

1987

H₂

1987

108: 27055g On the existence of arbitrary four-body (or quasi-four-body) molecules. Abdel-Raouf, M. A. (Friedrich-Alexander-Univ. Erlangen-Nuernberg, D-8520 Erlangen, Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1987, 6(4), 345-9 (Eng). A theorem was proved, which shows that the existence of H₂ and Ps₂ (Ps = positronium) mols. is a sufficient condition for the existence of arbitrary 4-body (or quasi-4-body) mols. The bound-states of H₂ and Ps₂ are rigorous lower and upper bounds, resp., for the exact energies of the bound-state of all other previously mentioned mols. The consequences of the preceding theorem and corollary in astrophysics, solid-state physics, and quantum chem. are briefly discussed.

XI (7) P₃₂



C.A. 1988, 108, NY

H_2

1987

4 Л258. Влияние вращательного взаимодействия на вероятность излучения полос систем Лаймана и Вернера в ВУФ-спектре H_2 . Effect of rotational coupling on emission probabilities of Lyman and Werner band systems of the vacuum ultraviolet spectrum of H_2 . Abgrall Hervé, Launay Françoise, Roueff Evelyne, Roncin Jean-Yves. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 4, 2036—2044 (англ.)

Различными методами рассчитаны отношения вероятностей излучения вращательных линий в полосах систем Лаймана и Вернера, $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $C^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 . Результаты расчетов сопоставлены с эксперим. данными, полученными при высоком разрешении. Анализ результатов показал существенное влияние вращательных состояний B и C на отношение интенсивностей вращательных линий P - и Q -ветвей. Обсуждены вопросы справедливости нумерации ряда уровней состояний B и C . Библи. 37. В. С. Иванов

М.П.

ср. 1988, 18, № 4

H_2

1987

1 17 Б1159. Пороговые исследования H_2 в вакуумной ультрафиолетовой области методом электронного удара. Threshold studies of H_2 in the vacuum ultraviolet by electron impact. Ajello J. M., Shemansky D. E., James G. K. «15th Int. Conf. Phys. Electron. and Atom. Collis., Brighton, 1987». Belfast, 1987, 305 (англ.)

Измерены ф-ции возбуждения электронным ударом (с энергией до 100 эВ) полос Лаймана и перехода $a^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$ H_2 в пучке. Выделены три диапазона энергии для ф-ции возбуждения полос Лаймана, в к-рых преобладают след. процессы: 11—14 эВ — резонансное возбуждение (резонансы Фешбаха) через образование иона H_2^- с последующим автоионизац. отщеплением электрона и образованием $H_2(B^1\Sigma_u^+)$; 14—18 эВ — каскадные процессы из состояния $E, F^1\Sigma_g^+$; 18—100 эВ — прямое возбуждение. Колебат. структура перехода $B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ H_2 в первом случае заметно отличается от наблюдаемой при прямом и каскадном возбуждении. В. М. Ковба

М.П.

X. 1988, 19, N 17.

H₂

1987

1 Б1006. Адиабатические энергии и радиальное связывание состояний симметрии $^3\Sigma_u^+$ молекулы H₂.
Adiabatic energies and radial couplings of the $^3\Sigma_u^+$ states of H₂. Borondo F., Martin F., Yáñez M. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 9, 4982—4989 (англ.)

В адиабатическом приближении рассчитаны кривые потенциальной энергии для первых шести электронных состояний симметрии $^3\Sigma_u^+$ молекулы H₂ в диапазоне межъядерных расстояний $1 \leq R \leq 30$ ат. ед. Обнаружена новая серия квазипересечений потенциальных кривых в области $R \leq 5$ а. е. Рассчитана и обсуждена зависимость от R матричных элементов оператора радиального связывания $\partial/\partial R$ для различных пар электронных состояний, предложена простая аналитич. модель для описания этой зависимости.

В. Б. Павлов-Веревкин

М.П.

Х. 1988, 19, №1.

Н₂

1987

1 Д113. Адиабатические энергии и радиальные взаимодействия состояний $^3\Sigma^+$ молекулы H_2 . Adiabatic energies and radial couplings of the $^3\Sigma_u^+$ states of H_2 . В о г о н д о F., Martin F., Yáñez M. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 9, 4982—4989 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия в адиабатич. приближении рассчитаны потенц. кривые шести электронных состояний симметрии $^3\Sigma^+$ молекулы водорода при межъядерных расстояниях от 1 до 30 ат. ед. Для первых четырех состояний рассчитаны также радиальные матричные элементы взаимодействия, необходимые при рассмотрении реакций возбуждения: $H(1s) + H(1s) \rightarrow H(2s) + H(1s) \rightarrow H(2p) \rightarrow H(1s)$. Предложена простая модель для описания взаимодействия состояний $2^2\Sigma^+$ и $3^2\Sigma^+$. Построенные корреляционные диаграммы объединенный атом — разделенные атомы позволили также проследить возможные случаи квазипересечения адиабатических потенц. кривых. H_2 .

А. И. Дементьев

М.П.

ср. 1988, 18, N1

№

1987

4 Л133. Прецизионная спектроскопия водорода и дейтерия. Precision spectroscopy of hydrogen and deuterium. Boshier M. G., Baird P. E. G., Foot C. J., Hinds E. A., Plimmer M. D., Stacey D. N., Swan J. B., Tate D. A., Warrington D. M., Woodgate G. K. «Nature», 1987, 330, № 6147, 463—465 (англ.)

Измерены частоты двухфотонного перехода $1s-2s$ в водороде и дейтерии. Использовалось прохождение через резонанс удвоенного по частоте излучения непрерывного лазера длиной волны 486 нм с индикацией резонанса путем детектирования Лайман-альфа излучения. С использованием известного значения постоянной Ридберга из измеренной частоты найден лэмбовский сдвиг уровня $1s$ с большей в 35 раз точностью, чем в прежних измерениях. Получено хорошее согласие с теорией при несколько большей погрешности

М.П.



ф. 1988, 18, №

эксперим. значения по сравнению с теоретическим.
И обратно принимая теоретич. значение лэмбовского
сдвига найдена постоянная Ридберга с погрешностью
в 3 единицы в 5 знаке после запятой. Найдена также
величина изотопич. сдвига $H-D$ $1s-2s$ 670994,4(9)
при теоретич. значении 670994,48(10) МГц. Библ. 20.
А. Н. Рябцев

H₂

(M. 26071)

1987

16 Б1194. Лазерная спектроскопия высокого разрешения H₂ в быстром пучке. High-resolution laser spectroscopy of H₂ in a fast beam. Bjerre N., Helm H. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 134, № 4, 361—365 (англ.)

Измерена СТ и СТС нек-рых линий в полосе 2—2 ридберговского перехода $1s\ 3dg^3\Sigma_g^+ \leftarrow 1s2pc^3\Pi_u$ -H₂. Пучок ионов H₂⁺ из источника ускорялся, перезаряжался на парах Cs (H₂⁺(*v*⁺) + Cs → H₂(*c*³Π_u, *v*^{''}) + Cs⁺ + Δ*E*) и далее получавшиеся молекулы H₂(*c*²Π_u) возбуждались координатно вводимым излучением перестраиваемого лазера на уровни триплетных ридберговских состояний 1s3s и 1s3d, лежавшие ниже диссоциационного предела H(1s) + H(2l). В результате излучат. рас-

М.П.

Х. 1987, 19, № 16

пада H_2 в отталкиват. состоянии $g^3\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$ и диссоциации получались фрагменты $\text{H}(1s)$ с большой кинетич. энергией, к-рые регистрировались детектором расположенным вне оси пучка. На основании известных вращат. параметров и параметров СТС H_2 в состояниях s и g проведено моделирование спектра. Результаты сопоставляются со сверхтонкими расщеплениями в ионе H_2^+ . В. М. Ковба

H₂

1987

107: 84219s Adiabatic energies and radial couplings of the $^3\Sigma_u^+$ states of molecular hydrogen. Borondo, F.; Martin, F.; Yanez, M. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Cantoblanco, Spain 28049). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(9), 4982-9 (Eng). Potential-energy curves were calcd. for the $^3\Sigma_u^+$ states of the H₂ mol. for internuclear distances of $R = 1-30$ at. units (a.u.). The features of the correlation diagram are discussed; a new series of avoided crossings for $R < 5$ a.u. are predicted. Radial couplings were calcd., which are of interest in study of the excitation process $H(1s) + H(1^o) \rightarrow H(2s,2p) + H(1s)$. A simple anal. model is given, which accounts for the $2^3\Sigma_u^+ - 3^3R_u$ interaction.

неоп. павет
нефетер крив

C.A. 1987, 107, ~10

H₂

1987

Böse H., Förster H.,
et al.

u.n.
Chem. Phys. Lett.,
1987, 138, NS, 401-404.

( see. O₂; III)

H₂

1987

7 Л172. Спектроскопия высокого разрешения штарковской структуры линии водорода Лайман- α с использованием одномодовой импульсной лазерной системы в вакуумной УФ-области. High resolution spectroscopy of the hydrogen Lyman- α line Stark structure using a VUV single mode pulsed laser system. Cabaret L., Delsart C., Blondel C. «Opt. Commun.», 1987, 61, № 2, 116—119 (англ.)

С использованием новой лазерной системы для ВУФ-области спектра выполнено исследование штарковской структуры линии L_{α} атома водорода. Основу системы составляет непрерывный, узкополосный ($\Delta\nu \approx 40$ мГц) кольцевой лазер на красителе с накачкой аргоновым лазером и дополнительной накачкой мощным импульсным ИАГ—Nd-лазером (0,5 Дж в импульсе). После усиления в трехкаскадном усилителе излучение удваивается на кристалле КДП и утрируется в газовой кювете (Кг или смесь Ag+Kг). Комбинация кольцевого

М.П.

ф. 1987, 18, № 7

лазера с мощной импульсной накачкой позволила получить хорошие характеристики перестраиваемого излучения ($\Delta\nu \approx 240$ мГц) и высокую пиковую мощность в ВУФ-области (≈ 10 Вт). Приведена зависимость штарковского сдвига от напряжения внешнего поля (0—5000 В), которая хорошо совпадает с расчетной. М. А.



H_2

1987

5 Б1191. Фотоионизация молекулярных ридберговских состояний. H_2 , состояние $C^1\Pi_n$ и дважды возбужденные состояния. Photoionization of molecular Rydberg states: H_2 , $C^1\Pi_n$ and its doubly excited states. Churka William A. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 3, 1488—1498 (англ.)

Объяснены аномалии в фотоэлектронных спектрах (ФЭС) при однофотонной ионизации невозмущенных одноконфигурац. ридберговских состояний молекул. Часть из них вызвана куперовскими минимумами и резонансами формы в сечениях фотоионизации. Более сильные эффекты обусловлены возбуждением ионного остова с образованием дважды возбужденных состояний. Обсуждены χ -ки распада таких состояний и их влияние на ФЭС. В кач-ве примера аномального ФЭС рассмотрена резонансная многофотонная ионизация H_2 через состояние $C^1\Pi_u$, сопровождающаяся возбуждением и автоионизацией состояния $1\Pi_g(2p\sigma)(2p\pi)$. Предсказано образование при этом возбужденных атомов водорода. Рассмотрена проблема разделения ионов в отдельных состояниях.

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1988, 19, NS

H_2

1987

20 Б1154. Расчет частот спектральных переходов изолированных в матрицах примесей H_2 , D_2 и HD в твердых Kr и Xe под давлением. Calculation of the spectral transition frequencies of matrix-isolated H_2 , D_2 , and HD impurities in solid Kr and Xe under pressure. Chandrasekharan V., Chergui M., Silvi B., Etters R. D. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 6, 1623—1628 (англ.)

В рамках предложенной ранее теоретич. модели (Phys. Rev. B: Condens. Matter, 1986, 33, 2749) рассчитаны частоты колебат., вращат. и колебательно-вращат. переходов молекул H_2 , D_2 и HD, изолированных в матрицах из Kr и Xe при низких т-рах и давл. $0 < P < 570$ кбар. Проанализирована зависимость частот локальных колебаний молекул примесей от давл. Показано, что чисто колебат. и колебательно-вращат. переходы в тв. фазе существенно (для $Q_1(0)$ на $32-38 \text{ см}^{-1}$ в Kr и $41-46 \text{ см}^{-1}$ в Xe) сдвинуты в длинноволновую область при $P=0$ отно-

М.П.

(17) (+2)

X. 1987, 19, N20

снт. газ. фазы. Для чисто вращат. переходов сдвиги
гораздо меньше ($2-3 \text{ см}^{-1}$). Отмечено в целом удо-
влетворит. согласие с имеющимися эксп. данными по
ИК- и КР-спектрам. Установлено, что при увеличении
давл. низкочастотные сдвиги частот переходов умень-
шаются и при давл. 70—80 кбар переходят в высоко-
частотные, к-рые достигают $\sim 400 \text{ см}^{-1}$ при ~ 500 кбар.
С. Б. Осин

С.

1987

H₂

⊕ 20 B1154. Расчет частот спектральных переходов изолированных в матрицах примесей H₂, D₂ и HD в твердых Kr и Xe под давлением. Calculation of the spectral transition frequencies of matrix-isolated H₂, D₂, and HD impurities in solid Kr and Xe under pressure. Chandrasekharan V., Chergui M., Silvi B., Etters R. D. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 6, 1623—1628 (англ.)

В рамках предложенной ранее теоретич. модели (Phys. Rev. B: Condens. Matter, 1986, 33, 2749) рассчитаны частоты колебат., вращат. и колебательно-вращат. переходов молекул H₂, D₂ и HD, изолированных в матрицах из Kr и Xe при низких т-рах и давл. $0 < P < 570$ кбар. Проанализирована зависимость частот локальных колебаний молекул примесей от давл. Показано, что чисто колебат. и колебательно-

М.П.

⊕ 2

X

X. 1987, 19, N 20

вращат. переходы в тв. фазе существенно (для $Q_1(0)$ на $32-38 \text{ см}^{-1}$ в Кг и $41-46 \text{ см}^{-1}$ в Хе) сдвинуты в длинноволновую область при $P=0$ относительно газ. фазы. Для чисто вращат. переходов сдвиги гораздо меньше ($2-3 \text{ см}^{-1}$). Отмечено в целом удовлетворит. согласие с имеющимися эксп. данными по ИК- и КР-спектрам. Установлено, что при увеличении давл. низкочастотные сдвиги частот переходов уменьшаются и при давл. $70-80 \text{ кбар}$ переходят в высокочастотные, к-рые достигают $\sim 400 \text{ см}^{-1}$ при $\sim 500 \text{ кбар}$.
С. Б. Осин

H₂

1987

Cosby P.C., Helm H.,
15th Int. Conf. Phys.
Electron. and Atom.
Collis., Brighton, 1987.
Belfast, 1987, 62.

(see. H₂⁺; III)

фотограф-
ия НН.
спектро-
скопич.

H_2

1987

У 24 Б1024. Теоретические исследования импульсных плотностей для молекулярного водорода. Theoretical investigations of the momentum densities for molecular hydrogen. De Franceschi M. «Chem. Phys.», 1987, 115, № 3, 349—358 (англ.)

Представлены результаты численного решения уравнений Хартри—Фока и уравнений метода МК ССП в импульсном представлении для основного состояния молекулы H_2 . Проанализированы графики волновых функций, электронной плотности и разностной плотности (молек. за вычетом атомных вкладов). Теорет. результаты сопоставлены с эксперим. данными $(e, 2e)$ -спектроскопии. Показано, что для H_2 корреляц. эффекты мало влияют на распределение плотности. А. В. Немухин

(М.П.)

Х. 1987, 19, № 24

H_2

1987

1 Л398 ДЕП. Изучение изотопного эффекта в вероятностях $d^3\Pi_u^-$, v' , $N \rightarrow a^3\Sigma_g^+$, v'' , N спонтанного излучения молекул H_2 и D_2 . Драчев А. И., Лавров Б. П., Поздеев Л. Л.; Ред. ж. «Вестн. ЛГУ. Физ., химия» Л., 1987. (Рукопись деп. в ВИНТИ 24.09.87, № 6847—В87)

Для проверки адекватности и развития теоретич. моделей, используемых при полуэмпирич. определении вероятностей электронно-колебательно-вращательных радиационных переходов, предложено проводить сравнительный оптимизационный анализ эксперим. данных, полученных по спектрам двух и более изотопов. Впервые измерены относит. вероятности $d^3\Pi_u^-$, v' , $N \rightarrow a^3\Sigma_g^+$, v'' , N спонтанного излучения молекулы D_2 и получены новые данные о тех же переходах в молекуле H_2 . Сравнительный оптимизационный анализ этих данных показал, что в существенной области межъядер-

H_2

ср. 1988, 18, N1

D_2

ных расстояний электронные моменты перехода для H_2 и D_2 одинаковы. Тем самым показано, что изотопный эффект в вероятностях указанных переходов молекулы водорода в пределах точности эксперимента адекватно описывается в рамках адиабатич. приближения. Получены наиболее надежные данные о матрицах вероятностей $d^3\Pi_u^-, v', N \rightarrow a^3\Sigma_g^+, v'', N$ спонтанного излучения и радиационных временах жизни уровней молекул H_2 , HD , D_2 . Автореферат



H₂

1987

(2)

106: 165147y Multiphoton excitation of high singlet np Rydberg states of molecular hydrogen: Spectroscopy and dynamics. Glab, Wallace L.; Hessler, Jan P. (Chem. Div.; Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1987, 35(5), 2102-10 (Eng). Two-step, 2-color excitation was used to populate high np singlet Rydberg states of H under elec.-field-free conditions. Sub-Doppler resolu. was obtained by exciting the $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow E^1\Sigma_g^+$ 2-photon transition with copropagating photons, then further exciting the mols. to high Rydberg states with a narrow-band laser. Transitions to states were obsd. to $n \leq 90$ for the Rydberg series which converge to the 2 lowest ionization limits. From an anal. of the energies of the obsd. transitions new results were obtained for the 1st 2 ionization potentials of H₂, with high accuracy. The new values are $124,417.61 \pm 0.07 \text{ cm}^{-1}$ for para-H and $124,475.94 \pm 0.07 \text{ cm}^{-1}$ for ortho-H. Some of the Rydberg states predissociate strongly, apparently due to the influence of perturbing states of low principle quantum no.

C. A. 1987, 106, N20.

H₂

1987

9 Л452. Исследование с высоким разрешением диссоциативного фотопоглощения и флуоресценции в H₂. High resolution study of photoabsorption photodissociation and fluorescence in H₂. Glass-Maujean M., Breton J., Guyon P. M. «Z. Phys.», 1987, D5, № 3, 189—201 (англ.)

С разрешением 0,07—0,05 Å получены спектры поглощения и возбуждения флуоресценции (молекулярной и осколочной) для H₂ в области 765—850 Å. Выполнен обзор ранее полученных результатов по исследованию сечений и квантовых выходов диссоциации и вероятностей преддиссоциации. Обсуждены новые результаты по преддиссоциации уровней $\text{пр}\sigma\Sigma_u^+$. Проанализированы имеющиеся данные по радиационным переходам преддиссоциации и автоионизации H₂. Библ. 35. В. С. Иванов

М.П.

ср. 1987, 18, 119

H_2

1987

4 Д120. Является ли основное состояние $^2\Sigma_g^- H_2^-$ связанным? Метод валентных связей. A bound $^2\Sigma_g^-$ ground state for H_2^- ? A valence-bond study. Harcourt Richard D. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1987, 20, № 19, L617—L627 (англ.)

С помощью волн. ф-ции вида $\psi(H_2^-) = \psi(H_2, e) + \mu\{\psi(H-H) + \psi(HH^-)\} + \nu\{\psi(H^2-H) + \psi(HH^2-)\}$ показано, что основное состояние с симметрией $^2\Sigma_g^-$ является связанным по отношению к основному состоянию H_2 и свободному электрону. Ф-ция (H_2, e) описывает электрон на $1s$ диффузной орбите, центрированной между протонами. При использовании для описания H_2 волн. ф-ции Вейнбаума с $1s$ орбиталями минимальная энергия достигается при расстоянии между ядрами 1,43 ат. ед. Результирующее сродство к электрону для $H_2(D_e(H_2^-) - D_e(H_2))$ равно 2,0 кДж/моль. Аналогичные расчеты с центрированными на ядрах $2p\sigma$ орбиталями приводят к величине сродства к электрону 6,5 кДж/моль.

Резюме

Ar ;

ср. 1988, 18, № 4

H₂

1987

meopem-
pacem

108: 11426t A bound $2\Sigma_g^+$ ground state for hydrogen ion (H_2^-)? A valence-bond study. Harcourt, Richard D. (Dep. Phys. Chem., Univ. Melbourne, Parkville, 3052 Australia). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1987, 20(19), L617-L621 (Eng). By constructing wavefunctions of the form $\Psi(H_2^-) = \Psi(H_2, e) + \mu[\Psi(H-H) + \Psi(HH^-)] + \nu[\Psi(H^2-H) + \Psi(HH^2-)]$ for H_2^- , the ground state is calcd. of H_2 and a free electron. The $\Psi(H_2, e)$ accommodates an electron in a diffuse 1s orbital, which is centered midway between the protons. When the Weinbaum wavefunction with (STO-5G) 1s orbitals is used to describe H_2 , the min. energy of each of these species is calcd. to occur at an internuclear sepn. of 1.43 au. The resulting electron affinity ($D_e(H_2^-) - D_e(H_2)$) for H_2 is 2.0 kJ mol⁻¹. A similar calcn. with nuclear-centered $2p\sigma$ orbitals also included gives an electron affinity of 6.5 kJ mol⁻¹.

C.A. 1988, 108, N2

1987

1 Д114. Проблема H_2 , решенная методом конечных разностей. H_2 solved by the finite element method. Heinemann D., Kolb D., Fricke B. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 137, № 2, 180—182 (англ.)

Представлены предварительные результаты расчета хартри-фоковской энергии основного электронного состояния H_2 методом конечных разностей. Расчеты велись в эллиптических гиперболич. координатах с эквидистантным делением пространства на конечное число элементов. При использовании двумерной сетки 26×11 (20 элементов) хартри-фоковская энергия H_2 была получена с точностью до 10^{-8} ат. ед. При переходе к сетке 41×16 (48 элементов) энергия была рассчитана с точностью до 10^{-10} ат. ед., что на два порядка превосходит точность известных из литературы хартри-фоковских расчетов энергии молекулы водорода.

А. И. Дементьев

ср. 1988, 18, 11

H₂

1987

10 Д106. Замечание к статье: «Точные аналитические модельные потенциалы для D₂ и H₂, основанные на модели «возмущенного осциллятора Морзе» — Ответ авторов. Comment on Accurate analytic model potentials for D₂ and H₂ based on the perturbed-Morse-oscillator model by Huffaker J. N., Cohen D. I., Wright James S.; Author's reply. Huffaker J. N. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 8, 4714—4717 (англ.)

См. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, 346.

(4) ☒

сф. 1987, 18, N10

M₂

1987

Gene F., Brandt B.A.

u. n. Theor. chim. acta,
1987, 72, N 5-6, 411-432.

(cur. ● HF; III)

H₂

[Om. 28 285]

1987

Genč F., Brandt B.A.,

потенц.
ф-ция осн.
составляющих

γ-Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 1,
83, ● N 9, 2857-66.

H_2

DM. 28243

1987

† 5 Л222. Фурье-спектроскопия комбинационного рассеяния H_2 и D_2 в области линий с высокими J в пламени. FTS-Raman flame spectroscopy of high- J lines in H_2 and D_2 . Jennings D. E., Weber A., Brault J. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 19—28 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии КР изучены спектры пламени, образованного при горении H_2 или D_2 в воздухе. Определены положения линий вращательного спектра H_2 и D_2 , обусловленного переходами в области высоких вращательных уровней основного колебательного состояния молекул. В сочетании с данными о положении линий в спектрах КР и ИК-спектрах, полученных при комнатной т-ре, определены более точные (по сравнению с литературными) значения молекулярных постоянных H_2 , D_2 для основного колебательного состояния. Положения линий H_2 , рассчитанные с использованием найденных молекулярных постоянных, являются более точными, чем наблюдаемые в спектре молекулярного облака в Орионе. В. К.

спектр

(H) X

ф. 1988, 18, № 5

D_2

H₂

011-28243

1987

9 Б1220. Фурье-спектроскопия комбинационного
рассеяния линий H₂ и D₂ с высокими значениями J в
пламенах. FTS-Raman flame spectroscopy of high- J lines
in H₂ and D₂. Jennings D. E., Weber A., Bra-
uhl J. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 19—28
(англ.)

Изучены КР-спектры диффузионных пламен «H₂—
воздух» (I) и «D₂—воздух» (II) ($T \sim 670$ K). Спектры
возбуждали линией 514,5 нм Ar-лазера мощностью
 ~ 2 Вт и регистрировали на фурье-спектрометре с
разрешением $\sim 0,24$ см⁻¹. В спектре I наблюдали линии
чисто вращат. переходов $v=0-0$ до $S(7)$, а также
Q-ветвь $v=1-0$. В спектре II проявлялись линии чис-
то вращат. спектра $v=0-0$ до $S(7)-S(12)$. Произве-
дено отнесение линий в спектрах к различным типам
переходов. Уточнены с точностью до 5-го знака значе-
ния вращат. постоянных H₂ и D₂ в основном колебат.
состоянии. Произведено сравнение полученных данных
с результатами астрономич. наблюдений. А. В. Бобров

М.П.

(4) X

X. 1988, 19, 29

H_2

1987

→ 9 Д276. Наблюдение триплетных ридберговских состояний с $n=2, 3$ молекулы HD методом спектроскопии фотоосколков быстрого нейтрального пучка. The $n=2,3$ triplet Rydberg states of the HD molecule observed by fast neutral-beam photofragment spectroscopy. Keiding S., Bjerre N., Helm Hanspeter. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 5, 3050—3051 (англ.)

Исследованы переходы между $1s2p$ и $1s3s, 1s3d$ триплетными ридберговскими состояниями HD. Для изучения чистого триплетного спектра HD использовался метод лазерной спектроскопии фотоосколков в быстром пучке молекул HD; находящихся в метастабильном состоянии $C^3\Pi_u$. Отмечается хорошее согласие экспериментальных спектроскопич. констант с теоретическими, полученными из данных для H_2 Dieke G. H. (The Hydrogen Molecule wavelength tables. Ed. Gasswhite H. M., N. Y., 1972) путем их перерасчета для частиц большей массы.

И. В. Филюгин

М.А.

ф. 1987, 18, 29

H_2

1987

4 Б4394. Измерения времени жизни молекулы водорода в состоянии $d^3\Pi_u$. Lifetime measurement of $d^3\Pi_u$ state of hydrogen molecule. Kiyoshima Tatsuro. «J. Phys. Soc. Jap.», 1987, 56, № 6, 1989—1995 (англ.)

Методом задержанных совпадений измерены излучат. времена жизни τ , индив. вращательно-колебат. уровней $H_2(d^3\Pi_u)$ при их возбуждении электронным ударом и наблюдении затухания Фл на линиях Q и R перехода $H_2(d^3\Pi_u \rightarrow a^3\Sigma_g^+)$, соотв-щего т. наз. системе полос Фульхера. Найдено, что для Π^- -подуровней в системе уровней $v=0,1,2,3$, $K=2$ и для уровня $v=0$, $K=1$ величины $\tau \approx 40$ нс независимо от вращательно-колебат. уровня. В то же время τ для соотв-щих Π^+ -подуровней сильно зависят от типа колебат. уровня, что объяснено их взаимодействием с ближайшими соседними уровнями $e^3\Sigma_u^+$ -состояния. Невозмущенное значение τ для $e^3\Sigma_u^+$ состояния по оценке составляет 2 ± 1 нс. В. Е. Скурат

спектр

Х. 1988, 19, № 4

№2

(Om 27959)

1987

3 Д72. Улучшенные адиабатические поправки для состояния $a^3\Sigma_g^+$ молекулы водорода. Improved adiabatic corrections for the $a^3\Sigma_g^+$ state of the hydrogen molecule. Kołos Włodzimierz, Rychlewski Jacek. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 1, 159—166 (англ.)

Для низшего связанного триплетного состояния $a^1\Sigma^+$ молекулы водорода рассчитаны адиабатич. поправки к борн-оппенгеймеровской потенц. кривой, найденной вариационным методом с 49-членной ф-цией Джеймса—Кулиджа. С учетом адиабатич. поправок устраняются существовавшие различия между теоретическими и эксперим. значениями энергии диссоциации D_0 для H_2 в этом состоянии. Полученная потенц. ф-ция использована для расчета более точных колебат. энергий изотопомеров H_2 , HD и D_2 . А. И. Дементьев

м.п.

фр. 1988, 18, №3

H_2

1987

11 Д364. Колебательная волновая функция радиационно диссоциирующего уровня H_2^* , полученная из распределений кинетических энергий фрагментов H. Vibrational wave function of a radiatively dissociating level of H_2^* obtained from the kinetic-energy distribution of the H fragments. Koot W., Van der Zande W. J., Los J. «Phys. Rev. Lett.», 1987, 58, № 26, 2746—2749 (англ.)

Исследовано возбужденное лазерным излучением состояние $g^3\Sigma_g$ ($v=5$, $N=1$) молекулы H_2 , которое переходит в отталкивательное состояние $b^3\Sigma_u$ с испусканием фотона. Исследования проведены путем измерения распределений кинетич. энергий фрагментов H. Обсуждены трудности получения той же информации путем детектирования спектра испускаемых фотонов и показаны ограничения такого метода, тогда как при детектировании фрагментов определяется относительная кинетич. энергия в Ц-системе и есть возможность измерить одновременно всё энергетич. распределение и с большой эффективностью. Найдено, что энергетич. распределения имеют волнообразную структуру, которая непосред-

М.Н.

ср. 1987, 18, N 11

ственно связана со структурой колебательной волн. ф-ции возбужденного состояния. Из измеренных спектров получено распределение по межъядерным расстояниям, которое включает волн. ф-цию возбужденного состояния и дипольный момент перехода. Обсуждены расхождения с рассчитанными распределениями.

Н. В. В.



H₂

1987

107: 186120v Improved adiabatic corrections for the $a^3\Sigma_g^+$ state of the hydrogen molecule. Kolos, Włodzimierz; Rychlewski, Jacek (Dep. Chem., Univ. Warsaw, 02-093 Warsaw, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 125(1), 159-66 (Eng). Adiabatic corrections were calcd. for a wide range of internuclear distances for the lowest bound triplet state of H. The existing small discrepancy between theor. and exptl. D_0 values can be removed if an addnl. correction to the Born-Oppenheimer energy on the order of 0.4 cm⁻¹ is taken into account.

($a^3\Sigma_g^+$, D_0)

c. A. 1987, 107, ~20

H₂

1987

✓ 24 Б1127. Симметрия диссоциации молекул водорода: угловая зависимость доплеровского профиля для возбужденных атомов водорода ($n=4$), образующихся в столкновениях $e-H_2$. Symmetry of the dissociation of hydrogen: angular dependence of the Doppler profile of the excited hydrogen atom ($n=4$) produced in $e-H_2$ collisions. Nakashima K., Tomura H., Ogawa T. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 6, 575—578 (англ.)

Исследованы эмиссионные спектры в области β -линии Бальмера от возбужденных атомов $H^*(n=4)$, образующихся при диссоциации молекул H_2 под действием электронного удара с энергией 42 эВ. Спектры получены при углах $\theta=45^\circ$ и 90° между направлением вылета фотона и электронным пучком. Проведен анализ доплеровского уширения линии в ЭС и зависимости этого уширения от θ . Для группы быстрых фрагментов H^* (кинетич. энергия выше 2 эВ) найдены параметр асимметрии диссоциации $b>0$ и величина поляризации эмиссии $I_p=0,7\pm 0,1$. Исходя из $b>0$ сделан вывод о па-

М-А .

х. 1987, 19, № 24

параллельности момента электронного перехода и оси мо-
 лекулы H_2 . Анизотропный характер диссоциации H_2 с
 образованием быстрых фрагментов $\text{H}^*(n=4)$ отнесен
 к возбуждению промежуточного отталкивательного
 двухкратновозбужденного ридберговского состояния
 $\text{H}_2^1\Sigma_u + (2p\sigma_u)(nl\sigma_g)$. О. А. Басченко



H₂

1987

107: 67169h Fluorescent dissociation of selectively excited rotational-vibrational states of hydrogen(B,C) molecules. Noll, T.; Schmoranz, H. (Fachbereich Phys., Univ. Kaiserslautern, D-6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *Phys. Scr.* 1987, 36(1), 129-31 (Eng). Structured continuous vacuum-UV emission from selectively excited rotational-vibrational levels of H₂ in the B 2p ¹Σ_u⁺ and C 2p ¹Π_u electronic states was investigated spectroscopically. Spontaneous radiative dissocn. of H₂(B, C) mols. occurs via B, C → X bound-free emission. The C → X emission continuum and the effect of centrifugal distortion on the B → X continuum were obsd. for the 1st time.

(C → X)
(B → X)

C.A. 1987, 107, N8

H_2

1987

21 Б1019. Методика расчета энергии связи в рамках неэмпирического метода X_α -дискретного варьирования. Новиков Д. Л. «7 Респ. конф. мол. ученых-химиков. Тез. докл. Ч. 2». Таллин, 1987, 53—54

На основе неэмпирич. метода X_α -дискретного варьирования развита методика и проведены расчеты энергий связи и равновесных межъядерных расстояний для ряда двухатомных молекул, включающих s -, p - и d -элементы: H_2 , O_2 , F_2 , CO , XeF , TiB , TiC , TiN , TiO .
Из резюме

М.А.

(+8) 



X. 1987, 19, N 21

H₂

(Om. 28 458)

~1987-88

Pardo A., Poyato J.M.L.,
et al.,

X¹⁵⁺,
u.n.

Comunicaciones A la
Academia

Fluorescencia • inducida por

láser y potenciales electrónicos



H₂

1987

Pardo A., Poyato J. M. L.,
et al.

Rev. R. Acad. Cienc.

Exactas, Fis. Nat. Mad-
rid 1987, 81 (2), 389-92.

(Ces. KM; III)

M. n.,
X¹Σ

H₂

1987

200-
quercus
(npera)

106: 146460d Double-resonance laser-ionization spectroscopy of molecular hydrogen in the region of the second dissociation limit. Parker, David H.; Buck, Jesse D.; Chandler, David W. (Dep. Chem., Univ. California, Santa Cruz, CA 95064 USA). *J. Phys. Chem.* 1987, 91(8), 2035-7 (Eng). Double-resonance multiphoton

ionization was used to probe unstudied Franck-Condon regions in transitions between excited electronic states in H₂. The 1st resonance was selected for a long av. internuclear distance, and absorptions of a 2nd delayed laser pulse at energies near the 2nd disson. limit were detected as peaks in the delayed ionization spectra. New spectroscopic and photodynamic information on the highest excited bound vibrational levels of the B, B', and C electronic states was obtained.

C. A. 1987, 106, 118

H_2

1987

19 Б1216. Лазерно-ионизационная спектроскопия двойного резонанса молекулярного водорода в области второго диссоционного предела. Double-resonance laser-ionization spectroscopy of molecular hydrogen in the region of the second dissociation limit. Parker David H., Buck Jesse D., Chandler David W. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 8, 2035—2037 (англ.)

Методом двойной резонансной многофотонной ионизации изучены переходы между возбужденными электронными состояниями молекулы H_2 . В результате двухфотонного поглощения заселялись отдельные вращат. уровни состояния E , $F^1\Sigma_g^+$ ($v=5,6$) H_2 (состояние E , F характеризуется наличием двух минимумов на потенциальной кривой, уровни $v=5,6$ лежат вблизи потенциального барьера). Далее молекулы $H_2(E, F)$ с небольшой временной задержкой (40 нс) ионизировались (через промежут. состояния B , B' , C , H_2) излучением импульсного перестраиваемого лазера. Регистрировались образующиеся ионы H^+ и H_2^+ (время-пролетный масс-спектрометр). Уточнено отнесение ряда уровней и получены данные о фотодинамике высоколежащих колебат. уровней состояний B , B' и C .
В. М. Ковба

М.П.

X. 1987, 19, N 19

H₂

1987

.) 18 Б1138. Фотоэлектронное исследование резонансно усиленной многофотонной ионизации H₂ через состояния $B'^1\Sigma_u^+$ и $D^1\Pi_u$. Photoelectron studies of resonantly enhanced multiphoton ionization of H₂ via the $B'^1\Sigma_u^+$ and $D^1\Pi_u$ states. Pratt S. T., Dehmer P. M., Dehmer J. L. «J. chem. phys.», 1987, 86, № 4, 1727—1732 (англ.)

Методом резонансно усиленной многофотонной (3 + 1) ионизации (МФИ) исследованы фотоэлектронные спектры молекул H₂. Возбуждение осуществлялось излучением импульсного перестраиваемого лазера на красителе с удвоением частоты (265,5—272,5 нм) по схеме

$$X^2\Sigma^+ (v^+ = 0-9) \xrightarrow{h\nu} (B'^1\Sigma_u^+, v' = 0-2 \text{ или } D^1\Pi_u, v' = 0, 1) \xleftarrow{3h\nu} X^1\Sigma^+ (v'' = 0).$$
 Регистрировались образующиеся ионы H₂⁺ (время-пролетный масс-спектрометр) и фотоэлектроны. Распределение интенсивности пиков в спектрах МФИ хорошо согласуется с рассчитанными значениями факторов Франка—Кондона для указанных переходов.

В. М. Ковба

М. П.

X. 1987, 19, N 18

1987

6 Л314. Наблюдение расщепления Отлера—Таунса при многофотонной ионизации молекулы H_2 : измерение колебательных моментов перехода между возбужденными колебательными состояниями. Observation of Autler-Townes splitting in the multiphoton ionization of H_2 : Measurement of vibronic transition moments between excited electronic states. Quesada Mark A., Lau Albert M. F., Parker David H., Chandler David W. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1987. 36, № 8, 4107—4110 (англ.)

Сообщается о первом наблюдении расщепления Отлера—Таунса (динамическое штарковское расщепление) в молекуле H_2 методом двухцветной многофотонной ионизации. Двухцветная четырехфотонная ионизация молекул H_2 осуществлялась через резонансные уровни $E, F^1\Sigma_g^+ v=6, J=1$ (1) и $O^1\Pi_u v=2, J=2$ (2). На основании полученных эксперим. данных определены колебательный момент перехода между состояниями (1) и (2) ($2,0 \pm 0,5$ ат. ед.). Эксперим. значение хорошо согласуется с результатами ab-initio расчетов других авторов ($1,97$ ат. ед.). Библ. 26. В. А. Е.

Ф. 1988, 18, № 6.

H_2

DM 28104

1987

4 Д119. . Применение теории квантового дефекта к состояниям H_2 с двумя минимумами. Quantum-defect theory of double-minimum states in H_2 . Ross S., Jungen Ch. «Phys. Rev. Lett.», 1987, 59, № 12, 1297—1300 (англ.)

Многоканальный метод квантового дефекта использован для расчета вибронных уровней молекулы H_2 , возникающих при взаимодействии низколежащих состояний симметрии $^1\Sigma^+$, характеризующихся потенц. кривыми с двумя минимумами. В качестве базиса взяты неэмпирические волн. ф-ции H_2 , полученные в вариационных расчетах Колоса и Дресслера. Недиagonalные матричные элементы гамильтониана учитывают каналы, соответствующие однократным и двукратным возбуждениям. В результате расчета получен полный набор вибронных ридберговских состояний типа $H_2+1\sigma_u$ и $H_2+1\sigma_g$, в котором первые 40 уровней воспроизводят эксперим. спектр.

А. И. Дементьев

М.П.

ф.1988, 18, №4

H₂

1987

107: 143837s Refined diatomic partition functions I. Computational methods and molecular hydrogen and carbon monoxide results. Trin, Alan W. (Dep. Phys., Univ. Victoria, Victoria, BC Can. V8W 2Y2). *Astron. Astrophys.* 1987, 182(2), 348-58 (Eng). The recently discovered systematic errors in traditional calcs. of the H₂ and CO partition functions were traced to mol. consts. that inadequately represent the H₂ energy levels and to the use of the J. B. Tatum (1956) approxn. for diat. partition functions. First order centrifugal distortion is the principal cause of the T. approxn. errors. A survey of astrophys. important mols. indicates the errors from this source usually are 3-7% for most hydrides and 1-3% for most nonhydrides at 4000 K. A new partition function approxn. was derived that corrects the T. approxn. for a no. of effects including 1st-order centrifugal distortion. This new approxn. reduces the H₂ partition function errors from 6 to 2% and the CO partition function errors from 1 to 0.004% at 4000 K. The most accurate partition functions of H₂ and CO are calcd. using direct energy summation methods. At 100-9000 K the max. systematic errors of these calcs. were estd. as 1.1% in the partition function, 0.1% in the related contribution to the internal energy, and 1% in the related contribution to the sp. heat at const. vol. These stds. of accuracy are maintained in polynomial fits to the H₂ and CO partition functions.

CYNNA
NO COCMOALH.

(H) X

C.A. 1987, 107; N16 CO

H_2

1987

19 Б1154. Излучательная диссоциация H_2 и излучательная рекомбинация Kr_2 , наблюдаемые методом спектроскопии вакуумного ультрафиолета. Radiative dissociation of H_2 and radiative recombination of Kr_2 observed by VUV spectroscopy / Schmoranzner H. // Spectral Line Shapes. Vol. 4. Proc. 8th Int. Conf., Williamsburg, Va, 9—13 June, 1986.— Hampton (Va), 1987.— С. 315—337.— Англ.

Наблюдалась спонтанная излучат. диссоциация молекул H_2 через континуумы, связанные с переходами $(2p\sigma)B^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ и $(2p\pi)C^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ при вращательно селективном возбуждении отдельных колебат. уровней состояний $B^1\Sigma_u^+$ и $C^1\Pi_u$ излучением синхротронного источника в обл. вакуумного УФ (ВУФ). Выполнены модельные квантовые расчеты спектров непрерывной флуоресценции в ВУФ диапазоне связанных с переходами с дискретных уровней состояний B и C в обл. континуума лежащего выше диссоц. предела со-

М.П.

Х. 1989, № 19

стояния $X^1\Sigma_g^+$. Результаты расчетов в основном согласуются с эксперим. спектрами. В обл. голубого крыла резонансной атомной линии $^3P_1-^1S_0\text{Kr}$ (123,584 нм) измерены ВУФ спектры флуоресценции эксимеров Kr_2 при возбуждении криптона электронным ударом с энергией 20 кэВ. Спектры интерпретированы как излучат. рекомбинация, обусловленная переходами из несвязанной обл. состояния $1_u(^3P_1)$ в обл. связанных состояний $XO_g^+ (^1S_0)$. Выполнены численные расчеты факторов Франка—Кондона для таких переходов. В. М. Ковба

H₂

1987

Semenov S. G.

Vestn. Leningr. Univ.,

ab initio
parum

Ser. 4: Fiz., Khim.,
1987, (4), 102-4.

( H_2^+ ; III)

H₂

1987

108: 65050j Spectroscopic identification of rovibronic levels lying above the potential barrier of the $EF^1\Sigma_g^+$ double-minimum state of the hydrogen molecule. Senn, P.; Dressler, K. (Phys. Chem. Lab., ETH-Zent., CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1987, 87(12), 6908-14 (Eng). Spectroscopic data on the higher vibrational levels of the $EF^1\Sigma_g^+$ state of the H₂ mol. are scarce. New identifications are reported of energy levels with $J = 0-5$ which fall into the range between $\nu_{EF} = 9$ and 20, i.e., the energy region above the potential barrier of the double-min. EF potential curve. Some previously published line assignments and term values are cor. The results are mostly based on new assignments of $EF^1\Sigma_g^+ + B^1\Sigma_u^+$ bands in Dieke's hydrogen mol. wavelength tables published in 1972. The newly identified states are of interest in multiphoton spectroscopy and in comparisons of exptl. properties with results of ab initio calcs.

($EF^1\Sigma_g^+$)

высокие
конфам.
уровни)

С.А. 1988, 108, №8

М₂

1987

- 17 Б1232. Спектроскопическая идентификация колебательно-вращательных уровней лежащих выше потенциального барьера состояния $EF^1\Sigma_g^+$ с двумя минимумами молекулы H_2 . Spectroscopic identification of rovibronic levels lying above the potential barrier of the $EF^1\Sigma_g^+$ double-minimum state of the H_2 molecule. Senn P., Dressler K. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 12, 6908—6914 (англ.)

С учетом результатов точных неэмпирич. расчетов дано новое отнесение ряда полос в системах $EF^1\Sigma^+ \leftarrow B^1\Sigma_u^+$, $EF^1\Sigma_g^+ \leftarrow C^1\Pi_u$ и $GK^1\Sigma_g^+ \leftarrow B^1\Sigma_u^+$ молекулы H_2 и выполнена идентификация уровней колебательно-вращат. энергии состояния $EF^1\Sigma_g^+H_2$ ($v_{EF}=14-20$, $J=0-6$) лежащих выше потенциального барьера (состояние $EF^1\Sigma_g^+$ характеризуется наличием двух минимумов на потенциальной кривой). Приведена сводная таблица электронно-колебательно-вращат. термов для состояния $EF^1\Sigma_g^+$ ($v=0-20$, $J=0-5$) и состояния $GK^1\Sigma_g^+$ ($v=0,1$, $J=0-5$). В. М. Ковба

М.А.

X. 1988, 19, N 17

H₂

1987

М.А.

8 Л244. Спектроскопическая идентификация колебательно-вращательных уровней лежащих выше потенциального барьера состояния $H_2(EF^1\Sigma_g^+)$ с двумя минимумами. Spectroscopic identification of rovibronic levels lying above the potential barrier of the $EF^1\Sigma_g^+$ double-minimum state of the H_2 molecule. Sen P., Dressler K. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 12, 6908—6914 (англ.)

Предложена новая идентификация уровней с $J=0 \div 5$ состояния $H_2(EF^1\Sigma_g^+)$ с двумя минимумами, которые приходятся на области $\nu_{EF}=9-20$, т. е. лежат выше потенц. барьера между минимумами. Результаты базируются на новом отнесении ряда полос системы $EF^1\Sigma_g^+ - B^1\Sigma_u^+$ в таблицах линий молекулярного водорода, опубликованных в 1972 г. Библ. 34.

В. С. Иванов

ф. 1988, 18, № 8

He

[от. 27543]

1987

2 Б1079. Туннелирование в двухминимумном состоянии $EF^1\Sigma_g^+$ молекулярного водорода. Tunneling in the double-minimum $EF^1\Sigma_g^+$ state of molecular hydrogen. Senn P., Dressler K. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 2, 1205—1211 (англ.)

Рассмотрена задача о расчете колебательно-вращательных уровней энергии для молекул H_2 , D_2 , HD , HT , DT и T_2 в электронном состоянии $EF^1\Sigma_g^+$, характеризующейся потенциальной кривой с двумя минимумами. Расчеты основаны на полуклассич. приближения Бора—Зоммерфельда для оценки проницаемости барьера, ф-ле для энергии взаимодействия двух резонирующих состояний, связанных туннельным переходом, и неэмпирич. потенциальной кривой. Для положений уровней вдали от максимума барьера (приближение высокого барьера) использована более простая ф-ла. Результаты сопоставлены с эксперим. данными и результатами более точных квантовых расчетов.

А. В. Немухин

М.П.

(75) 

X. 1988, 19, № 2

H₂

1987

10 Д68. Неадиабатические собственные значения и адиабатические матричные элементы для всех изотопов двухатомного водорода. Nonadiabatic eigenvalues and adiabatic matrix elements for all isotopes of diatomic hydrogen. Schwartz Carey, Le Roy Robert J. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 121, № 2, 420—439 (англ.)

Для всех связанных и квазисвязанных колебательно-вращательных уровней основного электронного состояния шести изотопических двухатомных молекул водорода вычислены величины энергии, поляризуемости, анизотропия поляризуемости и недиагональные матричные элементы переходов с $\Delta j = 0, \pm 2$; $\Delta v = 0, -1, -2$, необходимых для предсказания интенсивностей в спектрах комб. рас. При расчетах использовались новейшие данные о внутримолекулярном потенциале. Разработана также процедура масштабирования, позволяющая известные результаты для изотопов H₂, HD и D₂ экстраполировать, чтобы получить данные для изотопич. молекул трития HT, DT, T₂.

Б. Ф. Гордиец

М.А.

45

ф. 1987, 18, N 10

H₂

1987

9) 19 Б1212. Положение линий в спектрах комбинационного рассеяния молекулярного водорода. H₂, HD, HT, D₂, DT и T₂. Raman line positions in molecular hydrogen: H₂, HD, HT, D₂, DT, and T₂. Veirs D. Kirk, Rosenblatt Gerd M. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 121, № 2, 401—419 (англ.)

С высокой точностью ($\sim 0,03 \text{ см}^{-1}$) измерены спектры спонтанного комбинац. рассеяния молекул H₂, D₂, T₂ и смешанных изотопомеров. Спектры возбуждались мощным Ar⁺-лазером. Приведено положение ($\Delta\nu$) наблюдаемых линий Q-, Q- и S-ветвей указанных молекул. Результаты сопоставлены с выполненными ранее измерениями и данными неэмпирич. расчетов. Во всех случаях отмечено возрастающее с J расхождение эксперим. положения полос с рассчитанными на основе известных молек. постоянных.

В. М. Ковба

М.А.

(45) 

X. 1987, 19, N 19

№2 (A2)

1987

Б 24 Б1233. Спектроскопические исследования процессов передачи энергии в микроволновом разряде через гелий и смеси инертный газ-водород. Spektroskopische Untersuchungen von Energieübertragungsprozessen in Mikrowellenentladungen von Helium und Edelgas — Wasserstoff — Gemischen. Wittig Bodo. Diss. Dokt. Naturwiss. Abt. Chem. Ruhr — Univ. Bochum, 1987. 121 S., ill. (нем.)

Диссертация посвящена исследованиям спектров испускания гелия и водорода возбуждаемых в микроволновом разряде через гелий и смеси водород-инертный газ (Ar, Ne). В первой части работы описаны эксперимент и нек-рые методич. вопросы. В остальных разделах изложены результаты наблюдений и обсуждены: протекающие в разряде процессы образования молекул He_2 в возбужденных синглетных и триплет-

М.П.

Х. 1988, № 24

ных электронных состояниях; относит. заселенность колебат. уровней состояния $B^1\Sigma_u + \text{H}_2(\text{D}_2)$ при столкновениях молекул водорода с возбужденными атомами инертных газов; распределение интенсивности полос в системе Лаймана (переход $B^1\Sigma_u + \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) H_2 ; влияние на спектры давл. газа и т-ры. Дан перечень наблюдаемых переходов.

В. М. Ковба

H₂

[Om. 26495]

1987

Wright J.S., Barclay V.F.,

См. также,
мол. физ.

J. Chem. Phys., 1987,
86, N 5, 3054-55.

H₂

1987

Wright James S.

J. Chem. Phys., 1987,

86, N 8, 4714 - 4717.

u.n.
Cor. J. Chem. Phys., 1986, 85,

346. ● (Cor. D₂; III)

H₂

1987

номери
и 806-
уех 2.

108: 138108w. Effect of vibronic coupling on the long-range intermolecular interaction. Yamabe, Tokio; Asai, Yoshihiro (Fac. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan 606). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1987, 21, 569-72 (Eng). The nonadiabatic energy correction term of the H₂ at large sepn. is discussed to determine whether or not the nuclear motion induces the interaction potential. Nonadiabatic vibrational motion of nuclei induces the internal charge polarization of atoms to give the novel correction term to the London R^{-6} force. The correction term is $(4/M)(1/R^3)$, which is important at large R despite the magnitude of nuclear mass.

C.A. 1988, 108, N16

H_2

1988

13 Б1023. Одноэлектронные плотности H_2 , N_2 и LiH в координатном, импульсном и фазовом пространствах. Position, momentum, and phase-space one-electron densities of H_2 , N_2 , and LiH / Anchell J. L., Harriman J. E. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 11.— С. 6860—6869.— Англ.

Плотности рассчитаны при различных межъядерных расстояниях на основе волновых ф-ций, полученных методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных (для H_2 и N_2) и от одно- до четырехкратных (для LiH) возбуждений. Использованы базисы сгруппированных гауссовых ф-ций 6-311 ГФ для N_2 и LiH и 6-311 ГФ** для H_2 . Проанализированы как полные, так и разностные (по отношению к атомам) плотности. В координатном пространстве отмечено (хотя и не всегда) смещение плотности в обл. между ядрами, а в импульсном пространстве — выполнение принципа направленности связи (преимущественной ориентации им-

М.Н.

(+2)

х. 1989, N13

LiH, N_2

пульса в перпендикулярном оси молекулы направлении). Для LiH принцип направленности связи не выполняется из-за высокой полярности молекулы. Плотности в фазовом пространстве позволяют получить дополнит. информацию о перераспределении электронов при образовании хим. связи. Анизотропия фазовой плотности по импульсу мала для H_2 и LiH и велика для N_2 .
А. А. Сафонов

H₂

Om. 31 193

1988

110: 47611e Raman spectroscopy of matrix-isolated hydrogen.
I. Influence of matrixes on defects. Bier, K. D.; Jodl, H. J.;
Daeufer, H. (Fachber. Phys., Univ. Kaiserslautern, 6750 Kaiserslautern,
Fed. Rep. Ger.). *Can. J. Phys.* 1988, 66(8), 708-15 (Eng).
H₂ was treated as a model substance for matrix-isolation effects.
Raman investigations were made concerning the influence of matrix
material on the various modes of H₂. For the doublet in the
vibrational range of H₂ in rare-gas solids, an assignment to Q₁(0) and
Q₂(1) was made and substantiated. In addn. to matrix-shift
consideration, temp. influences, ortho-para investigations, and
aggregation effects, different sites were observable in the nonspherical
matrixes, N₂ and O₂, with a restriction of free rotation in N₂.

check KP
b

unampuse

c.A. 1989, 110, N6

H₂

1988

срелмр КР
в матрице

110: 47612f Raman spectroscopy of matrix-isolated hydrogen. II. Influence of defects on matrixes. Bier, K. D.; Jodl, H. J.; Daeufer, H. (Fachber. Phys., Univ. Kaiserslautern, 6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *Can. J. Phys.* 1988, 66(8), 716-20 (Eng). H₂ is treated as a model substance for matrix-isolation effects. Raman investigations were made concerning the influence of the defect on the matrix material Ar, Kr, Xe, N₂, and O₂. The influence of the matrix on the H₂ impurities was investigated previously. A comparison of the spectra of pure mol. crystals with the spectra of doped crystals (1% H₂ or 1% D₂) shows distinct changes in the Raman spectra of the matrixes. Weak influences of the impurity on site symmetry and on the vibron-phonon and phonon-phonon coupling mechanisms of the anisotropic matrixes N₂ and O₂ were obtained. An addnl. line, obsd. in the vibron-phonon structure of N₂ and O₂, was interpreted as a coupled resonant mode. Direct evidence of a resonant mode at 39 cm⁻¹ is only obtained in the system contg. 1% D₂ in N₂.

C.A. 1989, 110, 46

H_2

1988

13 Б1022. Гиперполяризуемость двухатомных молекул: влияние колебаний и вращения. Hyperpolarizabilities of diatomic molecules² the effects of vibration and rotation. Bishop D. M., Lam B. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 143, № 6, 515—520 (англ.)

Для двухатомных неполярных молекул получены выражения дипольной поляризуемости α , второй гиперполяризуемости γ , квадруполь-квадрупольной поляризуемости C и диполь-диполь-квадрупольной поляризуемости B , явно учитывающие колебания и вращение молекулы. Полученные ф-лы использованы для расчета указанных св-в H_2^+ и H_2 . Полученные результаты сопоставлены с данными, основанными на классич. усреднении по ориентациям молекулы тензоров поляризуемостей, заданных в молек. системе координат. Показано, что электронные составляющие поляризуемостей близки между собой в случае точной и приближенной ф-л, однако для возбужденных колебат. состояний вращат. и колебат. составляющие заметно различаются.

А. А. Сафонов

М.П.

(4) 82

Х. 1988, 19, N 13

H₂

OM. 29634

1988

109: 82206c The R-dependent forbidden transition moments for $c\ ^3\Pi_u \rightarrow b\ ^3\Sigma_u^+$ of molecular hydrogen. Chiu, Luc Yung Chow; Lafleur, Edward E. (Dep. Chem., Howard Univ., Washington, DC 2059 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 147(2-3), 253-7 (Eng). The elec.-quadrupole and the magnetic-dipole transition moments between the $v = 0$ state of metastable $c\ ^3\Pi_u$ and the dissociative $b\ ^3\Sigma_u^+$ states of H₂ were computed as a function of R . The accurately calcd. transition probabilities for $c\ ^3\Pi_u \rightarrow b\ ^3\Sigma_u^+$ were compared with that from the Franck-Condon approxn. The simple $c\ ^3\Pi_u$ state electronic wavefunction, generated for a wide range of R , yielded potential energy, which agrees with potential energy calcd. from a 75-term elliptical function.



($|R_{mn}|^2$)

C. A. 1988, 109, N10.

H₂

Im. 29240, a" 1388

17 Б1233. Инфракрасная лазерная спектроскопия системы $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$ H₂ и D₂. Infrared laser spectroscopy of the $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$ system of H₂ and D₂. Davies P. B., Guest M. A., Johnson S. A. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 5, 2884—2890 (англ.)

В диапазонах 2100—2210, 700—740 и 550—630 см⁻¹, используя различные диодные лазерные источники, с разрешением, ограниченным доплеровским уширением, измерены ИК-спектры молекул H₂ и D₂, связанные с переходами в системе $(1s\sigma 2s\sigma) a^3\Sigma_g^+ - (1s\sigma_g 2p\pi_u) c^3\Pi_u$ ($\Delta v = 0, \pm 1$) (часть наблюдаемых переходов неидентифицирована). Молекулы H₂(D₂) в возбужденных электронных состояниях получали при электронной

(м.п.)

(4) D₂

х. 1988, 19, N 17

бомбардировке молекул в условиях разряда переменного тока через водород (давл. 0,07—1,3 мм). Разрешена тонкая и СТ структура отдельных линий, предв. анализ к-рых показал, что в состоянии $a^3\Sigma_g^+$ СТ эффекты проявляются в значительно большей мере, чем тонкая структура, а преобладающим в СТС состояния $c^3\Pi_u$ является контактное взаимодействие Ферми между остовом и ридберговским $1s\sigma_g$ электроном. В рамках разработанной ранее теории («Can. J. Phys.», 1975, 53, 2353) выполнено моделирование интенсивностей переходов СТС, $b_{BJ}(c) - b_{BS}(a)$. В. М. Ковба

H₂

от. 29240a"1988

9 J1198. ИК-лазерная спектроскопия системы $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$ H₂ и D₂. Infrared laser spectroscopy of the $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$ system of H₂ and D₂. Davies Paul B., Guest Michael A., Johnson Simon A. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 5, 2884—2890 (англ.)

С использованием возбуждения диодным лазером получены ИК-спектры в доплеровском пределе молекул H₂ и D₂ в электрич. разряде на перем. токе в области переходов с $\Delta v = 0, \pm 1$ системы полос $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$. В спектрах наблюдаются сигналы поглощения атомарного водорода, которые использованы для доказательства стимулированной природы части эмиссионных переходов молекул. Исследована тонкая и сверхтонкая структура спектров и проведен их предварительный анализ. Показано, что сверхтонкая структура в состоянии a описывается в модели связи b_{fs} . Библ. 56.

Е. П. Смирнов

М.П.

(41) ☒

ср. 1988, 18, № 9

H₂

PM 29240, a"

1988

$a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$,
UK chemp

108: 176176z Infrared laser spectroscopy of the $a^3\Sigma_g^+ - c^3\Pi_u$ system of molecular hydrogen and molecular deuterium. Davies, Paul B.; Guest, Michael A.; Johnson, Simon A. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EP). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(5), 2884-90 (Eng). Doppler limited IR laser spectra of H₂ and D₂ were recorded in an a.c. discharge with diode laser sources and assigned to $\Delta v = 0$ and ± 1 sequence bands of the a-c system. Intense absorption signals from at. H were detected and used to confirm that some mol. spectra occurred in stimulated emission; as was found for a known D₂ laser transition. Several of the diode spectra recorded at shorter wavelengths ($\Delta v = 1$ sequences) cover regions previously obsd. by Fourier transform emission expts. on the a-c system. Both fine and hyperfine structure were revealed, and while the $a^3\Sigma_g^+$ state has negligible fine structure (at this resolu.), hyperfine effects are apparent and are modeled using a b₂ coupling case.

~~PM 29240~~
C.A. 1988, 108, N20

H₂

[Om. 31517]

1988

когерентн.
субгармон.
антистокс
раман.
спектроск.
CSARS

Debarre D.,
Lefebvre M., et al.,

Opt. Commun. 1988,
69, 5-6, 362-66

H₂

1988

110: 30566w Optimization of semiempirical determination of rovibronic radiative and collisional transition probabilities. $d^3\Pi_u^- \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ and $d^3\Pi_u^- \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ transitions in hydrogen, hydrogen monodeuteride and deuterium. Drachev, A. I.; Lavrov, B. P.; Prosikhin, V. P. (USSR). *Vestn. Leningr. Univ., Ser. 4: Fiz., Khim.* 1988, (3), 16-25 (Russ). A semiempirical approach to the detn. of non-Franck-Condon rovibronic transition probabilities in diatomics is developed by introducing an optimizational procedure for obtaining in the adiabatic approxn. the internuclear distance dependencies of the electronic transition moment (for radiative) and partial amplitudes of electron scattering on a mol. with fixed nuclei (for collisional transitions). The advantages of the proposed method are illustrated on the example of 2 transitions in a H₂ mol.

finn, $d^3\Pi - a^3\Sigma^+$
 $d^3\Pi - X^1\Sigma_g^+$

(+2) HD, D₂ ●

C.A. 1989, 110, N 4

H₂

1988

109: 239374f Precise multiphoton spectroscopy of hydrogen molecule. Eyler, E. E.; Gilligan, J. M.; McCormack, E. (Dep. Phys., Yale Univ., New Haven, CT 06511 USA). *AIP Conf. Proc.* 1987 (Pub. 1988). 172(Adv. Laser Sci.-3), 331-3 (Eng). A review with 5 refs. on recent progress in the detn. of abs. energy levels in H₂ using 2- and 3-photon excitation. Several vibrational bands of the E, F ← X transition were measured using 2-photon excitation at ~220 nm, to an accuracy of 0.01 cm⁻¹, an improvement by nearly an order of magnitude. Three-photon transitions to the B(2pσ) and C(2pπ) states were measured to 0.06 cm⁻¹. The 3-photon measurements are somewhat less precise because they are affected by shifts arising from the a.c. Stark effect and from interference between 3-photon excitation and 3rd harmonic generation. Transitions were measured from the E, F state to the disocn. limit yielding H(1s) + H(2s or 2p), providing a preliminary new value of 36118.1 ± 0.2 cm⁻¹ for the disocn. energy of H₂.

Do

C.A. 1988, 109, N26

2^е атомные
молекулы

H₂ (Ом. 30928) 1988

(9, метод)

111: 84420h A new method for determining ionization potentials of diatomic molecules. Glushkov, A. V. (USSR). Zh. Prikl. Spektrosk. 1988, 49(5), 840-2 (Russ). A method for calcn. of ionization potentials of diat. mols., based on the std. shell model is proposed. The method does not require a soln. of the corresponding eigenvalue problem. A scaling condition for the nuclear charges is employed. The method is tested on H₂, Li₂, C₂, N₂, O₂, and F₂.

(+6) ☒

С.А. 1989, 11, N10

№2

(ДМ-30928)

1988

7 Б1022. Новый метод определения потенциалов ионизации двухатомных молекул / Глушков А. В. // Ж. прикл. спектроскопии.— 1988.— 49, № 5.— С. 840—842.— Рус.; рез. англ.

Предложен эффективный подход к определению Пт ионизации двухатомных молекул, базирующийся на оболочечной модели двухатомных молекул с использованием условия скейлинга по заряду ядер и не требующий численного решения соотв. задачи на собственные значения. Метод апробирован на гомоядерных двухатомных молекулах M_2 ($M=H, Li, C, N, O, F$) и м. б. полезен в различных приложениях. Резюме

Г.

(75)



Li_2 ,



Ca, N_2, O_2, F_2

X. 1989, №7

1988

№2

· 9 Б1235. Динамические ограничения на схемы резонансной ионизации малых молекул. Dynamical constraints on resonant ionization schemes for small molecules / Hessler J. P., Glab W. L., Ettinger D. G. // Reson. Ioniz. Spectrosc., 1988: Proc. 4th Int. Symp. Reson. Ioniz. Spectrosc. and its Appl. Gaithersburg, Md, 10—15 Apr., 1988.— Bristol; Philadelphia, 1988.— С. 117—120.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

Обсуждены эффективная и селективная схема резонансной $(2+1)$ -ионизации для детектирования молек. водорода, по к-рой сперва осуществлялся двухфотонный переход между низшими колебат. уровнями $X^1\Sigma_g^+(1s\sigma)$ и $E^1\Sigma_g^+(2s\sigma)$ состояний и послед. однофотонным $R(0)$ переходом в состояние $8p\sigma$ ($v=1$) выше Пт ионизации. Измерены спектроскопич. и динамич. св-ва промежут. $E^1\Sigma_g^+$ состояния. Спонтанные и индуцированные электрич. полем каналы диссоциатив-

М.П.

X.1990, N 9

ного распада высоких синглетных *np* ридберговских состояний имеют жесткие ограничения на использование электрич. поля для усиления селективности ионизац. схемы. Для использованной схемы оценен предел чувствительности конц-ии молекул в 10^6 см^{-3} . Прецизионные измерения Q-ветви двухфотонного перехода позволили получить значения нек-рых молек. постоянных для $v=0 \ E^1\Sigma_g^+$: $T_{00}=99164,810 \text{ см}^{-1}$, $B_0=31,7454 \text{ см}^{-1}$ и $D_0=0,021 \text{ см}^{-1}$. Н. В. Кулакова



H₂

(Om. 31143)

1988

Капказ С.П.,

(EF¹⁻⁺2_g) Хим. ф-цы. 1988, 7, N12,
1598-1608.

расчет
пометки.
ф-ции

№2

1988

10 Д127. Атомные и молекулярные приложения метода кластерного разложения для открытых оболочек с неполными модельными пространствами. Atomic and molecular applications of open-shell cluster expansion techniques with incomplete model spaces. Koch S., Mukherjee D. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 145, № 4, 321—328 (англ.)

С использованием разработанного ранее формализма метода кластерного разложения для открытых оболочек с неполными модельными пространствами (Mukherjee D. «Int. J. Quant. Chem. Symp.», 1986, 20, 409) выполнены расчеты низших электронных состояний трех двухэлектронных систем: атома He, молекулы H_2 и иона He^{2+} . Для He^{2+} получены адиабатические потенц. кривые четырех низших состояний $^1\Sigma_g^+$ и двух низших состояний $^3\Sigma_g^+$. Найдено, что первое возбужденное состояние $^1\Sigma_g^+$ является связанным и характеризуется равновесными параметрами $R_e \approx 3,6 a_0$ и $D_d \approx 0,33$ эВ. Библи. 33.

А. И. К.

И.Л.

IX(11)

ф. 1988, 18, N 10.

H₂

1988

109: 179167d Regular perturbations in relative probabilities of emission of the R and P branches of the $d^3\Pi_u^+ \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ and $e^3\Sigma_u^+ \rightarrow a^3\Sigma_g^+$ transitions of a hydrogen molecule. Lavrov, B. P.; Tyutchev, M. V.; Ustimov, V. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1988, 64(6), 1251-5 (Russ). The relative probabilities were measured of the spontaneous emission in the R- and P-branches for the H₂ mol. Upon the anal. of the data, the electronic-rotational interactions of the states $d^3\Pi_u^+$ and $e^3\Sigma_u^+$ were calcd. in the 2nd order of the perturbation theory, while both the electron matrix element L_{de} , describing this interaction, and also the electron moments $d \rightarrow a$ and $e \rightarrow a$ of the radiative transitions were calcd. independently of the internuclear distance. The required matrix elements of the integral stages of the internuclear distance in the vibrational wave functions were numerically calcd. Despite the simplicity of the model used, good agreement was obsd. between theory and expt.

уменьшить.
(Pu & Rembert)

C. A. 1988, 109, N 20

H_2 (K)

1988

110: 15323w Infrared studies on solid hydrogen, deuterium and hydrogen deuteride using Fourier-transform spectroscopy. Lee, Sang Young (Ohio State Univ., Columbus, OH USA). 1987. 227 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8804065. From Diss. Abstr. Int., B 1988, 49(2), 454.

U₂ example

D_2 , HD

(72) ☒

C.A. 1989, 110, N 2

H₂

DM 29633

1988

11 Д73. Теоретическое изучение вращательной преддиссоциации состояния $c^3\Pi_u$ молекулы H_2 . Theoretical study of the rotational predissociation of the $c^3\Pi_u$ state of H_2 . Martín F., Borondo F. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 147, № 2—3, 246—252 (англ.)

Исследуется преддиссоциация колебательных уровней состояния $^3\Pi_u$ молекулы H_2 . Рассчитаны волн. ф-ции состояний $c^3\Pi_u$ и $b^3\Sigma_u^+$. Использован метод КВ в базисе гауссовых ф-ций (6s5p). Найдены матричные элементы вращательного взаимодействия состояния $c^3\Pi_u$ с состоянием $b^3\Sigma_u^+$. Колебательные ф-ции состояния $^3\Pi_u$ найдены вариационным путем, а ядерные ф-ции непрерывного спектра состояния $^3\Sigma_u^+$ получены в модели сферич. ящика. На конечном этапе расчета получены времена жизни преддиссоциирующих колебательных уровней состояния $^3\Pi_u$, которые сравнены с экспериментальными.

А. И. Дементьев

М.П.

ф. 1988, 18, IV 11

H₂

(Om. 29633)

1988

Франц.
прецесс.
? с П₄ соот.

/ 109: 61694v Theoretical study of the rotational predissociation of the c¹_u state of molecular hydrogen. Martin, F.; Borondo, F. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 147(2-3), 246-52 (Eng). The rotational coupling responsible for this process is accurately calcd. for the internuclear distances of interest, and the validity of the pure precession approxn. in this particular case is analyzed. Numerical results for the predissociative life-times of the vibrational levels of this state are compared with previous exptl. and theor. values.

с. А. 1988, 109, N 8

H₂

OM. 30868; 30997 1988

110: 66717k Predissociation of the D¹Π_u⁺ state of molecular hydrogen by photon impact. Mrugala, Felicja (Inst. Phys., Nicholas Copernicus Univ., 87-100 Torun, Pol.). *Mol. Phys.* 1988, 65(2), 377-89 (Eng). The resonances in the photodissocn. reaction H₂(X ¹Σ_g⁺; ν' = 0, J' = 0, 1, 2) + hν → H(1s) + H(2s, 2p), related to the predissociating D ¹Π_u⁺; ν = 3 - 5, J = J' + 1 levels, were investigated theor. within the close coupling approach accounting for all nonadiabatic interactions between the D state and the 2 dissociative B ¹Σ_u⁺ and B' ¹Σ_u⁺ states, and within the perturbative discrete-continuum configuration mixing approach of Fano. The Λ-doublings, the profile parameters, and the H(2s)/(H(2s) + H(2p)) branching ratios corresponding to these resonances were calcd. using the accurate ab initio results for the potential energy curves and for the nonadiabatic couplings, obtained recently by L. Wolniewicz and K. Dressler, (1988). An improvement over previous D state predissocn. calcns. was achieved in overall consistency of the results with the exptl. data. The discrepancies remaining are of order of 10%. A new computational method, based on the log-deriv. algorithms, was worked out to perform the perturbative anal. of the resonance profiles. Following this method, the perturbative anal. becomes definitely less laborious and, if not adequate, may serve to facilitate the more rigorous lifetime matrix anal. of resonances.

предиссоц.,
D¹Π_u⁺

C.A. 1989, 110, N 8.

H₂

ст. 30868; 30997 1988

6 Д263. Преддиссоциация $D^1\Pi_u^+$ состояния молекулы H_2 фотонным ударом. Predissociation of the $D^1\Pi_u^+$ state of H_2 by photon impact / Mrugała Felicja // Mol. Phys.— 1988.— 65, № 2.— С. 377—389.— Англ.

Методом сильной связи исследованы резонансы в реакции фотодиссоциации $H_2(X^1\Sigma_g^+, v'=0, I'=0-2) + \hbar\omega \rightarrow H(1s) + H(2s, 2p)$, обусловленные преддиссоциацией $D^1\Pi_u^+$ состояния. При расчете использован метод Фано пертурбативного смешивания дискретного спектра и континуума и учтены все неадиабатич. взаимодействия между D состоянием и диссоциативными состояниями $B^1\Sigma_u^+$ и $B'^1\Sigma_u^+$. С использованием неэмпирич. результатов для потенц. кривых вычислены Λ -удвоения, параметры профиля и отношение ветвления $H(2s)/(H(2s)+H(2p))$. Разработан новый вычислительный метод для пертурбативного анализа профиля резонанса. По сравнению с предыдущими расчетами получено более удовлетворительное согласие с эксперим. данными, однако разница составляет $\sim 10\%$.

А. И. Воронин

М.А.

ср. 1989, № 6

H₂

М 30350

1988

1 2 Д41. Точный потенциал для основного состояния молекулы водорода. Accurate potential for the ground state of the hydrogen molecule / Pardo A., Poyato J. M. L., Camacho J. J., Martin E. // Spectrochim. acta A.— 1988.— 44, № 4.— С. 335—339.— Англ.

С использованием спектроскопич. констант и поправок высших порядков определен потенциал для основного электронного состояния молекулы водорода. Методом аппроксимант Паде получена его аналитич. параметризация. Самосогласованность этого потенциала проверяется путем решения радиального волн. ур-ния. Полученные с его помощью теоретич. значения параметров B_v , D_v и H_v , определяющих вращательную структуру каждого колебательного уровня молекулы, хорошо согласуются с их эксперим. величинами. Вычислена поправка к энергиям колебательных уровней ($\sim 1,45 \text{ см}^{-1}$), не зависящая от колебательного и вращательного квантовых чисел. Приведены уточненные значения энергий колебательно-вращательных уровней.

В. М. Стрельчenea

М.П.

ср. 1989, п 2

H₂

1988

Perry G.

I. Phys. D: At., Mol.
Clusters 1988, 10 (1),
93-8.

(fmr)

( Cer. O₂; III)

H₂

(Am-30350)

19-88

ADMEKUS KRUH.
DCH. COCM.

109: 82219; Accurate potential for the ground state of the hydrogen molecule. Pardo, A.; Poyato, J. M. L.; Camacho, J. J.; Martin, E. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *Spectrochim. Acta, Part A* 1988, 44A(4), 335-9 (Eng). Starting from the spectroscopic consts., an electronic potential for ground state H₂ is presented. Self-consistence was checked by numerical integration of the radial wave equation. The mean eigenvalue deviation is ~ 1 cm⁻¹. Comparison with the latest theor. work is considered. New revised spectroscopic consts. and vibrational quanta were calcd.



C.A. 1988, 109, N 10

He

(PM. 29782)

1988

Rijks W., Wormer P.E.S.

nonpuzzem,
meopem.
pacem

J. Chem. Phys., 1988, 88,
N 9, 5704-5714.

Correlated van der Waals
coefficients for dimers
consisting of He, Ne, H₂
and N₂.

H₂

(M-30744)

1988

5 Д64. Состояние $e^3\Sigma_u^+$ молекулы H₂. The $e^3\Sigma_u^+$ state of the H₂ molecule / Rychlewski Jacek // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 6.— С. 553—556.— Англ.

Для молекулы H₂ в диапазоне межъядерных расстояний 1,0÷12 ат. ед. рассчитана потенциальная кривая состояний $e^3\Sigma_u^+$. Расчет проводился с оптимизацией всех линейных и нелинейных параметров пробной ф-ции, явно зависящей от межъядерного расстояния. Приведены величины энергии диссоциации, электронной энергии и ее производной по межъядерному расстоянию. Численным интегрированием получены колебательные волн. ф-ции и энергии колебательных состояний молекул H₂ и D₂. Из сравнения с эксперим. данными в области равновесной геометр. конфигурации оценена величина ошибки сходимости потенц. энергии в приближении Борна—Оппенгеймера в 40 см⁻¹. Адиабатич. поправка к энергии диссоциации составила величину порядка 1,17 см⁻¹.

С. А. Богданова

М.А.

(4)

ср. 1989, № 5

H₂

DM 30744

1988

10 Б1030. Состояние $e^3\Sigma_u^+$ молекулы H₂. The $e^3\Sigma_u^+$ state of the H₂ molecule / Rychlewski J. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 151, № 6.— С. 553—556.— Англ.

В рамках приближения Борна-Оппенгеймера рассчитана потенциальная кривая состояния $e^3\Sigma_u^+$ молекул H₂ и D₂ в интервале межъядерных расстояний R от 1 до 12 ат. ед. Использован базис из 70 ф-ций, заданных как произведения степени межэлектронного расстояния и антисимметризованного произведения экспонент от эллипсоидальных координат электронов на степени этих координат. Параметры экспонент при каждом значении R оптимизованы. По найденным значениям E и (из теоремы вириала) dE/dR ф-ция $E(R)$ интерполирована полиномами пятой степени и с нею численно решено ядерное уравнение для низших 10-ти колебат. уровней H₂ и D₂. При сопоставлении вычисленных колебат. энергий H₂ и D₂ с эксперим. полученны оценки ошибки E вблизи R_e (40 см⁻¹) и адиабатич. поправок для низшего уровня (42 см⁻¹ для H₂ и 21 см⁻¹ для D₂). В. Ф. Хрустов

М.А.

(1) 20

X. 1989, N 10

H_2

1988

④ 18 Б1268. Измерения излучательных времен жизни молекулы H_2 . Radiative lifetime measurements for H_2 molecule. Sánchez J. A., Campos J. «J. phys.», 1988, 49, № 3, 445—449 (англ.; рез. фр.)

Методом запаздывающих совпадений измерены излучат. времена жизни (τ в нс) ряда синглетных и триплетных электронных состояний молекулы H_2 ; состояние $G_1\Sigma_g^+$, $V=0$, ($\lambda=462,8$ нм), $J=1-\tau=23,7$; (463,45 нм), $J=2,3-\tau=25,0$; $V=1$ (533,62 нм), $J=3,4,5-\tau=25$; состояние $I^1\Pi_g$ (в основном Π^+ -компоненты) $V=0$ (458,0 нм), $J=1,2,3-\tau=23,3$; (457,59 нм), $J=3-\tau=25,3$; $V=1$ (418,22 нм), $J=1,4-\tau=20,9$; (417,13 нм, Π^- -компонента), $J=4-r=21,5$; $V=2$ (478,94 нм) $J=1,3-r=33,0$; (406,24 нм), $J=4,5-\tau=28,9$; состояние $K^1\Sigma_g^+$, $V=0$ (466,14 нм), $J=1,2,3-\tau=56,3$; (609,50 нм), $J=3-\tau=56,4$; $V=1$ (503,98 нм), $J=1,2,3-\tau=61,9$; $V=2$ (407,88 нм), $J=1-\tau=34,5$; (408,78 нм); $J=3-\tau=39,4$; состояние $N^1\Sigma_g^+$, $V=1$ (505,50 нм), $J=1-\tau=40,4$; состояние $J_1\Delta_g^-$, $V=0$ (450,19 нм), $J=2-\tau=34,3$; состояние $P^1\Sigma_g^+$, $V=0$ (427,90 нм), $J=1,5-$

М.А.

Х. 1988, 19, № 18

$\tau=51,3$; состояние U , $V=1$ (465,40 нм), $J=3,5 - \tau=$
 $=110$; состояние $d^3\Pi_u^-$, $V=0$ (601,83 нм), $J=1 -$
 $\tau=30,0$; $V=1$ (612,18 нм), $J=1 - \tau=26,8$; $V=2$
(622,48 нм), $J=1 - \tau=22,3$; состояние U , $V=1$
(571,34 нм), $J=2 - \tau=53,8$; состояние $J^3\Delta_g^-$, $V=0$
(572,35 нм), $J=2 - \tau=15,3$. В скобках приведены
длины волн на которых проводились измерения. Резуль-

таты сопоставлены со значениями τ , полученными из
измерения эффекта Хенля, и с данными теорет. расче-
тов. В. М. Ковба



H₂

1988

(7)

108: 158317s Radiative lifetime measurements for the hydrogen (H₂) molecule. Sanchez, J. A.; Campos, J. (Fac. Cienc. Fis., Univ. Complutense Madrid, Madrid, Spain 28040). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1988, 49(3), 445-9 (Eng). Radiative lifetime for 17 vibrational levels corresponding to 7 singlet and 3 triplet electronic states were measured by using a delayed-coincidence method. Measurements were reported of 4 H₂ levels with lifetimes 34-110 ns.

C.A. 1988, 108, N 18

H₂

М.А.

OM 31754

(+2) ☒

ср. 1989, N 9

9 Д65. Состояния $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ и $D^1\Pi_u$ молекулы водорода. Неэмпирические расчеты колебательно-вращательного взаимодействия в H_2 , HD и D_2 . The $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, and $D^1\Pi_u$ states of hydrogen. *Ab initio* calculation of rovibronic coupling in H_2 , HD , and D_2 / Senn P., Quadrelli P., Dressler K. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 12.— С. 7401—7427.— Англ.

Выполнены расчеты колебательно-вращательных уровней для четырех взаимодействующих электронных состояний изотопомеров молекулы водорода. В расчете использованы неэмпирические адиабатич. потенц. кривые H_2 , адиабатич. поправки и ф-ции неадиабатич. взаимодействия, полученные ранее Вольневичем и Дресслером. Для каждого из значений вращательного квантового числа $j=1-6$ численно решена система связанных колебательных ур-ний с учетом как гомогенных ($\Sigma^+ - \Sigma^+$ и $\Pi - \Pi$), так и гетерогенных ($\Sigma^+ - \Pi$) взаимодействий. Полученные энергетич. уровни хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными и позволяют в ряде случаев провести переотнесение спектров. Отмечено, что в проведенных расчетах не учитывались неадиабатич. возмущения, вызванные состояниями ридберговых серий $pr\sigma^1\Sigma_u^+$ и $pr\pi^1\Pi_u$ для

$n \geq 4$ и ионизационным континуумом, что было сделано в расчетах колебательно-вращательной структуры спектра в рамках многоканальной теории квантового дефекта (Jungen C. H., Atabek O. // J. Chem. Phys.— 1977.— 66.— С. 5584) А. И. Дементьев

разл

H₂

DM 31754

1988

14 Б1081. Состояния $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ и $D^1\Pi_u$ молекулы водорода. Неэмпирический расчет колебательно-вращательных взаимодействий в H_2 , HD и D_2 . The $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ and $D^1\Pi_u$ states of hydrogen. Ab initio calculation of rovibronic coupling in H_2 , HD , and D_2 / Senn P., Quadrelli P., Dressler K. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 12.— С. 7401—7427.— Англ.

Неэмпирический расчет колебательно-вращат. структуры четырех электронных состояний B , B' , C и D молекул H_2 , HD , D_2 выполнен с учетом неадиабатич. взаимодействий. Для расчета использованы потенциальные кривые с учетом адиабатич. поправок, рассчитанные вплоть до диссоциац. предела. Неадиабатич. система уравнений для определения колебательно-вращат. уровней энергии решена численно для различных значений вращат. квантового числа I от 0 до 6. Результаты хорошо согласуются с эксперим. данными. Ошибки в оценке высших колебат. уровней не превышают 2 см^{-1} и объяснены неучетом неадиабатич. взаимодействий с высшими ридберговыми электронными состояниями.

Б. И. Жилинский

М.П.

72

X. 1989, N 14

H₂

OM 31754

1988

110: 65833h The B¹Σ_u⁺, B'¹Σ_u⁺, C¹Π_u, and D¹Π_u states of hydrogen. Ab initio calculation of rovibronic coupling in molecular hydrogen, hydrogen deuteride, and molecular deuterium. Senn, P.; Quadrelli, P.; Dressler, K. (Phys. Chem. Lab., ETH-Zent., CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(12), 7401-27 (Eng). The nonadiabatic rovibronic structures of the B, B', C, and D states of H₂, HD, and D₂ were calcd. up to the common dissociation limit of the first 3 of these electronic states using the ab initio adiabatic potential curves and nonadiabatic coupling functions published recently by L. Wolniewicz and D. (1988). The homogeneous (Σ⁺ - Π⁺) interactions are treated simultaneously by numerical solution of the coupled vibrational equations for each J value from J = 0 to J = 6. The calculated nonadiabatic energy shifts, which show strong v- and J-dependent variations within each electronic state and which spread over approx. ± 50 cm⁻¹ for J = 6 in H₂, yield rovibronic structures in very good agreement with spectroscopic term values. A no. of published spectroscopic assignments, including states close to the dissociation limit, must be reevaluated in the light of this calculation. The remaining energy errors are nuclear-mass dependent and are attributed to the neglected nonadiabatic interactions with the higher members of the 1Σ_u⁺ and 1Π Rydberg series. The convergence errors of the Born-Oppenheimer energies of all 4 electronic states treated here appear to be at most 2 cm⁻¹ for the highest bound vibrational states and <1 cm⁻¹ for the lowest ones.

B¹Σ_u⁺, B'¹Σ_u⁺
C¹Π_u, D¹Π_u

ab initio calculation
rem, corrected by
Y. Roth.

42

C.A. 1989, 110,
N 8

HD, D₂

H₂

1988

109: 118540y Laser spectroscopy of ($v = 0, R = 1$)10F and ($v = 0, R = 1$)10G states of hydrogen: a test of the polarization model. Sturru, W. G.; Hessels, E. A.; Arcuni, P. W.; Lundeen, S. R. (Dep. Phys., Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN 46556 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1988, 38(1), 135-51 (Eng). Rydberg states of H₂ consisting of a 10F or 10G electron bound to the $v = 0, R = 1$ state of H₂⁺ are studied using Doppler-tuned laser spectroscopy of Rydberg-Rydberg transitions. The positions of all such states are measured to a precision of better than 0.01 cm⁻¹ and are compared with the predictions of the polarization model. The polarization model is derived from first principles. Nonadiabatic corrections to the dipole polarization energies, calcd. for the first time, are expressible in terms of the S-3-moment functions of H₂⁺. Higher-order adiabatic polarization energies are estd. from calcd. higher-order H₂⁺ polarizabilities.

лазер спектро
скопировано

С.А. 1988, 109, N14

H₂

1988

(Pugren-cocm)

111: 104712k Spectroscopy of high angular momentum Rydberg states of molecular hydrogen and the polarization model. Sturru, William Gregory (Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN USA). 1988. 273 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8901494. From *Diss. Abstr. Int. B* 1989, 49(10), 4372.

C.A. 1989, 111, N/2

№2

О.М. ЗИГ

1988

5 Л125. Микроволновая спектроскопия ридберговских состояний H_2 с высокими значениями L . Состояния (0,1) 10 G, H, I и K. Microwave spectroscopy of high- L H_2 Rydberg states. The (0,1) 10 G, H, I and K states / Sturuss W. G., Hessels E. A., Arcuni P. W., Lundeen S. R. // Phys. Rev. Lett.— 1988.— 61, № 20.— С. 2320—2323.— Англ.

С применением техники двойного микроволн.-оптич. резонанса на пучке H_2 изучена тонкая структура системы ридберговских уровней состояний $n=10$, $L=4\div 7$ (L — орбитальный угловой момент), связанных с состоянием ($v=0$, $R=1$) иона H_2^+ (v — характеризует колебат. состояние остова, а R — вращательный угловой момент остова). Измеренные положения уровней согласуются с результатами проведенных расчетов, если полагать, что электрический квадрупольный момент состояния (0,1) иона H_2^+ равен $1,6432(2) e a_0^2$, что на 0,04 (1) % больше, чем наиболее точное значение, приведенное в литературе. Отмечается, что это разли-

М.А.

ф. 1989, №5

чие является существенным и, вероятно, не может
быть объяснено пренебрежением релятив. эффектами в
расчетах. В. А. Морозов

ОПТИКА
СПЕКТ

H₂

1988

Sundholm D.

Chem. Phys. Lett. 1988,
149, N3, - C. 257-256.

M.N.

(cen. LiH; III)

H_2 (aq)

1989

' 110: 124171r The rotational Raman spectrum of molecular hydrogen in water. Taylor, David G., III; Strauss, Herbert L. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(2), 768-72 (Eng). The 1st 4 rotational Raman lines of H_2 dissolved in water were obsd. The lines broaden considerably, but do not shift in position, compared to the corresponding lines of gas phase H_2 . The breadth of the lines varies with J and with the change from H_2O to D_2O . The H_2 rotational motion is thought to interact with the librational motion of the water mols.

(CKP)

C.A. 1989, 110, N 14

H_2

от. 29 417 1988

7 15 Б1058. Гауссовы функции в расчетах методом Хиллерааса — КВ. I. Энергии основных состояний H_2 , HeH^+ и H_3^+ . Gaussian functions in hylleraas-Cl calculations. I. Ground state energies for H_2 , HeH , and H_3^+ . Urdaneta C., Largo-Cabrerizo A., Lievin J., Lie G. C., Clementi E. «Chem. Phys.», 1988, 88, № 3, 2091—2093 (англ.)

Энергии основных электронных состояний двухэлектронных молекул H_2 , HeH^+ и H_3^+ рассчитаны методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с явной зависимостью конфигурац. ф-ций состояния от межэлектронного расстояния (метод Хиллерааса — КВ) в базисе декартовых гауссовых ф-ций. Использован предложенный авторами метод вычисления возникающих в методе Хиллерааса — КВ двухэлектронных многоцентровых интегралов от гауссовых ф-ций. Исследована зависимость энергий от размерности и состава базиса. В случае H_2 получена энергия, лишь на $1,8 \text{ см}^{-1}$ превышающая точное значение. Для H_3^+ получена лучшая в настоящее время оценка энергии: $-1,343500$ ат. ед. (геометрич. конфигурация правильного треугольника со стороной $1,6405$ ат. ед.).

А. А. Сафонов

М.П.

Х. 1988, 19, N 15

H₂

DM. 29417 1988

9 Д113. Гауссовы функции в расчетах методом КВ хиллераасовского типа. I. Энергии основных состояний H₂, HeH⁺ и H₃⁺. Gaussian functions in Hylleraas-CI calculations. I. Ground state energies for H₂, HeH⁺, and H₃⁺. Urdaneta C., Largo-Carbreirizo A., Lievin J., Lie G. C., Clementi E. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 3, 2091—2093 (англ.)

Для исследования эффективности метода конфигурац. взаимодействия хиллераасовского типа (КВ-Х), который отличается от канонич. метода КВ тем, что каждая конфигурация умножается на межэлектронное расстояние r_{12} , проведены расчеты энергии основных электронных состояний систем H₂, HeH⁺ и H₃⁺. Расчеты показывают, что метод КВ-Х позволяет с высокой точностью учесть корреляционные поправки даже при использовании ограниченных базисов АО. Напр., для H₂ расчет этим методом в базисе гауссовых ф-ций [13s], не включающем поляризационных орбиталей, позволяет учесть 86,2% корреляционной энергии, а в базисе [13s2p1d] метод ВК-Х учитывает 99,6% корреляционной энергии.

А. И. Дементьев

М.П.

(X) (42)

ср. 1988, 18, 29

H₂

1988

18 Б1272. Диссоциация двукратно возбужденных состояний H₂ на ридберговские атомы. Dissociation of doubly excited states of H₂ into rydberg atoms. Verschuur J. W. J., Noordam L. D., Bonnie J. H. M., van Linden van den Heuvell H. B. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 146, № 3—4, 283—290 (англ.)

Исследована диссоциация молек. водорода в четных и нечетных двукратно возбужденных электронных Q₁-состояниях с остовом (2pσ_u) на атомы H(1s) и H(nl). Использовался метод резонансно усиленной многофотонной ионизации с регистрацией получающихся при диссоциации возбужденных фрагментов путем их ионизации и измерения энергии образующихся электронов. Возбуждение осуществлялось импульсным перестраиваемым лазером на красителе с удвоением частоты (280—330 нм, ширина полосы возбуждения ~2 см⁻¹) через промежут. состояние (1sσ_g2pσ_u)B¹Σ_u+ (v', J'=2) (трехфотонное поглощение) с последующими дис-

М.П.

Х. 1988, 19, № 18

социативным возбуждением и ионизацией фрагментов в результате поглощения еще одного или двух фотонов. Впервые наблюдались Q_1 -состояния со всеми главными квантовыми числами, диссоциация к-рых дает полные ридберговские серии атомных фрагментов от $n=3$ до $n \rightarrow \infty$. В. М. Ковба



1988

10 Д69. Состояния $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ и $D^1\Pi_u$ молекулы H_2 . Матричные элементы для операторов углового и радиального неадиабатического взаимодействия и улучшенные неэмпирические кривые потенциальной энергии. The $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, and $D^1\Pi_u$ states of the H_2 molecule. Matrix elements of angular and radial nonadiabatic coupling and improved ab initio potential energy curves. Wolniewicz L., Dressler K. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 6, 3861—3870 (англ.)

Рассчитаны более точные, чем имелись ранее, волн. ф-ции и потенц. кривые электронных состояний $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ и $D^1\Pi_u$ молекулы H_2 . Полученные волн. ф-ции использованы для расчета матричных элементов неадиабатич. взаимодействия между рассмотренными состояниями в районе изменения межъядерного расстояния 0,75—8 ат. ед. Построенные адиабатич. потенц. кривые позволяют получить колебательные частоты для всех 4 электронных состояний ($v=0$) с ошибкой, не превышающей $2,2 \text{ см}^{-1}$. А. И. Дементьев

фз, 1988, 18, N 10

1988

H₂

18 Б1031. Состояния $B^1\dot{\Sigma}_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ и $D^1\Pi_u$ молекулы H_2 . Матричные элементы углового и радиального неадиабатического взаимодействия и уточненные неэмпирические кривые потенциальной энергии. The $B^1\dot{\Sigma}_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, and $D^1\Pi_u$ states of the H_2 molecule. Matrix elements of angular and radial nonadiabatic coupling and improved ab initio potential energy curves. Wolniewicz L., Dressler K. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 6, 3861—3870 (англ.)

M. N.

В связи с высокой чувствительностью матричных элементов неадиабатич. взаимодействия к точности и ортогональности волновых ф-ций для описания состояний $B^1\dot{\Sigma}_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ и Π_u молекулы H_2 использованы более гибкие по сравнению с предшествовавшими расчетами волновые ф-ции, представленные в виде 133-членных (для состояний B и B') и 150-членных (для состояний C и D) разложений по эллипсоидальным координатам электронов и межэлектронному расстоянию. В широком интервале межъядерных расстояний (от 1 до 30 ат. ед.) рассчитаны ф-ции радиального и углово-

X. 1988, 19, № 18

го неадиабатич. взаимодействия. Наряду с борн-оппенгеймеровскими потенциальными кривыми состояний B , B' , C и D , приведены потенциальные кривые трех выше лежащих состояний ${}^1\Sigma_u^+$; обсуждены их псевдопересечения. При равновесных расстояниях полученные энергии ниже рассчитанных ранее на 0,26, 7,80, 0,60 и 5,72 см^{-1} для состояний B , B' , C и D , соотв. С учетом адиабатич. поправки рассчитаны колебательные уровни; отклонения энергий нулевых уровней от эксперим. данных составили от 0,6 до 2,2 см^{-1} . А. А. Сафонов



H₂

1988

модем-
факс
бюро
сочин.

109: 43604m The B $1\Sigma_u^+$, B' $1\Sigma_u^+$, C $3\Pi_u$, and D $3\Pi_u$ states of molecular hydrogen. Matrix elements of angular and radial nonadiabatic coupling and improved ab initio potential energy curves. Wolniewicz, L.; Dressler, K. (Phys. Chem. Lab., ETH-Zent., CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(6), 3861-70 (Eng). The B, B', C, and D states of H₂ are represented over wide ranges of the internuclear distance R by considerably more flexible electronic wave functions than the ones previously employed. These are used to compute the nonadiabatic coupling matrix elements for the homogeneous B'-B and D-C and the heterogeneous C-B, C-B', D-B, and D-B' interactions over a wide range of R values. The adiabatic potential curves obtained from the new electronic wave functions yield vibrational term values which, for the $v = 0$ levels, lie within 0.6 to 2.2 cm⁻¹ of the exptl. ones in these four electronic states of H₂. After subtracting the nuclear-mass-dependent contributions to these ab initio errors, which can be estd. by comparing H₂ with D₂, the remaining electronic errors near the equil. internuclear distances of these electronic states are approx. 0.3 cm⁻¹ (C and D state) and 1 cm⁻¹ (B and B' state). In the C, D, and B' states this represents improvements by 0.7, 6, and 8 cm⁻¹, resp., over the previous ab initio values.

C.A. 1988, 109, N 6

H₂

[Om. 29004]

1988

Zhu Z.H., Wang F.,

Xu Z.R.,

номер.

книж.

основ.

состав.

теорет.

расчет

J. Mol. Struct. Theochem.
1988, 164, N 1-2, 165-173.

H₂

1989

' 111: 204430k Wavelengths, oscillator strengths and transition probabilities of the hydrogen molecule for Lyman and Werner systems. Abrall, H.; Roueff, E. (Sect. Meudon, Obs. Paris, F-92195 Meudon, Fr.). *Astron. Astrophys., Suppl. Ser.* 1989, 79(3), 313-28 (Eng). Wavelengths, oscillator strengths and transition probabilities were calcd. for the Lyman and Werner band systems of the H₂ mol. Those calcns. are performed for the first 15 rotational excited levels by including rotational coupling effects between the B and C electronic states. The expected accuracy should be better than 1 reciprocal centimeter for the wavenumbers.

cremp

C.A. 1989, 111, N22

H₂

1989

А 12 Б1038. Очень точные расчеты нейтральных двухатомных молекул и их анионов с численными орбиталями. Very accurate calculations for diatomic, neutral and anionic systems with numerical orbitals / Adamowicz L. // Numer. Determin. Electron. Struct. Atoms, Diatom. and Polyatom. Mol.: Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Versailles, 17—22 Apr., 1988.— Wordrecht etc., 1989.— С. 177—200.— Англ.

Описана методика и представлены результаты расчета энергий низколежащих электронных состояний (ЭНЛЭС) двухатомных молекул (H₂, HF, LiH, BeO, NaF, LiCl, NaCl) и их анионов (кроме H₂ и HF), по точности не уступающего лучшим лит. данным. В подсистемах базисных орбиталей (БО), заданных в эллипсоидальных координатах ($1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta \leq 1$, $0 \leq \varphi < 2\pi$) как $\sum_e \chi_e(\xi) p_e^m(\eta) \exp(im\varphi)$ (где p_e^m — присоединенные ф-ции Лежандра), $\chi_e(\xi)$ определяют при численном решении ур-ний метода МК ССП для выделенных электронных кластеров ($\chi_e(\xi)$ для остальных

H₂

X. 1990, N 12

электронов зафиксированы на уровне приближения ССП). Из объединения подсистем БО после их ортогонализации исключают орбитали, связанные с наименьшими собственными значениями матрицы перекрывания. В пространстве, натянутом на оставшиеся БО, м. б. выделено для расчета ЭНЛЭС подпространство, на к-ром оптимальны оценки ф-ционала Хиллерааса. После преобразований БО приводят к указанному выше виду и заново пересчитывают интегралы. Оценки ЭНЛЭС получены методами многочастичной теории возмущений (от 2-го до 4-го порядка) и связанных кластеров (до 3-го порядка). Рассмотрены влияние описанной группировки базиса на корреляц. поправки, а также — роль угловой корреляции в поправке 2-го порядка. Представлена и продемонстрирована на перечисленных молекулах методика сбалансир. учета корреляции в молекуле и анионе, обеспечивающая получение точных оценок сродства к электрону. В. Ф. Хрустов

H_2

1989

111: 14561f Reinvestigation of the Raman spectra of dihydrogen trapped in rare gas solids. 1. Molecular hydrogen, hydrogen deuteride, and molecular deuterium monomeric species. Alikhani, M. B.; Silvi, B.; Perchard, J. P.; Chandrasekharan, V. (Lab. Spectrochim. Mol., Univ. Pierre et Marie Curie, 75230 Paris, 05 Fr.). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(10), 5221-31 (Eng). The vibration-rotation and pure rotational Raman spectra of H_2 , HD, and D_2 trapped in Ar, Kr, and Xe matrixes were recorded at 9 K. The frequencies which were measured within an accuracy of 0.3 cm^{-1} are compared to the results of recent calcs. Except for the $S_0(0)$ line of HD the agreement between obsd. and calcd. matrix shifts is satisfactory. The anomalous blue shift obsd. for the $S_0(0)$ line of HD is well interpreted within the rotation translation coupling (RTC) framework.

(CKP & Ar)

(2) $\boxtimes$ HD, D_2 C.A. 1989, 111, N2

H₂

1989

✓ 112: 128142w Observation of stimulated hyper-Raman scattering in hydrogen. Czarnetzki, U.; Wojak, U.; Doebele, H. F. (Inst. Laser-Plasmaphys., Univ. Gesamthochsch. Essen, D-4300 Essen, 1 Fed. Rep. Ger.). *Phys. Rev. A* 1989, 40(10), 6120-3 (Eng). Along with 2-photon excitation of H₂ (X → EF) stimulated electronic hyper-Raman scattering (SEHRS) is obsd. on 4 of 7 2-photon resonances. The tunable Stokes transitions to B-state levels are in the range 750-840 nm. This is the 1st observation of SEHRS with a mol. In addn., an unassigned stimulated line, red shifted by 26.7 cm⁻¹ relative to the EF ($v' = 6$) → B($v'' = 1$) P(2) line, is obsd. This transition entails 4 addnl. vacuum UV lines, blueshifted by the same amt. relative to tabulated B → X transitions.

CRKMP

C.A. 1990, 112, N14

H_2

1989

5 Д139. Функции Гаусса в расчетах методом конфигурационного взаимодействия Хиллерааса. II. Потенциальные кривые состояний $b^3\Sigma_u^+$ и $e^3\Sigma_u^+$ молекулы водорода. Gaussian functions in Hylleraas configuration interaction calculations. II. Potential curves for the $b^3\Sigma_u^+$ and the $e^3\Sigma_u^+$ states of hydrogen / Frye D., Lie G. C., Clementi E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 4.— С. 2366—2368.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия Хиллерааса, в котором каждая конфигурационная ф-ция состояния умножена на межэлектронное расстояние r_{ij} (см. ч. I. Urdaneta C. et al. // J. Chem. Phys.— 1988.— 88.— С. 2091), рассчитаны потенц. кривые низшего разлетного состояния $b^3\Sigma_u^+$ и связанного состояния $e^3\Sigma_u^+$ молекулы H_2 . Базис включал набор $14s7p1d$ декартовых гауссовых ф-ций. Расчет проводился в 15 точках в районе изменения межъядерного расстояния R от 1 до 12 ат. ед. Сравнение полученных полных энергий H_2 в состоянии $b^3\Sigma_u^+$ с данными расчетов Колоса и Вольневича показало, что при малых значениях R использованный

М.П.

ф. 1990, №5

подход дает более низкие значения полной энергии и
в отличие от методики Колоса и Вольневича может
быть использован для расчета многоатомных молекул.
А. И. Дементьев



H_2

1989

7 Б1013. Гауссовы функции в расчетах методом Хиллерааса — конфигурационного взаимодействия. II. Потенциальные кривые состояний $b^3\Sigma_u^+$ и $e^3\Sigma_u^+$ водорода. Gaussian functions in Hylleraas—configuration interaction calculations. II. Potential curves for the $b^3\Sigma_u^+$ and the $e^3\Sigma_u^+$ states of hydrogen / Frye D., Lie G. C., Glementi E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 4.— С. 2366—2368.— Англ.

Методом Хиллерааса — конфигурац. взаимодействия в базисе гауссовых ф-ций рассчитаны потенциальные кривые состояний $b^3\Sigma_u^+$ и $e^3\Sigma_u^+$ молекулы H_2 в интервале межъядерных расстояний от 1,0 до 12,0 ат. ед. Волновые ф-ции представляли собой линейные комбинации конфигурац. ф-ций состояния (КФС) и КФС, умноженных на межэлектронное расстояние r_{12} . КФС построены из МО метода ССП в геометрич. базисе гауссовых ф-ций (14s7p1d), параметры к-рых оптимизиро-

М.П.

Х. 1990, № 7

ваны в каждой точке потенциальной кривой. Для состояния $b^3\Sigma_u^+$ при малых расстояниях ($R \leq 2,5$ ат. ед.) получены более низкие энергии, чем в расчетах Колоса и Волниевича, использовавших разложение в эллипсоидальных координатах. Потенциальная кривая состояния $e^3\Sigma_u^+$ согласуется с результатами предшествовавших расчетов стандартным методом конфигурац. взаимодействия.

А. А. Сафонов



H_2

1989

5 Д140. Функции Гаусса в расчетах методом конфигурационного взаимодействия Хиллерааса. III. Волновые функции для состояния $X^1\Sigma_g^+$ молекулы водорода. Gaussian functions in Hylleraas configuration interaction calculations. III. Wave functions for the $X^1\Sigma_g^+$ state of hydrogen / Frye D., Lie G. C., Clementi E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 4.— С. 2369—2372.— Англ.

Метод полного конфигурац. взаимодействия Хиллерааса использован для расчета потенц. кривой основного электронного состояния молекулы водорода в базисе гауссовых ф-ций $13s7p3d$. В рассчитанных точках потенциальной кривой полная энергия H_2 получена практически с той же точностью, что и в расчетах Колоса и Вольневича, выполненных вариационным методом в базисе ф-ций Джеймса—Кулиджа (отличие составило не более $0,3 \text{ см}^{-1}$). Выполнен также анализ точности аппроксимации волн. ф-ции для нескольких сечений, перпендикулярных оси симметрии молекулы. Показано, что преимущество метода конфигурац. взаимодействия Хиллерааса по сравнению с канонич. методом КВ связано с лучшим описанием электронных кулоновских дырок.

А. И. Дементьев

М.П.

ср. 1990, № 5

H₂

1989

7 Б1014. Гауссовы функции в расчетах методом Хиллерааса — конфигурационного взаимодействия. III. Волновые функции для состояния $X^1\Sigma_g^+$ водорода. Gaussian functions in Hylleraas—configuration interaction calculations. III. Wave functions for the $X^1\Sigma_g^+$ state of hydrogen / Frye D., Lie G. C., Clementi E. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 4.— С. 2369—2372.— Англ.

Методом Хиллерааса — конфигурац. взаимодействия в базисе гауссовых ф-ций рассчитана энергия основного состояния молекулы H₂ при межъядерных расстояниях 1,0; 1,4011; 4,0 и 8,0 ат. ед. Использованы различные геометр. наборы гауссовых ф-ций от (13s7p1d) до (13s7p3d1f) с оптимизированными параметрами. В случае наибольшего базиса отклонение энергии от результатов наиболее точных расчетов Колоса с использованием разложения в эллипсоидальных координатах со-

М.Н.

Х. 1990, № 7

ставило $0,3 \text{ см}^{-1}$ при равновесном межъядерном расстоянии. Проанализированы веса различных членов разложений волновой ф-ции. Сопоставлен ряд сечений для волновых ф-ций метода ССП, стандартного метода конфигурац. взаимодействия (КВ) и метода Хиллерааса — КВ. Показано, что волновые ф-ции метода Хиллерааса — КВ характеризуются несколько большей глубиной кулоновской дырки вокруг электрона. Часть II см. пред. реферат.

А. А. Сафонов



H₂

1989

111: 181150c Gaussian functions in Hylleraas-configuration interaction calculations. III. Wave functions for the $X^1\Sigma_g^+$ state of hydrogen. Frye, D.; Lie, G. C.; Clementi, E. (IBM Corp., Kingston, NY 12401 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(4), 2369-72 (Eng). The Hylleraas-CI method with Cartesian Gaussian basis functions of various sizes was used to calc. the ground-state energies and wave functions for the hydrogen mol. at internuclear distances of 1.0, 1.4011, 4.0, and 8.0 bohrs. The best basis sets reproduce energies obtained with the confocal elliptical coordinates by W. Kolos, et al., (1986) to within 0.3 cm⁻¹. A few cross sections of the wave functions are presented graphically, showing clearly that the improvement of Hylleraas-CI over a conventional CI is due to the presence of a slightly deeper Coulomb hole around the electrons.

X¹ Σ_g^+ , K. M. M. X
p. 111

C.A. 1989, 111, N20

H₂

1989

' 112: 86879j Infrared fluorescence of interstellar molecular hydrogen. Hasegawa, Tetsuo (Sci. Coll., Tokyo Univ., Tokyo, Japan). *Tenmon Geppo* 1989, 82(9), 224-9 (Japan). A review with 6 refs. is given on interstellar H₂. discovery of IR fluorescence, and the meaning of ortho-para H₂.

UK-checking

C.A. 1990, 112, N10

H₂

1989

111: 84258m Spin statistics: an error in Landau and Lifschitz' Quantum Mechanics. Jonas, David M. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(10), 5563-5 (Eng). In this book a formula is given for direct calcn. of rovibronic statistical wts. If it were correct, this formula would dramatically reduce the effort necessary to calc. statistical wts. in large mols. Unfortunately, due to a common misapplication of the Pauli principle, the formula derived is incorrect, as are the subsequent examples and problem solns. The correct formula derived in this paper is used to calc. statistical wts. for H₂, C₂H₄, and NH₃ which agree with those of G. H. Herzberg (1950), C. H. Townes and A. L. Schawlow (1975), and P. R. Bunker (1979).

cmam. rec
Ken. Sp. yrob
Ken

(72) ~~12~~ C₂H₄

● NH₃

C.A. 1989, 111, N10

1989

H₂

4 Д119. Вариационный расчет связанных состояний мезомолекул с орбитальным моментом $J=1$ и пространственной четностью $\lambda=+1$. Variational calculation of mesic molecule bound states with orbital momentum $J=1$ and spatial parity $\lambda=+1$ / Korobov V. I., Vinitzky S. I. // Препр. Объед. ин-т ядер. исслед., Дубна.— 1989.— № Е4—89—665.— С. 1—3.— Англ.; рез. рус.

Выполнен вариационный расчет энергетич. уровней шести связанных состояний мезомолекул изотопов водорода с орбитальным моментом $J=1$ и пространственной четностью $\lambda=+1$. В расчетах использовалось около 900 базисных ф-ций, что позволило определить уровни энергии связи с точностью ~ 0.002 эВ. Автореферат

М.А.

ф. 1990, № 4

H₂

1989

112: 86935z Radiative transition probabilities of $a^3\Sigma_g^+ v \rightarrow b^3\Sigma_u^+$ transitions in hydrogen isotopes. Lavrov, B. P.; Loginov, A. V.; Prosikhin, V. P. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1989, 67(5), 1220-1 (Russ). In an adiabatic approxn., a calcn. was made of the spectral distributions of the probability d. $\Lambda_\lambda(v)$ of spontaneous $a^3\Sigma_g^+, v \rightarrow b^3\Sigma_u^+$ radiative transitions of the H isotopes H₂ ($v = 0-9$), HD ($v = 0-7$), D₂ ($v = 0-12$), and T₂ ($v = 0-14$) in the wavelength range of $\lambda = 160-500$ nm with a pitch of 5 nm.

12.01.90
 12.01.90. 12
 12.01.90

③ H₂,
 D₂, T₂

C.A. 1990, 112, N10

H₂

1989

112: 87087m Saturation effects in coherent anti-Stokes Raman scattering spectroscopy of hydrogen. Lucht, Robert P.; Farrow, Roger L. (Combust. Res. Facil., Sandia Natl. Lab., Livermore, CA 94551 USA). *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* 1989, 6(12), 2313-25 (Eng). Satn. of the CARS spectra of the Q(1) line of the hydrogen (1,0) vibrational transition was investigated exptl. by using high-resoln. lasers and theor. by solving the time-dependent d. matrix equations. The satn. behavior of hydrogen is complicated by the large Doppler width of the resonance and the high rate of velocity-changing collisions relative to dephasing collisions. Exptl., CARS line shapes and satn. curves were measured in pure H₂ at pressures of 100 and 3050 Torr. Surprisingly, the measured satn. intensity was less at 3050 torr than at 100 torr. The time-dependent d. matrix equations were numerically integrated to obtain CARS satn. curves and line shapes. Excellent agreement between calcd. and exptl. line shapes was obtained at both 100 and 3050 torr, and the predicted satn. intensity was less at 3050 Torr than at 100 torr. Based on the good agreement between theory and expt. obtained at 100 and 3050 Torr, the theor. results were extended over a much wider pressure range, from 0.1 to 100,000 torr. Below 1 torr the satn. behavior is

CARMS

C.A. 1990, 112, N10

independent of pressure because collision times are long compared with times assocd. with laser excitation of the resonance, and the mol. response is completely transient. Between 1 and a few hundred torr the satn. intensity increases as the rate of velocity-changing collisions increases. Above a few hundred torr, however, the satn. intensity begins to decrease because the high rate of velocity-changing collisions ensures that all mols. couple effectively with the Raman-pumping lasers. Calcns. show a min. in satn. intensity at 2000 torr. For even higher pressures, satn. is controlled by dephasing collisions, and the satn. intensity increases rapidly with pressure.



Р2

011 31870

1989

22 Б1021. Комбинированные базисные наборы со связевыми и поляризационными функциями для точного неэмпирического расчета энергий диссоциации молекул AH_n ($A=Li$ до F). Combined bond polarization function basis sets for accurate ab initio calculation of the dissociation energies of AH_n molecules ($A=Li$ to F) / Martin J. M. L., François J. P., Gijbels R. // J. Comput. Chem.— 1989.— 10, № 2.— С. 152—162.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с учетом корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка вычислены геометрич. структура и энергия диссоциации молекул H_2 , LiH , BeH , BH_2 , CH_4 , NH_3 , H_2O , HF в основном электронном состоянии. В расчетах использовались предложенные авторами смешанные базисные наборы типа 6—31 ГФ с добавлением как поляризац. ф-ций (d -типа для центр. атомов 2-го периода, p -типа для H), так и ф-ций sp -типа, центрированных на связях. Полученные результаты близки к рассчитанным в

М.П.



(47)

X. 1989, N 22

широких базисах с несколькими наборами поляризац. ф-ций d - и f -типа; в то же время расчеты в предложенных комбинированных базисах требуют значительно меньших затрат времени ЭВМ (в 4—20 раз). Найдено, что наилучшие результаты получаются без учета ошибок суперпозиции базисных наборов по методу Бойса—Бернарди.

В. К. Михалко



H₂

1989

110: 162617y Measurement of high Rydberg states and the ionization potential of hydrogen. McCormack, E.; Gilligan, J. M.; Cornaggia, C.; Eyler, E. E. (Dep. Phys., Yale Univ., New Haven, CT 06511 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1989, 39(4), 2260-3 (Eng). Numerous transitions were measured from the *E,F* state of H₂ to the singlet np Rydberg states with an accuracy of 0.01 cm⁻¹. The data have been analyzed to obtain values for the ionization potential of H₂ relative to the *v* = 0, *N* = 0 and 1 levels of the *E,F* state. By combining these results with previous measurements of the *E,F* state, a value of 124,417.524 ± 0.015 cm⁻¹ is obtained for the ionization potential of H₂. This result is in good agreement with previous work but nearly an order of magnitude more accurate, and is very close to the best theor. value.

Pugsten. COCM

C.A. 1989, 110, N18

H_2

1989

10 Л193. Измерения высоких ридберговских состояний и потенциала ионизации H_2 . Measurement of high Rydberg states and the ionization potential of H_2 / McCormack E., Gilligan J. M., Cornaggia C., Eyler E. E. // Phys. Rev. A.— 1989.— 39, № 4.— С. 2260—2263.— Англ.

Методом задержанной штарковской ионизации в молекулярном пучке измерены энергии ряда переходов из двухмногого состояния E, F молекулярного водорода в синглетные ридберговские состояния np с точностью $0,01 \text{ см}^{-1}$. Из анализа результатов получено значение потенциала ионизации (ПИ) H_2 относительно уровней $v=0, N=0$ и 1 состояния E, F . С привлечением известных данных по состоянию E, F вычислено значение ПИ основного состояния водорода: $124417,524 \pm \pm 0,015 \text{ см}^{-1}$, которое на порядок точнее существующего эксперим. значения ПИ и очень близко к наиболее точному теоретич. значению. Е. П. Смирнов

М.А.

ф. 1989, № 10

1989

19 Б1033. Метод измерения верхних ридберговых состояний и потенциала ионизации H_2 . Measurement of high Rydberg states and the ionization potential of H_2 / McCormack E., Gilligan J. M., Cornaggia C., Eyler E. E. // Phys. Rev. A.— 1989.— 39, № 4.— С. 2260—2263.— Англ.

Экспериментально при действии импульсного лазера на сверхзвуковой молек. пучок получен спектр высокого разрешения и измерены частоты переходов из состояния $E, F \ ^1\Sigma_g^+$ молекулы H_2 в синглетные ридберговы состояния np вплоть до $n=88$. Послед. экстраполяцией определен Пт ионизации H_2 . Уровни с $v=0$ или $N=0$ и 1 состояния E, F молекулы H_2 заселены с помощью двухфотонных переходов из основного состояния. Погрешности в положениях определяемых спектральных линий оценены в $0,01 \text{ см}^{-1}$. Полученный Пт ионизации равен $124417,524 \pm 0,015 \text{ см}^{-1}$.

А. В. Немухин

X. 1989, N 19

H₂

[OM. 31622]

1989

O' Halloran M.A.,
Dehmer P.M. et al.,

J. Chem. Phys., 1989,
90, N2, 930-948

Double-resonance studies
of rotational autoioniza-

tion of H_2 .

H₂

1989

2 Б1010. Сравнение кривых потенциальной энергии состояния $X^1\Sigma_g^+$ H₂ и D₂. A comparison between the potential energy curves for the $X^1\Sigma_g^+$ state of H₂ and D₂ / Pardo A., Poyato J. M. L., Camacho J. J., Martin E. // Spectrochim. acta A.— 1989.— 45, № 8.— С. 869—875.— Англ.

На основе спектроскопич. данных методом Ридберга—Клейна—Риса определены потенциальные кривые основного электронного состояния молекул H₂ и D₂. Равновесные межъядерные расстояния H₂ и D₂ различаются на 0,00053 Å (0,74124 и 0,74071 Å соотв.). Рассмотрены разности эксперим. Пт H₂ и D₂ с учетом и без учета сдвига, связанного с различием в равновес-

М.П.

(7) X

X. 1990, №2.

ных межъядерных расстояниях. Разности эксперим. Пт H_2 и D_2 сопоставлены с разностями теор. Пт, учитывающих адиабатич., релятивистские и радиац. поправки. Эксперим. и теор. разности близки между собой при межъядерных расстояниях, меньших равновесного, и существенно различаются при больших расстояниях. Это различие связано с неадиабатич. эффектами.

А. А. Сафонов

H₂

1989

2 Д82. Сравнение потенциальных кривых состояния $X^1\Sigma_g^+$ молекул H_2 и D_2 между собой. A comparison between the potential energy curves for the $X^1\Sigma_g^+$ state of H_2 and D_2 / Pardo A., Poyato J. M. L., Camacho J. J., Martin E. // Spectrochim. acta. A.— 1989.— 45, № 8.— С. 869—875.— Англ.

Из экспериментальных колебательно-вращательных термов молекул H_2 и D_2 получены коэф. Данхэма для потенц. кривых основного электронного состояния $X^1\Sigma_g^+$. Для больших значений межъядерных расстояний потенц. кривые описывались потенциалом Ван-дер-Ваальса. Найденные потенц. ф-ции позволяют воспроизвести колебательный спектр H_2 и D_2 с точностью 1 см^{-1} . Проведено сравнение потенц. кривых H_2 и D_2 между собой, а также с кривыми, найденными в точных квантовомеханич. расчетах. Найдено, что максим. различие между потенциалами H_2 и D_2 наблюдается при межъядерном расстоянии 1 Å и достигает 30 см^{-1} .

А. И. Дементьев

М.П.

(4) 2

ф. 1990, № 2

№2

1989

2 Д83. Борн-оппенгеймеровская кривая потенциальной энергии для состояния $h^3\Sigma_g^+$ молекулы водорода. The Born—Oppenheimer potential energy curve for the $h^3\Sigma_g^+$ state of the hydrogen molecule / Rychlewski Jacek // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 136, № 2.— С. 333—339.— Англ.

В приближении Борна—Оппенгеймера неэмпирически рассчитана потенц. кривая состояния $h(3s)^3\Sigma_g^+$ молекулы H_2 и получен набор спектроскопич. постоянных. Базис включал 70 компонент типа ф-ций Джеймса—Кулиджа, экспоненц. множители которых оптимизировались в четырех реперных точках. Численным методом Нумерова—Кули рассчитаны колебательные частоты для изотопомеров H_2 , HD и D_2 . По полученным данным проведено переотнесение эксперим. спектров изотопомеров молекулы водорода. Найденные спектроскопич. постоянные состояния $h^3\Sigma_g^+$ предполагается использовать для более точного расчета комплекса состояний $3d\Sigma\Pi$ молекулы водорода.

А. И. Дементьев

М.П.

✱
(+2)

ф. 1990, №2

H_2

1989

5 Б1016. Потенциальная кривая энергии состояния $h^3\Sigma_g^+$ молекулы водорода в приближении Борна—Опенгеймера. The Born—Oppenheimer potential energy curve for the $h^3\Sigma_g^+$ state of the hydrogen molecule / Rychlewski J. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 136, № 2.— С. 333—339.— Англ.

О использовании 70-членного разл. типа Джеймса—Кулиджа, содержащего члены, явно зависящие от межэлектронного расстояния, рассчитана потенциальная кривая состояния $h^3\Sigma_g^+$ в интервале межъядерных расстояний от 1,0 до 12,0 ат. ед. Найдены T_e , D_v и B_v ($I=0$, $v=0-3$ для H_2 и $v=0-5$ для D_2). Для колебат. квантов различие с эксперим. данными достигает 360 см^{-1} ($v=3$). Сделан вывод о необходимости проверки отнесения эксперим. данных. П. В. Ганелин

М.П.

⊠(H) D_2



Х. 1990, 112, N5