаемые группы линий H₂ при 2500 см⁻¹ отнесены к переходам между 5g и 4f группами уровней. Вследствие почти полной несвязанности орбитального момента *l* с молек. осью, вызванной доминирующим влиянием молек. вращения, структура этой группы линий отличается от нормального полосатого спектра. Вычислены относит. интенсив-

спектр, м.п.

(4) D₂

Х. 1983, 19, N 11

ности и силы осцилляторов линий H_2 . Радиационное время жизни водородного $5g$ уровня оценено 0,24 мкс и соответствующее время жизни молекулярного состояния не ожидается короче. Из анализа $5g-4f$ групп линий в спектрах следует, что $5g$ уровни стабильны по отношению к преддиссоциации и предионизации. Спектр испускания H_2 при 5770 см^{-1} отнесен к $4f-3d$ переходам между молекулярными уровнями с высокими Ридберговскими уровнями и с высокими значениями l . В. М. Михайлов



H₂

1982

З Д216. Расчет эффективного сечения возбуждения

$H_2(X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+)$ в комбинированном методе сильной связи и R -матрицы. Excitation cross sections of the $H_2(X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+)$ by the combined close-coupling — R -matrix method. Holley Thomas K., Chung Sung-gi, Lin Chun C., Lee Edward T. P. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1982, 26, № 4, 1852—1857 (англ.)

расчет
сечения
возбуждения

Предложен приближенный метод для расчета сечения возбуждения $H_2(X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+)$ электронным ударом в области низких энергий. Обменное взаимодействие учитывалось в методе R -матрицы внутри сферы радиуса a , причем в качестве базисных ф-ций использовались ф-ции, получаемые приближенным методом сильной связи. Решение на сфере $r=a$ использовалось в качестве граничного условия для интегрирования ур-ний рассеяния при $r>a$ по методу сильной связи,

ср. 1983, 18, № 3

причем обменное взаимодействие в этой области не учитывалось. Сравнение с расчетами по методу сильной связи в полной постановке дает согласие в пределах 5%, в то время как при учете шести каналов и 2—3 базисных волн. ф-ций на канал в методе R -матрицы затраты машинного времени сокращаются в 5 раз.

А. Н. Звев

H₂

DM · 32319

1982

23 В/8. Влияние электронной корреляции на теоретические колебательные частоты. Hout Robert F., Levi Beverly A., Jr., Nehre Warren J. Effect of electron correlation on theoretical vibrational frequencies. «J. Comput. Chem.», 1982, 3, № 2, 234—250 (англ.)

Для молекул H₂, LiH, BH, FH, Li₂, LiF, BeO, BF, CO, N₂, F₂, BH₃, CH₄, NH₃, H₂O, LiOH, B₂H₆, HBNH, HBO, C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆, HCN, CHNC, CH₂NH, CH₃NH₂, H₂CO, CH₃OH, HCF, CH₃F, транс-N₂H₂, N₂H₄, HNO, транс-NH₂OH, H₂O₂, HOF проведен расчет колебательных частот по двум неэмпирически найденным силовым полям. Одно из них получено с помощью метода Хартри—Фока в базисе из сгруппированных гауссовых ф-ций 6—31 ГФ*. Другое найдено в результате последующего частичного учета электронной корреляции по теории возмущений Мёллера—Плессета 2-го порядка. Найдено, что частоты, рассчитанные методом Хартри—Фока, в среднем на 12,6% выше экспериментальных. Частоты, полученные методом Мёллера—Плессета, отличаются от эксперим. на 7,3%. Найден-

расчет Vi

35

X, 1982, 19, №23

ные частоты использованы для расчета абс. молек.
энтропий и энтропий отдельных реакций.

Б. И. Жилинский

ан.
класс

H₂

1982

6 Д44. Оптимизация геометрии в неэмпирических расчетах методом ССП. VII. Значения сродства к протону и строение ионов, рассчитанные при помощи оптимизации геометрии с плавающими орбиталями (ОГПО). Geometry optimization in ab initio SCF calculations. VII. Proton affinities and ion structures calculated with floating orbital geometry optimization (FOGO). Huber Hanspeter, Vogt Jürgen. «Chem. Phys.», 1982, 64, № 3, 399—411 (англ.)

Ан+, геометр.
структура

Методом ССП рассчитаны значения сродства к протону для молекул H₂, HF, NH₃, H₂O, CH₃OH, C₂H₅OH, H₂O₂, CH₂O, CO и CH₂CO, а также равновесные геометрич. параметры, дипольные и квадрупольные мо-

(+9)



HF, NH₃, H₂O, CH₃OH,
C₂H₅OH, H₂O₂, CH₂O,
CO, CH₂CO

Ф. 1982, 18, № 6.

менты соответствующих протонированных молекул. В расчетах использовался базисный набор сжатых гауссовых орбиталей ($4s/2s$ для атома Н и $7s3p/4s2p$ для остальных атомов). Все орбитали атомов Н и наиболее диффузные p -орбитали считались плавающими и положение их центров оптимизировалось параллельно с оптимизацией ядерной конфигурации при определении равновесной геометрии. Приведено подробное сопоставление результатов с эксперим. данными. Сравнение с имеющимися в литературе расчетами показало, что использование метода ОГПО позволяет ограничивать базисный набор без заметного снижения точности результатов.

А. В. Зайцевский

N_2

1982

Muher - Walchli Peter,
et al.

КАРС
спектр
в сверхзвук.
состоянии.

J. Chem. Phys. 1982,

76 (1), 273-284.



(сер. N_2 ; III)

H₂

1982

12 Б69. Оптимизация геометрии в неэмпирических расчетах методом ССП. 7. Расчеты сродства к протону и структуры ионов методом оптимизации геометрий с плавающими орбиталями (ОГПО). Huber Hanspeter, Vogt Jürgen. Geometry optimization in ab initio SCF calculations. VII. Proton affinities and ion structures calculated with floating orbital geometry optimization (FOGO). «Chem. Phys.», 1982, 64, № 3, 399—411 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в варианте ОГПО («Theoret. Chim. Acta», 1980, 55, 117) рассчитаны H₂, HF, NH₃, H₂O, CH₃OH, C₂H₅OH, H₂O₂, CH₂O, CO, CH₂=C=O и их протонированные формы. Оптимизированные геометрии нейтр. молекул и значения сродства к протону, вычисленные с учетом эмпирич. поправок на энергию нулевых колебаний (6—9 ккал/моль), хорошо согласуются с экспериментом. В. Фаустов

⊗
(+9)

Геометр,
структура,

А*
Ан*

Х. 1982, 19, N 12

H₂

OMMuck 14095 1982

memo for
usam. enck

' 97:14210h Laboratory measurements of the pure rotation S(2) and S(3) transitions in diatomic hydrogen. Jennings, D. E.; Brault, J. W. (Goddard Space Flight Cent., NASA, Greenbelt, MD 20771 USA). *Astrophys. J.* 1982, 256(1, Pt. 2), L29-L31 (Eng). Frequencies and transition rates were measured for S(2) and S(3) in the pure rotation ground-state spectrum of H₂. For S(2) the detd. frequency, 814.4250 ± 0.0005 cm⁻¹, is 0.027 cm⁻¹ lower than the value used by S. C. Beck et al. (1979) in their detection of this line in the Orion mol. cloud. The S(3) frequency is 1034.67035 ± 0.00010 cm⁻¹. Transition probabilities measured for S(2) and S(3) are $3.1 \pm 0.4 \times 10^{-9}$ s⁻¹ and $9.9 \pm 0.5 \times 10^{-9}$ s⁻¹, resp.

C.A. 1982, 97, N².

H₂

Ummuck 15882
on. 16060

1982

Tohri G.K., Rishikwar R.P.,

квартален.
номер

Indian. J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20, N6

● 506-507.

1982

1 Б133. Вращательно разрешенная фотоэлектронная спектроскопия $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, HD и D_2 . Rotationally resolved photoelectron spectroscopy of $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, HD, and D_2 . Jollard J. E., Trevor D. J., Reutt J. E., Lee Y. T., Shirley D. A. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 34—46 (англ.)

С использованием сверхзвукового источника молек. пучков измерены (разрешение 11 мэВ) фотоэлектронные спектры (He 1α ; 584 А) $n\text{-H}_2$, $p\text{-H}_2$, HD, D_2 . Для варьирования относит. интенсивности вращательных переходов за счет изменения распределения молекул по вращательным состояниям, спектры измерялись при различных t -рах потока и давлениях газа. Получены след. значения (в см^{-1}) молек. постоянных ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$, $\omega_e z_e$, B_e , α_e , D_0^0 (энергия диссоциации) и r_e (в А) для основного состояния ионов ($X^2\Sigma_g^+$): H_2^+ —2324,4; 67,84; 1,000; —0,0308, 21375, 29,99; 1,388;

(+2) Δ

X. 1983, 19, N1.

1,056; HD⁺ —2014,6; 51,42; 0,687; —0,0181; 21515;
 23,03; 0,901; 1,044; D₂⁺ —1646,4; 34,07; 0,354;
 —0,0077; 21687; 14,89; 0,471. 1,060. Приведены экспе-
 рим. значения $\Delta G_{v+1/2}$ и сечения фотоионизации для
 переходов H₂⁺ (X²Σ_g⁺, v'=0—17) — H₂ (X¹Σ_g⁺, v''=0),
 HD⁺ (X, v'=0—20) — HD (X, v''=0), D₂⁺ (X, v=
 =0—23) — D₂ (X, v''=0), вращательные молек. по-
 стоянные B_v для H₂⁺ (v_x=0—15), HD⁺ (v_x=0—18) и
 D₂⁺ (v_x=0—19), а также D_v' для H₂⁺ (v_x=0—10).

В. М. Ковба



H_2

1982

10 Б21. Исследование водорода в никеле с помощью метода кластеров в конденсированном веществе. Cluster in condensed matter method study of hydrogen in nickel. Keller Jaime, Castro Miguel, de Paoli Angel Luis. «J. Appl. Phys.», 1982, 53, № 12, 8850—8855 (англ.)

гометр,
структура

В рамках метода многократного рассеяния с использованием моделей молек. кластера и кластера, «погруженного» в конденс. в-во, рассчитано электронное строение атома H в октаэдрич. окружении атомов Ni, моделирующем кристалл ферромагнитного Ni. При построении кластерного потенциала использовалось спин-неограниченное $X_{\alpha\beta}$ -приближение. Связь между водородом и никелем исследовалась на примере молекул H_2 , Ni_2 и H_2Ni_2 . Для кластера Ni_6-H вычислены приближенное значение энергии поглощения H в никеле, частота колебания атома H, магнитный момент кластера, а также изменения локальной парамагнитной восприимчивости и сверхтонкого поля на ядре H и в

ⓧ
(73)

X. 1983, 19, N 10

H₂

[Om. 16287]

1982

Kello V.,

критич.
попытки
измерения,
спектроск.
константы

Chem. Zvesti 1982, 36(3)
289-299.



H₂

1982

Kerle K.

дисперсия
показателя
преломле-
ния

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1982, 86, N 9,
812-820.

(см. He; I)

H₂

(Om. 24988)

1982

/ 96: 207535f Probabilities of $d^3\Pi_u^- \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ radiational transitions of the hydrogen molecule. Kirbyat'eva, T. V.; Lavrov, B. P.; Ostrovskii, V. N.; Tyutchev, M. V.; Ustimov, V.

I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1982, 52(1), 39-46 (Russ). The measured relative transition probabilities in the v'' progression of bands of the α Fulcher system show the correct application of the Franck-Condon approxn. to $d^3\Pi_u^- \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ transition: data of H₂ and permitted the semiempirical detn. of all probabilities of the $d^3\Pi_u^-, v', N' \rightarrow a^3\Sigma_g^+, v'', N'$ radiative transitions.

f_{mn}

$d^3\Pi_u^- \rightarrow a^3\Sigma_g^+$

C. A. 1982, 96, N 24.

H₂

Оп. 24988

1982

9 Б1269. Вероятности радиационных $d^3\Pi_n^- \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ -переходов молекулы водорода. Кирбятъева Т. В., Лавров Б. И., Островский В. Н., Тютчев М. В., Устимов В. И. «Оптика и спектроскопия», 1982, 52, № 1, 39—46

Измерения относит. вероятностей переходов в v' -прогрессиях полос α -системы Фулхера показали неприменимость приближения Франка—Кондона к $d^3\Pi_n^- \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ -переходу молекулы H₂ и позволили полуэмпирически определить всю совокупность вероятностей $d^3\Pi_u^-, v', N' \rightarrow a^3\Sigma_g^+, v'', N'$ радиац. переходов.

Резюме.

Спектр,
вероятн.
переходов

X - 1982, 19, №9.

H_2

1982

X-B и X-E-
переходы

1 Д259. Неупругое рассеяние электронов высокой энергии молекулами водорода. Ч. I. X-B- и X-E-переходы. Inelastic high-energy electron scattering from a hydrogen molecule. I. X-B and X-E transitions. Kołos Włodzimierz, Monkhorst Hendrik J., Szalewicz Krzysztof. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 3, 1335—1344 (англ.)

В первом борновском приближении проведены расчеты обобщенных сил осцилляторов для неупругого рассеяния быстрых электронов молекулами H_2 . Обсуждается возбуждение как оптически разрешенных — $B^1\Sigma_u^+$, так и оптически запрещенных — $E^1\Sigma_g^+$ состояний молекулы H_2 , первоначально находящейся в основном состоянии — $X^1\Sigma_g^+$. Для описания электронных состояний H_2 используются точные волн. ф-ции, представляемые в виде разложений по коррелированному гауссовскому базису. Анализируется зависимость форм-факторов переходов от ориентации молекулы, величин-

ср. 1983, 18, N 1

ны передаваемого момента и межъядерного расстояния. Сравнение полученных результатов с расчетами, выполненными с учетом приближения Франка—Кондона, показывает правомерность использования последнего во всех рассматриваемых случаях. Отмечается, что борновские обобщенные силы осцилляторов для оптически разрешенных переходов в области малых передаваемых импульсов очень близки к их точным значениям, которые были получены с волн. ф-циями, явным образом включающими различные степени межэлектронного расстояния в молекуле.

В. С.



H₂

[Dm. 16237]

1982

14 Б182. Лабораторные наблюдения индуцированного столкновениями испускания в области фундаментальной колебательно-вращательной полосы H₂. Laboratory observations of collision-induced emission in the fundamental vibration-rotation band of H₂. Krech R., Caledonia G., Schertzer S., Ritter K., Wilkerson T., Cotnoir L., Taylor R. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 49, № 26, 1913—1916 (англ.)

Измерены спектры индуцированного столкновениями испускания H₂ в области основной колебательной полосы ~~(2,4 мкм)~~ в смесях H₂/Ar (10 или 20% H₂), нагретых до 1000—3000 К и сжатых до 49 амага в ударной трубе. Предположено, что наблюдаемое испускание обусловлено, главным образом, взаимодействием H₂—Ar с малым вкладом взаимодействия H₂—H₂. В спектре обнаружено также фоновое испускание, присутствующее и в чистом аргоне, природа которого не выяснена. Установлено, что интенсивность испускания H₂ зависит от квадрата плотности газа, что подтверждает столкновительный характер испускания. Проанализирован контур

спектры

X. 1983, 19, N14

наблюдаемой Q-ветви H_2 и рассчитаны приведенные силы полос для смеси 20% H_2 и 80% Ar в интервале 273—3000 К. Отмечено, что форма контура является почти симметричной, что может быть связано с вкладом полосы $v=2 \leftarrow v=1$. Полуширина полосы испускания H_2 составляет $\sim 0,5$ мкм, что хорошо согласуется с теор. выводами. В ряде случаев абс. интенсивности испускания измерены с помощью интегрирующего радиометра и получено хорошее согласие с данными спектров с волновым разрешением. Показано, что интенсивность ИК-испускания остается постоянной во время эксперимента в ударной трубе, что указывает на стационарность условий.

С. Б. Осин

H₂

[Om. 16237]

1982

9 Д452. Лабораторное наблюдение индуцированного столкновениями испускания в области основной колебательно-вращательной полосы H₂. Laboratory observations of collision-induced emission in the fundamental vibration-rotation band of H₂. Krech R., Caledonia G., Schertzer S., Ritter K., Wilkerson T., Cotnoir L., Taylor R., Birnbaum G. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 49, № 26, 1913—1916 (англ.)

спектр,
М.П.

Получены спектры ИК-испускания газообразного водорода в смеси с аргоном при t -рах 1000—3000 К и плотностях до 50 амага, создающихся в ударной волне. Для регистрации спектров использована ударная труба диаметром 16 см и скоростной спектрометр, обеспечивающий запись интервала 3700—4800 см⁻¹ за 300 мкс с разрешением ~100 см⁻¹. Наблюдена широкая полоса с максимумом ~4170 см⁻¹, отнесенная к колебательному переходу 1→0, индуцированному столк-

Фр. 1983, 18, № 9

новениями молекул. Главную роль в формировании этой полосы играет колебательно-вращательная ветвь Q. Симметричная форма полосы, не согласующаяся с теоретич. предсказаниями, объяснена наложением полосы горячего перехода $2 \rightarrow 1$ на НЧ-крыло. Измерена абс. интенсивность спектра, эта величина использована для определения интегр. коэф. поглощения. При повышении т-ры коэф. поглощения возрастает как T^n , где $1 < n < 3/2$, что не согласуется с теоретич. расчетами. М. В. Т. Библ. 18.

H₂

1982

kon. Fraunhofer
spektr

96: 225634s Some characteristics of the shape of the lines of the vibrational-rotational spectrum of hydrogen and deuterium in solutions. Kouzov, A. P.; Orlova, N. D.; Pozdnyakova, L. A. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1982, 52(4), 651-6 (Russ). The contours of vibrational-rotational lines in the Raman spectra of H₂ and D₂ dissolved in liq. Ar and SF₆ were studied at temp. of 90-140 and 230-313 K resp. For the 1st time O₁ and S₁ lines were obsd. which correspond to transitions with equal changes of rotational energy that have different widths. This effect was successfully explained in the frame of Fano theory during combined taking into account of vibrational-rotational interaction and modulation of the anisotropic component of the internal potential by vibration of action mols.

 
(H) D₂
C. A. 1982, 96, N 26.

H_2

1982

23 Б28. Почему метод двухатомных фрагментов в молекулах оказывается неудовлетворительным для H_4 ? Kuntz Philip J., Chang Christian C. Why does the diatomics-in-molecules method appear to fail for H_4 ? «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 7, 1212—1213 (англ.)

 $X^1\Sigma_g^+ + b^3\Sigma_u^+$ $\textcircled{H} H_4$

Состояния $X^1\Sigma_g^+$ и $b^3\Sigma_u^+$ -молекулы H_2 , определенные с расширенным базисом в рамках метода валентных связей, проектируются при различных межъядерных расстояниях на ф-ции асимптотич. базисных наборов метода двухатомных фрагментов в молекулах для плоской системы H_4 . Показано, что для удовлетворительного описания терма триплетного состояния H_2 на малых расстояниях базис метода двухатомных фрагментов в молекулах должен включать состояние $H(2P)$. С неполнотой базиса метода двухатомных фрагментов в молекулах связывается таким образом тот факт, что рассчитанная с его помощью энергия основного электронного состояния H_4 существенно ниже энергии, определенной в эмпирич. расчетах. А. И. Маергойз

 $X. 1982, 19, 123$

— ниже основн. сост.

H₂

Оттиск 15539

1982

2 Д98. Теоретическое изучение констант спин-орбитального взаимодействия состояний $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3p)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$ и $(4f)^3\Delta_u$ молекулы H₂. Theoretical study of the spin-orbit coupling constants of the $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3p)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$, and $(4f)^3\Delta_u$ states of H₂. Langhoff Stephen R., Huo Winifred M., Partridge Harry, Bauschlicher Charles W., Jr. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 5, 2498—2513 (англ.)

расчет м.п.

Методом полного конфигурац. взаимодействия с использованием обширных базисов орбиталей слэтеровского типа рассчитаны волн. ф-ции и константы спин-орбитального взаимодействия (КСОВ) для ридберговой серии состояний H₂, сходящейся к основному состоянию H₂⁺. Проведена тщательная оптимизация базиса для состояния $c^3\Pi_u$; показана необходимость включения δ - и ϕ -АО в базис при определении КСОВ. Усредненные по колебательным состояниям значения КСОВ отличаются от экспериментальных на 4—6% для

р. 1983, 18, № 2

состояний s^3P_u и d^3P_u , на 30% для k^3P_u ; для i^3P_g и $j^3\Delta_g$ это различие не превышает эксперим. ошибок. Все КСОВ состояний $r(4d)^3P_g$ и $(4f)^3\Delta_u$ и высоких колебательных возбуждений прочих состояний получены впервые. Предполагается, что неточности в определении КСОВ k^3P_u могут быть устранены путем переоптимизации базиса.

А. В. Зайцевский

два
пот

H₂

Оттиск 15539

1982

4 Б19. Теоретическое изучение констант спин-орбитального взаимодействия для состояний $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3p)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$ и $(4f)^3\Delta_u$ молекулы H₂. Theoretical study of the spin-orbit coupling constants of the $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3p)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$, and $(4f)^3\Delta_u$ states of H₂. Langhoff Stephen R., Huo Winifred M., Partridge Harry, Bauschlicher Charles W., Уг. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, №. 5, 2498—2513 (англ.)

Методом полного учета конфигурац. взаимодействия в базисе орбиталей слейтеровского типа изучена зависимость констант спин-орбитального взаимодействия от межъядерного расстояния для состояний $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3d)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$ и $(4f)^3\Delta_u$ молекулы H₂. При расчете состояний типа $^3\Pi$ использован базис 14σ14π8δ2φ, оптимизированный для состояния $c^3\Pi_u$, а при расчете состояний типа $^3\Delta$ — базис 14σ12π8δ2φ, оптимизированный для состояния $j^3\Delta_g$.

М. П.

X. 1983, 19, N 4

Отмечено, что для получения надежных значений кон-
стант спин-орбитального взаимодействия использование
 δ - и φ -функций является существенным. Полученные ре-
зультаты использованы для вычисления констант спин-
орбитального взаимодействия, усредненных с
соотв-щими колебательными волновыми функциями. Ре-
зультаты расчетов сопоставлены с имеющимися экспе-
рим. результатами. В. Б. Павлов-Вережкин

H₂

ommuck 15539 1982

97: 171458n Theoretic study of the spin-orbit coupling constants of the $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3p)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$, and $(4f)^3\Delta_u$ states of diatomic hydrogen. Langhoff, Stephen R.; Huo, Winifred M.; Partridge, Harry; Bauschlicher,

Charles W., Jr. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(5), 2498-513 (Eng). Theor. spin-orbit coupling consts. as a function of internuclear distance $A(R)$, are reported for the $c(2p)^3\Pi_u$, $d(3p)^3\Pi_u$, $k(4p)^3\Pi_u$, $i(3d)^3\Pi_g$, $r(4d)^3\Pi_g$, $j(3d)^3\Delta_g$, and $(4f)^3\Delta_u$ states of H₂. Full CI wave functions and large Slater-type basis (STO) sets were used. A $14\sigma 14\pi 8\delta 2\varphi$ basis set optimized for the $c^3\Pi_u$ state was used in all $^3\Pi$ state calcns. and a $14\sigma 12\pi 8\delta 2\varphi$ basis set optimized for the $j^3\Delta_g$ state was used in the $^3\Delta$ calcns. The $A(R)$ were vibrationally averaged by using theor. potentials. The resulting theor. A_v values (MHz) for the $v = 0$, $N = 1$ rovibrational level compare

теорет.
расчет

спин-орбит.

расчет

по данным

состояний

C.A. 1982, 27, N 20

with the exptl. values (in parenthesis) as follows: $c(2p)^3\Pi_u$: -3887.22(-3740.987); $d(3p)^3\Pi_u$: -863.85 (-814.5); $k(4p)^3\Pi_u$: -398.8 (-306.7); $i(3d)^3\Pi_g$: -144.59 (-146); $j(3d)^3\Delta_g$: -400.82 (-409). The corresponding theor. values for the $r(4d)^3\Pi_g$ and $(4f)^3\Delta_u$ states, for which no exptl. data exist, are -47.1 and -114.78 MHz, resp. These values, as well as the calcd. A , for many of the higher vibrational levels, should be useful in future exptl. work.

H₂

1982

11 Д105. Новое рассмотрение одномерной молекулы водорода. One-dimensional hydrogen molecule revisited. Lapidus I. Richard. «Amer. J. Phys.», 1982, 50, № 5, 453—456 (англ.)

Рассчитана энергия связи в модельной одномерной молекуле H₂, потенциал взаимодействия между частицами которой имеет вид δ -функции. Расчет выполнен на основе трех различных приближенных волн. ф-ций (ВФ): ВФ H₂⁺, ВФ, построенных из симметризованных произведений ВФ атома H, и ВФ, являющихся линейной комбинацией атомных водородных орбиталей. Из указанных трех ВФ построены вариационные ВФ с использованием замены заряда ядра на эффективный заряд, определяемый из вариационной процедуры по минимуму энергии связи.

Ю. Л. Малинkevич

расчет
энергии
связи

ор. 1982, 18, № 11

H₂

1982

23 Б22. Коррелированная сфероидальная волновая функция, не содержащая подгоночных параметров, для некоторых дважды возбужденных состояний H₂. Le-sech C., Aubert-Frécon M. Correlated prolate-spheroidal wavefunction containing no adjustable parameters for some doubly-excited states of H₂. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 5; L135—L137 (англ.)

Коррелирован-
сфероидаль-
ные волно-
вые ф-ции

Предложенная ранее (см. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, 2931; 1981, 75, 2932) процедура расчета энергии двухэлектронной двухатомной системы в первом порядке теории возмущений с волновой ф-цией в сфероидальных координатах, учитывающей явно межэлектронное расстояние, применена к состояниям молекулы H₂, отвечающим возбуждениям обоих электронов: $1,3\Sigma_u(2p_{\sigma u}, 2s_{\sigma g})$, $1,3\Sigma_u(2p_{\sigma u}, 3s_{\sigma d})$.

X. 1982, 19, N23.

$^{1,3}\Sigma_u(2\rho_{\sigma_u}, 3d_{\sigma_g}), \quad ^{1,3}\Sigma_g(2\rho_{\sigma_u}, {}^3\rho_{\sigma_u})$. Энергии рассчитаны в интервале межъядерных расстояний от 1,2 до 5 ат. ед. С погрешностью $\leq 3\%$ найденные энергии согласуются с известными ранее для ряда состояний. Большинство результатов получено впервые.

А. В. Немухин,

H₂

1982

10 Д90. Не содержащие подгоночных параметров коррелированные вытянуто-сфероидальные волновые функции некоторых двукратно возбужденных состояний H₂. Correlated prolate-spheroidal wavefunction containing no adjustable parameters for some doubly-excited states of H₂. Lesech C., Aubert-Frécon M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 5, L135—L137 (англ.)

Σ_g;

Волновые ф-ции (ВФ) ряда двукратно возбужденных электронных состояний H₂(^{1,3}Σ_u⁺(2sσ_g, 2pσ_u), ^{1,3}Σ_u⁺(3sσ_g, 2pσ_u), ^{1,3}Σ_u⁺(3dσ_g, 2pσ_u), ^{1,3}Σ_g⁺(2pσ_u, 3pσ_u)) аппроксимировались произведениями двух сомножителей. Первый сомножитель представлял собой ВФ в приближении независимых электронов, второй описывал относит. движение электронов в отсутствие ядер. Для межъядерных расстояний 1,2—5,0 а. е. рассчитаны значения энергии H₂, соответствующие этому приближению для ВФ. Результаты, относящиеся к состояниям ¹Σ_u⁺, хорошо согласуются с данными точных расчетов; энергии триплетных состояний при небольших межъядерных расстояниях сильно завышены.

А. В. Зайцевский

ср. 1982, 18,
N10.

H₂

1982

23 Б152. Регистрация собственных квантовых со-

стояний молекулярного водорода с помощью трехфотон-
ной ионизации. Marinero E. E., Rettner C. T.,
Zare R. N. Quantum-state-specific detection of molecu-
lar hydrogen by three-photon ionization. «Phys. Rev.
Lett.», 1982, 48, № 19, 1323—1326 (англ.)

Предложен новый метод для исследования собствен-
ных квантовых состояний мол. водорода. Метод основан
на двухфотонном возбуждении, при котором молекула пере-
ходит в $E, F^1\Sigma_g^+$ -состояние с последующей ионизацией
третьим фотоном и регистрацией числа ионизованных
молекул. В эксперименте использовалось излучение выс-
ших антистоксовых порядков при ВКР в водороде, к-рое
возникало при накачке второй гармоникой импульсного
лазера на красителе. При перестройке частоты генера-
ции лазера зондировались двухфотонные переходы мо-

Спектр

Х. 1982, 19, N 23

лекулы на частотах 98 350—99 156, 94 995—95 264 и 90 646—91 074 см^{-1} с квантовыми числами $v''=0$, $J''=0-3$; $v''=1$, $J''=0-3$; $v''=2$, $J''=0-4$, к-рым соответствовали след. комбинации высших порядков антистоксового ВКР: $3\text{AC}+4\text{AC}$, $3\text{AC}+3\text{AC}$, $2\text{AC}+3\text{AC}$. Измерено распределение молекул по вращательным уровням основного состояния при давл. 100 мТорр в зависимости от т-ры в диапазоне 295—750 К. Получено хорошее согласие с числами заполнения, соотв-щими Больцмановскому распределению. По мнению авторов, достигнутая в эксперименте чувствительность ($8,4 \cdot 10^6$ фотонов на один импульс лазера) позволяет регистрировать собственные квантовые состояния молекул не хуже чем традиционными методами лазерной флуоресценции, КР или КАРС.

А. Т. Суходольский



№2

1982

12 Д740. Определение точных [квантовых] состояний молекулярного водорода с помощью трехфотонной ионизации. Quantum-state-specific detection of molecular hydrogen by three-photon ionization. Маринего Е. Е., Реттнер С. Т., Заре Р. Н. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 48, № 19, 1323—1326 (англ.)

Реализован чувствительный метод определения заселенности индивидуального колебательно-вращательного уровня (v'' , J'') (I) электронного терма $E, F^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 . Комбинация соответствующих антистоксовых компонент излучения лазера на красителе (ЛК) с удвоением частоты обуславливала двухфотонное возбуждение I, а поглощение третьего кванта приводило к полной ионизации всех возбужденных молекул H_2 . Фотоионизационный ток регистрировался при сканировании длины волны излучения ЛК. Измеренные населенности I при различных T -рах (295—750 K) хорошо согласуются с вычисленными в предположении больцмановского распределения. Сила вращательных линий не обнаруживает практически никакой зависимости от J'' .

А. П. Зуев

определение
точных

(квантовых)
состояний

ФР. 1982, 18,
N 12

H₂

[Dmmuck 13985]

1982

March N.H., Mucci J.F.,

непрям
связи,
кв. мех-
анизм

Phys. Lett., 1982, A88,
N 7, 348-349.

H₂

1982

98: 98021d Molecular hydrogen and hydrogen deuteride. Margolis, Jack S. (JPL, Pasadena, CA USA). NASA Conf. Publ. 1980 (Pub. 1982). NASA-CP-2223, Vibr.-Rotational Spectrosc. Planet. Atmos., N82 26135-N82 26151, 431-8 (Eng). A review with 6 refs.

Kend.-Graus.

Cremm,

0129

⊗
⑦ H₂

C. A. 1983, 98, N12.

1982

H₂

Mu - Tao Lee; Lucchese R.K.
McLoy V.,

поперечн.
сечение
диссо-
циации

Phys. Rev. A 1982, 26
(6), 3240-8.

C.A. 1983, 92, N6, 40877 W

H₂

[Ommuck 13987] 1982

кв. метр

Ohwada K.,

J. Chem. Phys., 1982,
76, N 5, 2565-2568.

H₂

[Ommuck 16283]

1982

Painter G. S., Averill F.W.

Heppner
Ches

Phys. Rev. B: Condens.
Matter, 1982, 26, N4,
781- 790.

H₂

[Omonuck 14838] 1982

помощник :
чекмп,
6

Pollard G.E., Tre-
vor D.F., et al.,
J. Chem. Phys., 1982,
77, N 1, 249-255.

H_2

1982

9 Б37. Квантовый метод Монте-Карло с фиксированными узлами для молекул. Fixed-node quantum Monte Carlo for molecules. Reynolds Peter J., Ceperley David M., Alder Berni J., Lester William A. Jr. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 11, 5593—5603 (англ.)

Дано подробное описание использования метода Монте-Карло с фиксированными узлами для решения электронного уравнения Шредингера, которое рассматривается как уравнение диффузии (с мнимым временем) для функции $f = \Phi\psi$, где Φ — искомая волновая функция, ψ — некая фиксированная пробная функция. Основным ограничением метода является условие, что функция Φ имеет те же узловые поверхности, что и ψ . Функция ψ выбрана в виде детерминанта Слейтера, умноженного на произведение парных корреляционных функций Джастрова. Показано, что получаемая энергия является верхней границей для точной энергии. Описанный метод использован для расчета энергий ос-

расчет E_e ,
м.п.

(+3) $\otimes$

X. 1983, 19, № 9

новных состояний молекул H_2 , LiH , Li_2 и H_2O . Получены энергии, близкие к точным значениям в приближении Борна—Оппенгеймера и более низкие, чем лучшие результаты расчетов методом конфигурац. взаимодействия. Время расчета одной молекулы составляло несколько часов на ЭВМ С С-7600. А. А. Сафонов

H₂

1982

24 Б76. Корреляционная энергия как фактор, стабилизирующий молекулярную структуру. Correlation energy as a stabilizing factor in molecular structure. Robb M. A. «Mol. Struct. and Conform.» Amsterdam e. a., 1982, 156—189 (англ.)

Статья обзорного характера. Даны определения энергии корреляции (ЭК) и отдельных вкладов в нее. Указано, что ЭК может быть условно разделена на динамич. (ДЭК) и нединамич. (НДЭК) составляющие, при этом последняя в зависимости от рассматриваемого конфигурац. пространства включает в себя внутреннюю (ВЭК) и полувнутреннюю (ПВЭК) части. На примере рассмотрения энергий диссоциации, равновесных геометрич. параметров, энергетич. характеристик нек-рых р-ций и структурных параметров их переходных состояний для H_2 , F_2 , HF , H_2O , O_3 и $HC \equiv CH$ показано, что с хим. точки зрения в кач-ве структурной зависимой можно рассматривать лишь НДЭК, при этом особую

структурн.
параметры

5

X. 1983, 19, N 24

роль для правильного описания потенциальных энергетич. поверхностей хим. р-ций имеет ВЭК, а ПВЭК дает основной вклад в структурные изменения ЭК. Обсуждена роль расширения базиса на внешнюю корреляц. энергию. Указано, что эта проблема может быть решена частичным учетом ВЭК и ПВЭК вкладов в многоконфигурац. подходах ССП. Библ. 40.

И. Аброния



Н₂

1982

колебательн.
плотности
распределен-
заряда

оп. 1982, 18, 4
N 11

11 Д107. Колебательные искажения деформационных плотностей в двухатомных молекулах. Расчеты методом Хартри — Фока — Слэтера (ССП). Vibrational smearing of deformation densities in diatomic molecules. An application of Hartree — Fock — Slater SCF calculations. Rozendaal A., Ros P. «Acta crystallogr.», 1982, A38, № 3, 372—377 (англ.)

Рассчитаны колебательно усредненные плотности распределения заряда в двухатомных молекулах H₂, BeH, CH, CO и N₂. Во всех случаях использовались хартри-фоковские волн. ф-ции, полученные методом ССП в трехэкспонентном базисе АО. Колебательные ядерные ф-ции аппроксимировались разложениями по полиномам Эрмита. На основе полученных результатов сделан вывод, что колебательные искажения деформационных плотностей очень малы. Исследование влияния ангармоничности и термич. заселения колебательно-вращательных состояний при 300 К на электронную плотность указывает также на их пренебрежимо малый вклад.

А. И. Дементьев

M₂

1982

Schmieder R. W.

J. Opt. Soc. Amer. 72, 593 (1982)

Optical emission spectrum of
tritium gas (T₂).

H_2

1982

11 Б22. Эффективность смешанного орбитального базиса в расчетах основных состояний молекул H_2 , Li_2 и иона Li_2^+ . Сафонов А. А., Хрустов В. Ф., Степанов Н. Ф. «Вестн. МГУ. Химия», 1982, 22, № 1, 27—30

Для расчета св-в двухатомных молекул предложено использовать смешанный орбитальный базис, состоящий из слейтеровских орбиталей и двухцентровых ф-ций. На примере расчета молекул H_2 , Li_2 и иона Li_2^+ продемонстрирована высокая эффективность этого базиса. Автореферат

(+2) 

X, 1982, 19, 11.

расчет
м.п.

H₂

1982

meopen-
pacrem

96: 149-195c Efficiency of a mixed orbital basis in calculations of ground states of hydrogen and lithium molecules and of lithium molecular ion. Safonov, A. A.; Khrustov, V. F.; Stepanov, N. F. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1982, 23(1), 27-30 (Russ). A mixed basis set (STO and 2-center orbitals) is proposed for the calcn. of ground state energy, E , of H_2 , Li_2 , and Li_2^+ by the spin-restricted SCF method. Algorithms for 2-center function generation and mol. integral calcn. are described. The calcd. E values are compared with Hartree-Fock energy limits and other calcns. The efficiency and flexibility of the mixed orbital basis is demonstrated.

(+2) A

C. A. 1982, 96, N 18.

H₂

1982

Szalewicz K., Huziorzski B.
et al.

pacrim
E;

Chem. Phys. Lett., 1982,
91, N3, 169-172.

(cur. He; III)

H_2

1982

11 Г422. Спектр молекулы H_2 в дальней УФ-области. The far UV emission spectrum of H_2 . Terry J. L. «J. Vac. Sci. and Technol.», 1983, A1, № 2, Pt 2: Proc. 29 Nat. Symp. Amer. Vac. Soc., Baltimore, Md, 16—19 Nov., 1982, 831—836 (англ.)

Разработана детальная квантовая модель для описания возбужденных состояний $B^1\Sigma^+_u$ и $a^3\Sigma^+_g$ молекул H_2 , создаваемых тепловыми электронами с т-рой $1\text{ эВ} \leq T_e \leq 10\text{ эВ}$ и плотностью $< 10^{15}\text{ см}^{-3}$. Изучение от каждого из трех моделируемых процессов (полосы Лаймана, континуум Лаймана и континуум H_2) комбинируются с целью создания единого синтетич. спектра в дальней УФ-области. Относит. форма синтетич. спектра является ф-цией т-ры T молекул H_2 в основном состоянии, т-ры T_e возбуждающих электронов и сечения синглет-триплетного возбуждения по отношению к $B^1\Sigma^+_u$ возбуждению. Сравнение теоретич. синтетич. спектров с

спектр

ф. 1983, 18, N 11.

эксперим. спектрами от 3 разных лабораторных источников продемонстрировало их хорошее совпадение. Доказана высокая точность метода. Напр., синтетич. спектр с $T=5000$ К, $T_e=1$ эВ находится в хорошем согласии с эксперим. спектром, а расчетные спектры $T=400$ К, $T_e=1$ эВ и $T=6000$ К, $T_e=3$ эВ значительно отличаются от последнего. Показано, что сечение электронного возбуждения от состояния $X^1\Sigma_g^+$ до состояния $a^3\Sigma_g^+$ может быть представлено в виде $1 \cdot 10^{18} (E_{th}/E)^2$ см². Ю. Ф. Т.

H₂

1982

2 Д55. Универсальная функция потенциальной энергии для ионных и неионных связей и вопрос химической связи. On a unified potential energy function for ionic and non-ionic bonds and the question of chemical bonding. Van Hooydonk G. «Z. Naturforsch.», 1982, A37, № 7, 710—715 (англ.)

Для 39 двухатомных ионных и неионных молекул выявлено аномальное поведение спектральных параметров α_e и $\omega_e x_e$ относительно характера связи. Показано, что с использованием универсального параметра Сатерланда, определенного как $\Delta = (\frac{1}{2}) k_e r_e^2$, аномальное поведение исчезает. Получено спектроскопич. доказательство того, что только один тип связи, а именно ионная связь, в первом приближении отвечает за спектральное поведение неионных и ионных связей двухатомных молекул, в том числе H₂.

Резюме

М.П.

ор. 1983, 18, № 2

H₂

1982

97: 205051s On a universal potential energy function and the importance of ionic structures for the ground state of molecules. Van Hooydonk, G. (Cent. Bibliotheek, Rijksuniv. Gent, B-9000 Ghent, Belg.). *Z. Naturforsch.*, A 1982, 37A(9), 971-81 (Eng). The Kratzer-Fues-Varshni-V-potential, applied to ionic dissocn. energies, yields rather accurate potential energy curves in the bonding region for H₂, HF, LiH, Li₂ and LiF. Vibrational levels, calcd. by this ionic approxn. to the ground state of widely differing mols., nearly coincide with RKR-data. At the repulsive side of the curve and up to $2r_e$, the agreement with RKR-curves is even better than for Morse's curve, also for the 'covalent' mols. H₂ and Li₂. Calcd. spectroscopic const. α_e and $\omega_e x_e$ are far better than those calcd. with Morse's function. Even the existence of a max. in the potential curve at larger r -values seems not in conflict with an ionic approxn. From the universal character of the function used, it is concluded that a reasonable approxn. for the ground state of all mols. considered is one in terms of ionic structures, even for H₂ and esp. for Li₂. According to the present results, the term 'covalent bonding' seems to be definitely superfluous, as the usually made distinction between ionic and covalent bonding is more apparent than real.

romeruz.
sp - uu

74

C. A. 1982, 97, ~24

M_2

1982

Vicarelli P. A., et al.

расчёт
и.и.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 87, N4, 369-372.

●
(ссылка на Двухатомн.
молекулы, III)

H₂

1982

Willinger H., Futrell
J. H., et al.

AH⁺;

J. Chem. Phys., 1982,
76, N 4, 3529-3534.

( see. A2; III)

H₂

1982

6 Д114. Электронные переходные моменты между возбужденными синглетными состояниями молекулы H₂. Electronic transition moments between excited singlet states of the H₂ molecule. Wolniewicz L., Dresler K. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 1, 195—199 (англ.)

Вычислены дипольные моменты 12 переходов, связывающих каждое из электронных состояний $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $B''\bar{B}^1\Sigma_u^+$ и $C^1\Pi_u$ с тремя состояниями $1^1\Sigma_g^+$ молекулы водорода при 17 значениях межуатомного расстояния R от 1,25 до 17 а.е. Построены кривые зависимости переходных электронных моментов от R . Матричные элементы дипольного момента вычислены с вариационными волн. функциями, причем для 3 интервалов значений R использовались различное число членов разложения каждой из 7 использованных волн. функций. Для всех R выполнено согласование относит. фаз волн. функций, влияющих на знаки вычисленных переходных моментов. При больших R наибольшее влияние на переходы $1^1\Sigma_g^+ \rightarrow 1^1\Sigma_u^+$ оказывает двухэлектронный резонанс зарядов в ионной конфигурации $H^+ + H^-$.

М. А. Ковнер

расчет ξ_i ,
и.п.

ор. 1983, 18,
и 6

H₂

1982

9 Б35. Моменты электронных переходов между возбужденными синглетными состояниями молекулы H₂. Electronic transition moments between excited singlet states of the H₂ molecule. Wolniewicz L., Dressler K. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 1, 195—199 (англ.)

Рассчитаны 12 моментов переходов между состояниями $Ef^1\Sigma_g^+$, $GK^1\Sigma_g^+$, $HH^1\Sigma_g^+$ и состояниями $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $B''B^1\Sigma_u^+$ и $C^1\Pi_u$ молекулы H₂. Использованы полученные ранее Колосом, Волниевичем и Дресслером волновые ф-ции, содержащие разложения длиной от 51 до 93 членов. Приведены табл. и графики зависимостей моментов переходов от межъядерного расстояния R в интервале $1,25 \leq R \leq 15$ ат. ед. Особое внимание уделено выбору фаз волновых функций, определяющих знаки моментов переходов, при разных R . Критерием выбора знака волновой функции являлась гладкая зави-

Вероятность
переходов

X. 1983, 19, № 9

симось от R ее значения при переходах от нек-рых фиксированных координат электронов к другим (оба электрона на одном ядре; два электрона на разных ядрах; один электрон на ядре, другой посередине между ядрами). Показано, что при больших R моменты переходов ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1\Sigma_u^+$ определяются двух,лектронным зарядовым резонансом в ионной конфигурации $H^+ + H^-$.

А. А. Сафонов



H₂

1982

96: 190057b Diatomic hydrogen fluorescence spectrum from 1200 to 1700 Å by electron impact: laboratory study and application to Jovian aurora. Yung, Yuk L.; Gladstone, G. Randall; Chang, Kar Man; Ajello, Joseph M.; Srivastava, S. K. (Div. Geol. Planet. Sci., California Inst. Technol., Pasadena, CA USA). *Astrophys. J.* 1982, 254(2, Pt. 2), L65-L69 (Eng). A combined exptl. study of the fluorescence spectrum of H₂ at wavelengths of 1200-1700 Å by electron impact and its application to modeling the Jovian aurora were carried out. The lab. data suggest that at 100 eV the relative cross sections for direct excitation of Ly α , Lyman bands ($B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$), and Werner bands ($C^1\pi_u - X^1\Sigma_g^+$) are 1, 2.3 ± 0.6 , and 2.6 ± 0.5 , resp., in conflict with Stone and Zipf's (1972) results for the Werner bands. Cascade from $E, F^1\Sigma_g^+$ states contributes an addnl. 31% to the $B^1\Sigma_u^+$ site population. The most likely fate for the metastable H(2^2S) atoms produced in th Jovian aurora is collisional quenching to H(2^2P), and this could add as much as 60% to the predicted Ly α emission. On the basis of detailed atm. and radiative transfer modeling, the recent International UV Explorer and Voyager observations are consistent with pptn. of electrons with energy in the range of 1-30 keV or other

cremp

pnyprecs.

P.A. 1982
96, 122

energetic particles that penetrate to no. densities of $4 \times 10^{10} - 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ or column densities of $5 \times 10^{17} - 2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$ in the atm. The globally averaged energy flux and prodn. of H atoms are $0.5-2 \text{ ergs cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ and $1-4 \times 10^{10} \text{ atoms cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, resp.

H₂

1982

9 Д662. Спектр флуоресценции молекул H₂ в области 1200—1700 Å, возбуждаемый электронным ударом. Лабораторное исследование и приложение к анализу свечения атмосферы Юпитера. H₂ fluorescence spectrum from 1200 to 1700 Å by electron impact. Laboratory study and application to Jovian aurora. Yung Yuk L., Gladstone G., Randall, Chang Kar Man, Ajello Joseph M., Srivastava S.K. «Astrophys. J.», 1982, 254, № 2, Part 2, 65—69 (англ.)

В области 120—170 нм получен спектр флуоресценции молекул H₂, возбуждавшихся потоком электронов с энергией 100—400 эВ. Построен модельный спектр флуоресценции H₂, учитывающий наличие прямого возбуждения линии L_α, полос Лаймана B¹Σ_u⁺ → X¹Σ_g⁺ и Вернера C¹Π_u → X¹Σ_g⁺, а также каскадных переходов из состояний E, F¹Σ_g⁺. Сечения указанных переходов взяты из литературы. Показано, что наиболее вероятной судьбой метастабильных атомов H(2²S) является тушение в столкновениях с образо-

спектр

ф. 1982, 18; N 9.

ванием $H(2^2P)$, причем этот процесс отвечает за $\sim 60\%$ излучения L_α в свечении атмосферы Юпитера. Исследование различных атмосферных процессов позволило интерпретировать данные, полученные космич. аппаратами «Эксплорер» и «Вояджер» и оценить плотность электронов с энергией 1—30 кэВ в атмосфере Юпитера: $4 \cdot 10^{10} - 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Рассчитаны усредненные по атмосферному столбу энергия электронов и скорость образования атомов водорода: $0,5 \div 2 \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ и $(1 \div 4) \cdot 10^{10} \text{ атомов} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Библ. 37.

М. Т.

H₂

1982

/ 97: 79211d Spontaneous E1 transition in the low Λ doublet of the $C^1\Pi_u$ state of molecular hydrogen. Zhizhimov, O. L. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1982, 52(5), 918-20 (Russ). The title $C^1\Pi_u^+ \rightarrow C^1\Pi_u^-$ transition was studied in relation to para-ortho transition of H₂. The probability for this state transition ($\approx 4.9 \times 10^{-16} \text{ s}^{-1}$) is by 4 orders of magnitude less than that for the ground-state $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ transition ($\sim 10^{-12} \text{ s}^{-1}$).

check mp,

$C^1\Pi_u^+ \rightarrow C^1\Pi_u^-$

c.A. 1982, 97, N10

H₂

1982

1 Д118. Спонтанный E1-переход в низшем Λ-дублете состояния C¹Π_u молекулярного водорода. Жижимов О. Л. «Оптика и спектроскопия», 1982, 52, № 5, 918—920

Исследован спонтанный E1-переход в низшем Λ-дублете состояния C¹Π_u молекулы водорода, относящийся к пара-орто-переходам. Найдено, что вероятность спонтанного перехода $W(\Pi^+ \rightarrow \Pi^-) \approx 4,9 \cdot 10^{-16} \text{ с}^{-1}$. Отмечено, что ввиду близости возмущающих уровней вероятности пара-орто-перехода в состоянии C¹Π_u на четыре порядка больше вероятности пара-орто-перехода в основном состоянии X¹Σ_g⁺. А. И. Дементьев

спектр

р. 1983, 18, 41