

1964

1964

H₂Исслед.
ф-ии

7 Д115. Параметры потенциала Морзе для молекулярного водорода. Bahethi O. P., Saxena S. C. Morse potential parameters for hydrogen. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1964, 2, № 8, 267—269 (англ.)

Данные по температурной зависимости второго вириального коэф., коэф. вязкости и диффузии интерпретируются с помощью потенциала Морзе. Показано, что с помощью одного набора параметров ф-ции Морзе невозможно объяснить равновесные и неравновесные свойства водорода. Указано, что трехпараметрич. потенциал (exp-6) и потенциал (12—6) лучше объясняют макроскопич. свойства водорода.

Е. Пшеничнов

ф. 1965. 78

H₂
hydrog. p.u.

196
Morse potential parameters for H. O. P. Bahethi and S. C. Saxena (Rajasthan Univ., Jaipur). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 2(8), 267-9(1964). The available 2nd virial, viscosity, and diffusion data for H were interpreted in terms of the 3-parameter Morse potential, $\theta(r) = \epsilon(x^2 - 2x)$; where $x = \exp[-(C/\sigma)(r - r_m)]$. $\theta(r)$ is the interaction potential energy of the 2 mols. at the sepn. distance r , ϵ is the depth of the potential energy min., σ and r_m are the distances at which the potential is zero and min., resp., and C is the parameter which measures the steepness of the repulsion and curvature at the min. The data available from either the temp. dependence of viscosity (η) or 2nd virial coeff. [$B(T)$] does not agree with the calcd. data. Similar disagreement exists with self-diffusion calcs. and observations. It is not possible to correlate η and $B(T)$ with a single set of parameters for the Morse potential. The 3-parameter exp.-6 and simple Lennard-Jones potentials better correlate the macroscopic properties. 15 references.
Ralph H. Steinberg

C.A. 1964. 61. 11

126618

H₂

1964

✓ 23 Б59. Диссоциация молекулы водорода при резонансном рассеянии электронов. Bardsley J. N., Herzberg A., Mandl F. The dissociation of hydrogen molecules by resonant electron scattering. «Atomic Collision Processes». Amsterdam, 1964, 415—427 (англ.)

В рамках теории составных систем рассмотрена диссоциация молекулы водорода при электронном ударе $H_2 + e \rightarrow H + H^-$. Волновая функция системы ищется в виде разложения по квазистационарным состояниям иона H_2^- , которые определяются граничными условиями Пайерлса. Эти условия налагаются на электронно-колебательную функцию, которая определяется в адиабатич. приближении. Окончательный расчет сечения позволяет интерпретировать эксперим. результаты в терминах ква-

x. 1965. 23

зистационарных потенциальных кривых мол. иона. На-
блюденный экспериментально пик при энергии ~ 11 эв
объясняется переходом молекулы H_2 из основного со-
стояния в разрыхляющее состояние иона H_2^- . Ширина
пика (~ 4 эв) согласуется с формой этой потенциальной
кривой вблизи области вертикального перехода. Второй
пик около 14 эв должен быть отнесен к диссоциации
 H_2^- на H^- и возбужденный атом водорода. Посколь-
ку соответствующая потенциальная кривая почти пло-
ская, пик должен быть очень узким. Е. Никитин

1964

Hg

Breare J. M., Engel A.

Proc. Roy. Soc., 282, 390

Locating electron swarms in
hydrogen by far ultra-
violet signals.

1964

7 Д69. Расчет молекулы H_2 с помощью атомных орбиталей с $Z_{эф}$, зависящим от углов. Bonassoggi R., Scrocco E., Tomasi J. H_2 molecule studied by an atomic orbital with angularly dependent Z_{eff} . «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 11, 3658—3660 (англ.)

Указывается, что число подлежащих расчету интегралов электронного отталкивания возрастает пропорционально четвертой степени числа применяемых базисных ф-ций. В связи с этим предлагается использовать слейтеровские АО с орбитальными экспонентами, зависящими от r , θ и ϕ . В частности, для молекулы H_2 использовались слейтеровские АО с $Z_{эф} = \epsilon(1 + \gamma \cos \theta)$, где ϵ и γ — параметры, подлежащие варьированию. Расчет был выполнен с различными двухэлектронными

H_2
в. м.р.
расчет

ф. 1965. 7Д

ф-циями, при этом сопоставление результатов сходных расчетов с обычными АО и АО нового типа показывает, что введение зависящих от углов $Z_{\alpha\phi}$ существенно улучшает результаты для энергии основного состояния (напр., обычная ф-ция Гайтлера — Лондона дает $D_e=0,139$, в то время как модифицированная дает $D_e=0,1489$ ат. ед.). Указывается, что время, необходимое для подсчета интегралов с новыми АО, почти не превышает времени расчета интегралов с обычными АО.

В. Быховский

36 Д134. Некоторые возбужденные состояния молекулы водорода. I. $^1\Pi_u(1s2p\Pi)$ и $^3\Pi_u(1s2p\Pi)$. В г о в -
п е J. C. Some excited states of the hydrogen molecule.
I. $^1\Pi_u(1s2p\Pi)$ and $^3\Pi_u(1s2p\Pi)$. «J. Chem. Phys.», 1964,
40, № 1, 43—46 (англ.)

Вариационным методом рассчитаны потенц. кривые для возбужденных состояний молекулы водорода $^1\Pi_u(1s2p\Pi)$ и $^3\Pi_u(1s2p\Pi)$. При расчетах были использованы одночленная волн. ф-ция с четырьмя нелинейными параметрами и 4-членная ф-ция. Вычислены спектроскопич. константы и получено хорошее согласие с эксперим. данными. Для $^1\Pi_u$ -состояния потенц. кривая при межатомном расстоянии $R \approx 6,7$ ат. ед. оказывается выше, чем при $R \rightarrow \infty$, и при $R \approx 8,7$ ат. ед. имеет максимум. Высота потенц. барьера $\approx 0,02$ эв. Результаты, полученные в настоящей работе, согласуются с эксперим. данными. Найдено, что при $R = 10$ ат. ед. еще значительную роль играют валентные взаимодействия; для $R > 12,0$ ат. ед. взаимодействие между атомами чисто кулоновское. Проведена оценка взаимодействия при 10,0 ат. ед. Вычислены средние значения для некоторых одноэлектронных операторов. Различие в случае одночленной и четырехчленной волн. ф-ций невелико. Е. Пшеничников

ф. 1964. 68

1964

Excited states of the hydrogen molecule. I. $^1\Pi_u(1s2p\Pi)$ and $^3\Pi_u(1s2p\Pi)$. J. C. Browne (Univ. of Texas, Austin). *J. Chem. Phys.* 40(1), 43-6(1964). Theoretical potential curves, spectroscopic consts., and expectation values for some 1-electron operators are given for the $^3\Pi_u(1s2p\Pi)$ (metastable) and $^1\Pi_u(1s2p\Pi)$ states of the H mol. Total energies of 0.7145 and 0.7334 a.u. are obtained for $^1\Pi_u$ and $^3\Pi_u$, resp. The exptl. total energies are 0.7186 and 0.7381 a.u. for $^1\Pi_u$ and $^3\Pi_u$, resp. The max. in the potential curve of the $^1\Pi_u$ state is much smaller and occurs at a larger internuclear sepn. (0.02 e.v. at $R \approx 8.5$ a.u.) than estd. by previous theoretical calcs. (0.1 e.v. at $R \approx 4.5$ a.u.). This $^1\Pi_u$ curve is reasonably consistent with the observed data of Herzberg and Monfils (CA 55, 24225f). RCJQ

Kb. mex.
pacreu

C.A. 1964. 60. 4
3611 bc

1964

H₂

потенц.
кривые

ХТ-2/02

21 Б50. Некоторые возбужденные состояния молекулы водорода. II. $^1\Pi_g(1s2p\pi)$, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_g(1s3d\delta)$, $^3\Delta_g(1s3d\delta)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$, $^3\Delta_u(1s3d\delta)$. Browne J. C. Some excited states of the hydrogen molecule. II. $^1\Pi_g(1s2p\pi)$, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_g(1s3d\delta)$, $^3\Delta_g(1s3d\delta)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$, $^3\Delta_u(1s3d\delta)$. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 6, 1583—1586 (англ.)

В широкой области межъядерных расстояний (от 1,0 до 20,0 ат. ед.) рассчитаны потенциальные кривые 2 связанных состояний $^1\Delta_g(1s3d\delta)$ и $^3\Delta_g(1s3d\delta)$ и 4 отталкивательных состояний $^1\Pi_g(1s2p\pi)$, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$ и $^3\Delta_u(1s3d\delta)$, молекулы водорода. Потенциальные кривые табулированы. Установлено, что рассчитанная форма потенциальных кривых даже на больших расстояниях (для связанных состояний вплоть до 20 ат. ед.) существенно отличается от потенциальных кривых, полученных в рамках теории возмущений (РЖФиз, 1961, 10В11; 1962, 4В9). С целью сравнения выполнен расчет волновых функций в одноцентровом приближении с учетом

а. 1965. 21

9 конфигураций объединенного атома. Сопоставление показывает, что распределение электронной плотности в возбужденных состояниях изученного типа хорошо описывается в рамках одноцентральной модели, что подтверждает концепцию квазиводородных ридберговских состояний H_2 . Вычисленные значения основных спектроскопических постоянных также хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными. Подчеркивается, что как одно-, так и двухцентровые волновые функции приводят к близким средним значениям ряда одноэлектронных операторов. Сообщение I см. РЖХим, 1964, 14Б39. В. Быховский

H₂ .

XI-2102

1964

(37846)

SOME EXCITED STATES OF THE HYDROGEN MOLECULE. II. $^1\Pi_g(1s2p\pi)$, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_g(1s3d\delta)$, $^3\Delta_g(1s3d\delta)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$, $^3\Delta_u(1s3d\delta)$. J. C. Browne (Univ. of Texas, Austin). J. Chem. Phys., 41: 1583-6 (Sept. 15, 1964).

Complete theoretical potential curves for the bound $^1\Delta_g(1s3d\delta)$ and $^3\Delta_g(1s3d\delta)$ states of H₂ and for the long-range portions of the repulsive $^1\pi_g(1s2p\pi)$, $^3\pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$, and $^3\Delta_u(1s3d\delta)$ states of H₂ are reported. Comparison of these results plus results from Paper I of this series to the conventional perturbation theory computations for the long-range interactions of those states shows that the conventional perturbation results may be misleading if valence and overlap forces are not considered. The computed total energies at R_e for the $^1\Delta_g(1s3d\delta)$ and $^3\Delta_g(1s3d\delta)$ states are -0.6570143 (-0.65778), and -0.6571785 (-0.65872

NSA-1964-18-21

au), respectively. The values in parentheses are experimental values. Spectroscopic constants and expectation values for some one-electron operators for the $^1\Delta_g(1s3d\delta)$ and $^3\Delta_g(1s3d\delta)$ states are also presented. Two-center and one-center wavefunctions yielding comparable energies for the $^1\Delta_g(1s3d\delta)$ state are compared through expectation values for a series of one-electron operators. (auth)

1964

7 Д71. Некоторые возбужденные состояния молекулы водорода. II. $^1\Pi_g(1s2p\pi)$, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_g(1s3d\delta)$, $^3\Delta_g(1s3d\delta)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$, $^3\Delta_u(1s3d\delta)$. Browne J. C. Some excited states of the hydrogen molecule. II. $^1\Pi_g(1s2p\pi)$, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$, $^1\Delta_g(1s3d\delta)$, $^3\Delta_g(1s3d\delta)$, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$, $^3\Delta_u(1s3d\delta)$. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 6, 1583—1586 (англ.)

Вычислена дальнедействующая часть внутримолекулярного потенциала для $^1\Pi_g(1s2p\pi)$ -, $^3\Pi_g(1s2p\pi)$ -, $^1\Delta_u(1s3d\delta)$ - и $^3\Delta_u(1s3d\delta)$ -состояний H_2 . Рассчитана также полная потенц. кривая для связанных состояний: $^1\Delta_g(1s3d\delta)$ и $^3\Delta_g(1s3d\delta)$. В последнем случае рассчитаны спектроскопич. константы и средние значения некоторых одноэлектронных операторов. Расчеты для случая $^1\Delta_g$ были проведены с одно- и двухцентровой волн. ф-циями, дающими вблизи равновесного значения R_e приблизительно одинаковые значения энергии. Сравнение спектроскопич. констант показывает, что одноцентровая ф-ция приводит к правильному распределению заряда, хотя форма потенциала передается хуже. Ч. I см. РЖФиз, 1964, 6Д134. Е. Пшеничнов

X1-2102

ф. 1965. 78

H₂
исх.
расчет

1964

✓ 4 Д41. Константы сверхтонкой структуры метастабильного $c^3\Pi_u$ -состояния молекулы водорода. Chiu Lue-Yung Chow. Fine-structure constants of the metastable $c^3\Pi_u$ -state hydrogen molecule. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 7, 2197—2198 (англ.)

Теоретически рассчитаны константы сверхтонкой структуры метастабильных вращательных уровней $c^3\Pi_u$ -состояния H_2 (четные N для пара-водорода и нечетные N для орто-водорода, где N — вращательное квантовое число). Электронная волн. ф-ция выбиралась в виде линейной комбинации волн. ф-ций Гайтлера—Лондона и ионного типа, причем из тех и других был образован слеитеровский детерминант. Двухцентровые интегралы рассчитывались на вычислительной машине IBM 7094. Рассчитанные константы удовлетворительно согласуются с эксперим. значениями.

М. Кожушнер

ф. 1965. 42

1964

H₂Vb. Liu.
район

№ 8 Б31. Константы структуры метастабильного $c^3\Pi_u$ -состояния молекулы водорода. Chiu Lue-Yung
Chow. Fine-structure constants of the metastable $c^3\Pi_u$ -state hydrogen molecule. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 7, 2197—2198 (англ.)

Теоретически рассчитаны константы тонкой структуры метастабильного $c^3\Pi_u$ -состояния. Электронная волновая функция выбиралась в виде линейной комбинации волновых функций типа Гайтлера — Лондона и ионного типа. Рассчитанные константы удовлетворительно согласуются с эксперим. данными.

М. Кожушнер

x. 1965. 8

H₂

1964

Fine-structure constants of the metastable $c^3\Pi_u$ -state hydrogen molecule. Lue-Yung Chow Chiu (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 41(7), 2197-8(1964). The fine-structure consts. of the $c^3\Pi_u$ state of the H mol., owing to spin-orbit, spin-other orbit, and spin-spin coupling, were calcd. The electronic wave function used was a linear combination of the Heitler-London type, with coeff. C_H , and of the ionic type, with coeff. C_I , both made of Slater-type A.O.'s of $1s\sigma$ and $2p\pi$ symmetry. For the orbital exponents $\zeta_{1s\sigma}$ and $\zeta_{2p\pi}$ (1.24108 and 0.50282, resp.), the coeffs. C_H and C_I (0.5612 and 0.2808, resp.) are the values which minimize the total energy of the mol., -0.718793 a.u., at the equil. internuclear distance, 1.96080 a.u. The 2-electron operators that appear in the spin-spin interaction are irregular solid spherical harmonics of the 2nd order; those which appear in the spin-other orbit coupling are a linear combination of irregular spherical harmonics of the 1st order. The 1-electron 2-center integral is evaluated by Barnett and Coulson's method (CA 45, 6041c); an exchange-type integral is converted into a linear combination of 2 hybrid-type integrals by Mulliken's approxn. (CA 44, 2296e) and evaluated exactly. Milton Landy.

C.A. 1965. 62. 2

1192 g

1964

H_2

предиссоц.

24 Б22.. Электронное магнитное возмущение в двухатомных молекулах в случае *b* по Гунду. Chow Chiu Lue-Yung. Electron magnetic perturbation in diatomic molecules of Hund's case b. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 8, 2276—2285 (англ.)

Исследовано возмущающее влияние спин-орбитального и спин-спинового взаимодействия в двухатомной молекуле с двумя внешними электронами в случае *b* по Гунду. Взаимодействия представлены в виде скалярных произведений двух неприводимых тензоров. Матричные элементы между состояниями $\Delta\Lambda=0, \pm 1, \pm 2; \Delta S=0, \pm 1, \Delta N=0, \pm 1, \pm 2$ рассчитаны по методу Рака. Исследована «запрещенная» предиссоциация метастабильного состояния $c^3\Pi_u$ молекулы H_2 вследствие взаимодействия с разрыхляющим состоянием $d^3\Sigma_u^+$. Зависимость матричных элементов спин-орбитального взаимодействия от N найдена аналогичной случаю матрицы спин-спинового взаимодействия. Возмущение второго порядка при больших N зависит от N так же, как и возмущение первого порядка. Рассмотрены различные процессы перехода. Использована волновая функция симметричного волчка для описания вращения молекулы; исследованы свойства симметрии этой волновой функции по отношению к инверсии.

Т. Ребане

ж. 1964.24

H_2

кв.-мех.
расчет

Сонрай Н.
У. Chem. Phys.
41, N5, 1336

1964

Ур-ние Шредингера для
мол.-д. III. Расчет энергий
основного состояния
используем жепрано-
мения

● $(\text{Сл. } H_2^+) \text{ III}$

1964

6 Д198. Поперечные сечения поглощения и фотоионизации молекул H_2 и D_2 в вакуумной УФ-области. Cook G. R., Metzger P. H. Photoionization and absorption cross sections of H_2 and D_2 in the vacuum ultraviolet region. «J. Opt. Soc. America», 1964, 54, № 8, 968—972 (англ.)

В области 1000—580 Å измерены поперечные сечения поглощения и фотоионизации молекул H_2 и D_2 . Слабая полоса поглощения с $k \leq 20 \text{ см}^{-1}$, которая наблюдается в области 1000—860 Å, следует за полосой с максимумом 844,8 Å ($k = 320 \text{ см}^{-1}$). В области 844,8—813,7 Å лежат широкие полосы преддиссоциации $D-X$ и континуум с $k = 150 \text{ см}^{-1}$. Максим. величина k в системе $D-X$ имеет место в полосе (3—0). Следующий далее ионизационный континуум имеет широкий максимум при 730 Å с $k = 300 \text{ см}^{-1}$. При длинах волн, меньших 710 Å, структура полос маскируется сплошным фоном. Коэф.

ф. 1965. 62

фотоионизации вплоть до $\lambda = 700 \text{ \AA}$ меньше, чем коэф. поглощения, но в более коротковолн. области достигает 100%. Сильное поглощение в $D-X$ -полосах приводит к менее эффективной фотоионизации, чем поглощение в соседних полосах с меньшей интенсивностью. Аппаратура была применена для наблюдения флуоресценции исследуемых газов. Обнаружены слабые пики испускания при 850, 755 и 720 $\text{\AA}$. Библ. 21 назв. В. Колобков

1964

H_2
И.В. Мер.
разреш.

7 Д67. О молекулярной модели водорода, поддающейся точному решению. Corinaldesi E. On a solvable model of the hydrogen molecule. «Nuovo cimento», 1964, 33, № 6, 1680—1697 (англ.; рез. итал.)

Вводятся фиктивные частицы, передающие такие свойства взаимодействующих электронов и протонов, которые существенны для образования стабильных молекул. Сформулировано уравнение Шрёдингера, представляющее собой аналог соответствующего уравнения для молекулы водорода, которое может быть решено точно. Обсуждены приближения Гайтлера — Лондона и модифицированное уравнение Шрёдингера.

ф. 1965. 79

1964

7 Д68. Исследование приближения Борна — Оппенгеймера с применением к молекуле H_2 . Fisk George A., Kirtman Bernard. Study of the Born — Oppenheimer approximation with application to H_2 . «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 11, 3516—3521 (англ.)

Предложен основанный на теории возмущений метод расчета поправок к приближению Борна — Оппенгеймера для двухатомных молекул. Показано, что эффективная потенц. энергия для основного электронного состояния зависит как от колебательного момента молекулы, так и от межъядерного расстояния. Обсуждены различные приближения, с помощью которых удастся сделать оценки сумм по высшим электронным состояниям. Полученный эффективный потенциал использован при численном решении уравнения Шрёдингера для молекулы H_2 .

H_2
И. Мер
расчет

XI-1697

ф. 1965. 78

Рассмотрены состояния с нулевым вращательным моментом. Полученные при численном решении результаты показывают, что поправки к приближению Борна — Оппенгеймера для уровня с $v=0$ составляют $\sim 0,2 \text{ см}^{-1}$ и не в состоянии объяснить расхождение между теоретич. и эксперим. значениями энергии диссоциации $14,8 \text{ см}^{-1}$. Полная поправка на аангармоничность для основного состояния равна 30 см^{-1} и быстро увеличивается при переходе к высшим колебательным состояниям.

В. Быховский

X/ - 1697

1964

H₂

18 Б21. Исследование приближения Борна — Оппенгеймера в применении в H₂. Fisk George A., Kirtman Bernard. Study of the Born—Oppenheimer approximation with application to H₂. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 11, 3516—3521 (англ.)

На примере молекулы H₂ в основном электронном состоянии исследуется точность адиабатич. приближения. Для исследования неадиабатических эффектов волновая функция разлагается в ряд по адиабатическим электронным функциям и колебательным функциям основного состояния. В этом случае электронно-колебательные уровни энергии во втором порядке теории возмущений выражаются как собственные значения эффективного колебательного гамильтониана, содержащего дополнительные члены вида $-(\hbar^2/2\mu)[B_{00}(R) - (l^2)_{00}/\hbar^2 R^2] + (\hbar^2/\mu)^2 \langle \Delta E \rangle^{-1} (dB_{00})$, где μ — приведенная масса ядер, $\langle \Delta E \rangle$ — средняя энергия возбуждения и $B_{00} = \int \psi(\text{эл.}) (d^2/dR) \psi_{00}(\text{эл.}) d\tau$. Расчет коэф. неадиабатич. связи выполнен для функций Колоса и Рутана и

X. 1965. 18

функции Ванга. Численное решение колебательной задачи в эффективном потенциале табулировано для нижних уровней. Неадиабатический вклад в первом порядке дает для уровней $v=0$ и $v=1$ сдвиги $-21,2$ и $-20,8$ см^{-1} , а во втором порядке — сдвиги $+0,2$ и $+0,7$ см^{-1} . Соответствующие поправки для $v=0$, обусловленные ангармоничностью, равны -74 (куб. член) и $+44$ см^{-1} (член четвертой степени).

Е. Никитин

1964

 H_2^+ H_2

9 Д72. Численный расчет волновых функций для H_2^+ и H_2 . Goodisman Jerry. Numerical calculation of H_2^+ and H_2 wavefunctions. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 12, 3889—3897 (англ.)

Предложен численный метод расчета двухатомных молекул, включающий в себя гауссовы квадратуры в 4 измерениях. Метод применен к вариационным функциям с линейными параметрами для H_2^+ и функциям типа Джемса—Кулиджа для H_2 с числом базисных функций вплоть до 15. Значения энергии связи были получены с точностью 0,1%. Волновые функции воспроизведены с точностью в несколько процентов. Обсуждены преимущества и недостатки метода и проведено сравнение с методом Фроста.

см. H_2^+ (III)

ф. 1965 98

XI - 1773

1964

H₂

10780 ELECTRONIC ENERGY OF THE HYDROGEN MOLECULE GROUND STATE BY THE LOCAL-ENERGY METHOD. D. K. Harriss and A. A. Frost (Northwestern Univ., Evanston). J. Chem. Phys., 40: 204-7(Jan. 1, 1964).

The least-squares local-energy method was applied to the hydrogen molecule in great detail. Equations are given for the Hamiltonian operator and local energy for diatomic molecules in the mixed interelectronic-confocal elliptic coordinate system. Wavefunctions with up to 22 terms and larger numbers of points are considered and it is shown that both lead to values for the dissociation energy that are within ± 0.0001 hartrees of the exact value, 0.1744 hartrees. (auth)

NSA-1964-18-7

1964

Quantum mechanics of the hydrogen molecule and the hydrogen molecule ion. Donald Karl Harriss (Northwestern Univ., Evanston, Ill.). Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 64-5843, 151 pp.; *Dissertation Abstr.* 25(1), 57(1964).

SNDC

H_2, H_2^+
Vb. lisp.
paerf

C.A. 1964. 61. 11

12654ef

Ив. Мир.
рачег
Мол. А

H_2
=

3 Б24. Асимптотическая обменная связь двух водородных атомов. Herring, Conyers, Flicker Michael. Asymptotic exchange coupling of two hydrogen atoms. «Phys. Rev.», 1964, 134, № 2A, 362—366 (англ.)

Исследована зависимость величины расщепления $2J$ между низшими синглетным и триплетным уровнями в молекуле водорода от расстояния R между протонами. Метод исследования и результаты в значительной степени повторяют выводы работы Горькова Л. П. и Пятаевского Л. П. (РЖХим, 1964, 3Б41). Основное отличие состоит в оценке коэф. при асимптотич. значении обменного интеграла I : $I = -0,821R^{5/2}l^{-2n}$. Показано также, что следующий член разложения обменного интеграла J порядка R^{2l-2n} .

С. Ветчинкин

196

ж. 1965.3

1964

 H_2

Hoyland J. R.

J. Chem. Phys., 41, 3153 (1964)

Magnetic and electrical properties of small diatomic molecules. I. Diamagnetic susceptibility, proton-shielding constant and electric polarizability of the hydrogen molecule.

H₂

1964

23 Б53. Многоцентровые волновые функции для молекулы водорода и молекулярного иона водорода. Hoyle and James R. Many-center wavefunctions for the hydrogen molecule and hydrogen molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 12, 3540—3547 (англ.)

Произведены расчеты H_2^+ и H_2 использованием: полного набора $1s$ -орбит типа $\exp(-\xi r)$ с центрами во многих точках пространства и набора всех сферич. гауссовых функций. Использование для H_2^+ набора из 6 функций (что эквивалентно включению $1s$, $2p$ σ - и ($3d\sigma$ -орбит) с варьированием трех экспонент приводит к значению энергии $-0,60123$ ат. ед., а набор из 6 гауссовых функций приводит к величине $-0,602494$ ат. ед. Рассчитано также возбуждение $^2\Pi_u$ -состояние H_2^+ . Для H_2 с функцией, составленной из $1s$ -орбит с 4 центрами, найдено $E = -1,1568$, а набор из МО, построенных из гауссовых функций, дает $E = -1,1585$ ат. ед. Приведены ф-лы для вычисления использованных интегралов и значения всех параметров. Автор считает использование гауссовых функций более перспективным. М. Дяткина

Х. 1965-23

H₂

1964

9 Д71. Многоцентровые волновые функции водородной молекулы и молекулярного иона водорода. Ноу-ланд James R. Many-center wavefunctions for the hydrogen molecule and hydrogen molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 12, 3540—3547 (англ.)

Произведено сравнение скорости сходимости разложений электронных волн. ф-ций иона H_2^+ и молекулы H_2 в ряды по водородным $1s$ -ф-циям и по ф-циям Гаусса, отнесенным к различным центрам. В разложении одноэлектронных ф-ций учтено до 6 базисных ф-ций (Слейтера или Гаусса), отнесенных к некоторым фиксированным центрам, вообще говоря, не совпадающим с положениями протонов. Рассмотрены основные и $^2\Pi$ -возбужденные состояния H_2^+ и H_2 . Показано, что разложение по ф-циям Гаусса обладает несколько лучшей сходимостью, чем многоцентровое разложение по $1s$ -водородным ф-циям (особенно для H_2^+). Подчеркивается важная роль процедуры минимизации по нелинейным параметрам.

С. Ветчинкин

ф. 1965. 98

M 1474 - IV

1964

M.N. (CO, H₂, H₂⁺, HeH, HF)

Jenč F.

Collect. Czechosl. Chem. Commun,
q 1964, 29, N 12, 2869-2880

Reduced theoretical potential curves
for some first row diatomic molecules

J

6112

F

PX., 1966, 22 37

Expt. OPER. 1964

1964

H₂
BF

№ 4 Д40. Расчет наимизшего возбужденного состояния $1\Sigma_g^+$ молекулы H₂ методом молекулярных орбит. Kato Yoshifumi, Hayes Edward F., Duncan A. B. F. Molecular orbital description of the lowest excited $1\Sigma_g^+$ state of H₂. «J. Chem. Phys.»; 1964, 41, № 4, 986—988 (англ.)

При различных наборах базисных ф-ций методом МО рассчитывается молекула H₂ в низшем возбужденном состоянии $1\Sigma_g^+$. Целью расчета являлось испытание различных видов пробных ф-ций для выяснения их пригодности к более сложным молекулам, поэтому использовался ограниченный набор базисных ф-ций. Найдено, что наилучшая трехцентровая ф-ция дает энергию примерно на 0,1 эв ниже наилучшей двухцентрорвой ф-ции. Возбужденный электрон лучше представляется одноцентровой орбитой с центром в средней точке междьядерного расстояния, чем двухцентрорвой орбитой с координатами в месте расположения ядер. Распределение электронной плотности молекулы лучше описывается с включением одноцентровой орбиты. Е. Пшеничнов

ф. 1965. 48

H₂

1964

Kb. mes.
p. 100

Molecular orbital description of the lowest excited $^1\Sigma_0^+$ state of H₂. Yoshifumi Kato, Edward F. Hayes, and A. B. F. Duncan (Univ. of Rochester, Rochester, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 41(4), 986-8(1964). Further calcns. on the lowest excited $^1\Sigma_0^+$ state of H₂ are reported. A lower min. energy is found with an excited orbital centered at the midpoint of the internuclear axis than with a 2-centered orbital, with coordinates measured from the two nuclei. The electron d. distribution of the 1-centered orbital is also more in agreement with expectations.

RCJQ

C. A. 1964 C/ NC 65314

H₂
W. Kolos,
pačny

Accurate adiabatic treatment of the ground state of the hydrogen molecule. W. Kolos and L. Wolniewicz (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 41(12), 3663-73(1964)(Eng). Accurate ground-state energies of the H mol. were computed using wave functions in the form of expansions in elliptic coordinates and including explicitly the interelectronic distance (R). The computations were made with 54-term expansions ($0.4 \leq R \leq 3.7$) and with 80-term expansions ($0.5 \leq R \leq 2.0$). For the equil. internuclear distance, the best total energies obtained in the 2 cases are -1.1744701 and -1.1744746 a.u., resp., the corresponding binding energies being $38,291.8$, and $38,292.7$ cm.⁻¹. Employing the 54-term wave functions, the relativistic corrections and the diagonal corrections for nuclear motion were computed for several internuclear distances. For equil. their contributions to the binding energy are -0.526 and 4.947 cm.⁻¹, resp. Thus the final theoretical binding energy for H₂ is $38,297.1$ cm.⁻¹ and is a little larger than the exptl. value, $38,292.9 \pm 0.5$ cm.⁻¹. The discrepancy may be due to the adiabatic approxn. RCJQ

C.A. 1965.62.3
2250 Bk

1964
5161-1915
89-11-29

H₂

ВР - XI - 1915

1964

расчет

18 Б19. Точное рассмотрение основного состояния молекулы водорода в рамках адиабатического приближения. Kolos W., Wolnewicz L. Accurate adiabatic treatment of the ground state of the hydrogen molecule. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 12, 3663—3673 (англ.)

Представлено вариационное рассмотрение основного состояния молекулы H₂. Пробная волновая функция, записанная в эллиптических координатах, включает межэлектронные расстояния и имеет 54 члена в области $0,4 \leq R \leq 3,7$ и 80 членов в области $0,5 \leq R \leq 2,0$ ат. ед. Наилучшие полные энергии, рассчитанные с функциями 2-указанных типов, соответственно равны $-1,1744701$ и $-1,1744746$ ат. ед., а соответствующие энергии связи $38291,8$ и $38292,7$ см⁻¹. С использованием 54-членной волновой функции для нескольких межъядерных расстояний рассчитаны релятивистские поправки и диаго-

Х. 1965. 18



нальные поправки, обусловленные движением ядер. При равновесном межъядерном расстоянии соответствующие вклады в энергию связи равны — 0,526 и 4,947 см^{-1} соответственно. Теоретич. величина энергии связи H_2 равна 38297,1 см^{-1} ; соответствующая эксперим. величина равна $38292,9 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$. Расхождение между двумя величинами приписывается неточности адиабатич. приближения. Аналогичный анализ выполнен для изотопных молекул HD и D_2 . Энергии диссоциации соответственно равны 38295,5 и 38294,7 см^{-1} ; эксперим. значения $38290,9 \pm 1,5$ и 38291,410,7 см^{-1} .

В. Быховский

1964

Accurate computation of vibronic energies and of some expectation values for H, D, and T. W. Kolos and L. Wolniewicz (Univ. of Chicago). *J. Chem. Phys.* 41(12), 3674-8 (1964)(Eng); cf. preceding abstr. The complete 4-particle nonrelativistic Hamiltonian and 147-term wave functions were used to compute the energies and the expectation values of several other operators for vibronic ground states and for the 1st vibrationally excited states of H, D, and T. For H and D the computed dissocn. energies, with relativistic corrections, are 0.6 and 1.3 cm.⁻¹, resp., larger than the exptl. values.

RCJQ

C.A. 1965.62.3

2250hc

1964

H_2
 D_2

T_2

кв.-мех.
расчет

9 D75. Точное вычисление электронно-колебательных энергий и некоторых средних значений для H_2 , D_2 и T_2 . Kolos W., Wolniewicz L. Accurate computation of vibronic energies and of some expectation values for H_2 , D_2 , and T_2 . «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 12, 3674—3678 (англ.)

Вариационным методом с полным четырехчастичным нерелятив. гамильтонианом вычислены волн. ф-ции основного и первого колебательно-возбужденного электронно-колебательного состояния молекулы H_2 . Наиболее точная волн. ф-ция содержала 147 членов. Эта ф-ция была использована далее для подсчета ряда средних значений некоторых операторов. Аналогичные вычисления выполнены также для D_2 и T_2 . Основной результат работы состоит в утверждении, что в неадиабатич. приближении с учетом релятив. поправок между теоретич. и эксперим. значениями энергии диссоциации сохраняет-

ф. 1965.92



ся различие, превышающее ошибки эксперим. измерений: для H_2 и D_2 вычисленные энергии диссоциации превышают экспериментальные на 0,6 и 1,3 см^{-1} . Указывается, что ошибка численного анализа, по-видимому, существенно меньше этого расхождения. Делается вывод, что имеются некоторые незначительные по величине эффекты, пренебрегаемые в современных теории или эксперименте. В работе получены распределения вероятности $P(R) = R^2 \Psi^*(R, r) \Psi(R, r) dr$, $r \equiv (r_1, r_2)$, для основного и первого колебательно-возбужденного электронно-колебательных состояний.

В. Быховский

1964

 H_2 D_2 T_2 (D_0) Kbaser. - mex.
papers

6450 ACCURATE COMPUTATION OF VIBRONIC ENERGIES AND OF SOME EXPECTATION VALUES FOR H_2 , D_2 , AND T_2 . W. Kotos and L. Wolniewicz (Univ. of Chicago). J. Chem. Phys., 41: 3674-8 (Dec. 15, 1964).

The complete four-particle nonrelativistic Hamiltonian and 147-term wavefunctions were used to compute the energies and the expectation values of several other operators for vibronic ground states and for the first vibrationally excited states of H_2 , D_2 , and T_2 . For H_2 and D_2 the computed dissociation energies, with relativistic corrections, are by 0.6 and 1.3 cm^{-1} , respectively, larger than the experimental values. (auth)

NSA-1965-19-4



1964

H_2

Lassetre E. N., Jones E. A.

J. Chem. Phys., 1964, 40, 1222 (N:5)

Вероятно-
нужно.

Определение абсолютных сил ак-
тивных центров при молекулярном во-
збуждении электронным ударом.

Получены значения сил акти-
вных центров возбужденного соеди-
нения с определенными органиче-
скими веществами.

H₂

6453

MEASUREMENTS OF THERMAL DISSOCIATION OF HYDROGEN, USING FAST PROTONS. Grant J. Lockwood, Herbert F. Helbig, and Edgar Everhart (Univ. of Connecticut, Storrs). J. Chem. Phys., 41: 3820-4 (Dec. 15, 1964).

Experiments involving study of the angular scattering of kiloelectron-volt protons from atomic and molecular hydrogen targets were used to measure directly the fraction of hydrogen gas dissociated in equilibrium with hot tungsten. The state of the hydrogen gas in a tungsten furnace was determined by analyzing the scattered incident particles that result from single collisions between the incoming protons and the hydrogen gas in the furnace. In particular, the number of H⁺ ions among the scattered particles is a measure of the molecular hydrogen density, since H⁺ ions cannot be created in single collisions between protons and hydrogen atoms. Under the present experimental conditions it was possible to achieve a fraction dissociation of over 87.5% at a furnace temperature of 2380°K and still higher fractions at higher temperatures. These measurements were

1964

NSA-1968-19.4

made at hydrogen pressures of the order of 10^{-2} torr. The practical conditions under which an atmosphere of highly dissociated hydrogen can be created are described and it is pointed out how the dissociation fraction and also the density of the hydrogen can be directly measured in the otherwise inaccessible interior of the gas. These measurements using a proton beam probe do not require that the pressure or temperature of the hydrogen be known and, in fact, do not require thermal equilibrium conditions. (auth)

1964

 H_2

max. точн.

Кб. мех. параметр

Accuracy of computed spectroscopic constants from Hartree-Fock wave functions for diatomic molecules. A. D. McLear (Intern. Business Machines Res. Lab., San Jose, Calif.). *J. Chem. Phys.* 40(1), 243-4(1964). The degree to which M.O. wave functions can adequately represent the electronic structure of a mol. is a function of the internuclear sepn., R . The difference, ΔE , between the Hartree-Fock energy and the exact nonrelativistic energy of the mol. energy of the mol. will also be a function of R . Calcd. values of spectroscopic consts. for H_2 and LiF are given.

K. Jakobson

C.A. 1964. 60. 6

6327d

H₂

1964

5 Д83. Оптимизация молекулярных волновых функций посредством изменения масштабного фактора. McLean A. D. Optimization of molecular wavefunctions by scaling. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 10, 2774—2784 (англ.)

Детально исследовано изменение электронных волн. функций ψ молекул, главным образом двухатомных, и изменение средних значений физич. величин при вариации масштабного фактора. Определенная трудность состоит в том, что в ф-ции ψ , найденной в приближении Борна—Оппенгеймера, при растяжении электронных координат одновременно необходимо изменить межъядерные расстояния R . Основное внимание уделено определению потенц. кривой $E(R)$. Обычно $E(R)$ находят интерполяцией результатов расчета энергии $E(R_\alpha)$ при нескольких значениях $R=R_\alpha$ ($\alpha=1, 2, \dots$). Предложено вместо точки $E(R_\alpha)$ рассматривать кривую $E(R_{\alpha\lambda})$, полу-

ф. 1965. 5Д

☒

ченную из выражения [энергии $E(R_\alpha)$ вариацией масштабного фактора λ . Потенц. кривая $E(R)$ определяется в этом случае как огибающая семейства кривых $E(R_{\alpha\lambda}) (\alpha=1, 2, \dots)$. В качестве примера приведены результаты расчета $E(R)$ и спектроскопич. постоянных $\omega_e, \omega_e x_e, \omega_e y_e, \omega_e z_e, B_e, \alpha_e, \gamma_e, \delta_e, D_e, \beta_e$ для молекул H_2 (с 40-членной волн. ф-цией Колоса и Рутана (РЖФиз, 1961, 1В39; 1964, 5Д48)) и LiF (волн. ф-ция взята из ранее опубликованной работы (РЖФиз, 1964, 5Д48)). Найдено, что в этих случаях вариация масштабного фактора практически не изменяет значения спектроскопич. постоянных.

С. Ветчинкин

H_2

1964

J 4 Б168. Возмущение колебательных частот в спектре комбинационного рассеяния сжатого газообразного водорода. May A. D., Varghese G., Stryland J. C., Welsh H. L. Vibrational frequency perturbations in the Raman spectrum of compressed gaseous hydrogen. Canad. J. Phys., 1964, 42, № 6, 1058—1069 (англ.)

Измерены частоты линий $Q(J)$ спектра комб. расс. основной полосы сжатого газообразного H_2 с высоким спектральным разрешением для ряда плотностей 25—400 амага при 300 и 85° К. Сдвиги частот выражены в виде ряда по степеням плотности газа. Линейный коэф. при данной т-ре имеет форму $a_J = a_i + a_c (n_J/n)$, где a — постоянная для всех Q -линий, может быть интерпретирована в терминах изотропных межмолекулярных сил и значение $a_c (n_J/n)$, пропорциональное относительной заселенности начальных уровней, возникает вследствие связанных колебаний пары молекул. Температурная за-

ж. 1965. 4

зависимость α_i проанализирована с помощью межмолекулярного потенциала Леннарда-Джонса и функции парного распределения молекул. Отталкивающие силы и силы притяжения дают соответственно положительный и отрицательный вклад в α_i , который может быть характеризован эмпирич. параметрами. Обсуждается связь полученных результатов со сдвигами частот комб. расс. в твердом H_2 .

Р. Ф.

H₂

B90-9756-1 $\bar{v}$ | 1964

Melton C.E., Hamill W.H.

(A.P)

" J. Chem. Phys., 1964, 41,
W2, 546-53

1964

Hg
2

Mulliken R. S.

Phys. Rev., 136, A962, (1964)

Rare-gas and hydrogen molecule electronic states, non-crossing rule, and recombination of electrons.

Ha
Camp

XI-2151 1964

Absorption spectra of H₂ in the vacuum-ultraviolet region. I. The Lyman and the Werner bands. T. Namioka (Air Force Cambridge Res. Lab., Bedford, Mass.). *J. Chem. Phys.* 40(11), 3154-65(1964). The absorption spectrum of the H₂ mol. was studied in the wavelength region 930-840 Å. with a 6.8-m. grazing incidence vacuum spectrograph in combination with the He continuum. The Lyman and the Werner bands were extended to their dissocn. limits. The results of the rotational analysis of these bands are given. Behavior of the C ¹Π_n potential curve near the dissocn. limit and predissocn. found in the $\nu = 13$ level of the C state are also discussed. RCJQ

The influence of secondary absorption and emission processes on the duration of luminescence of a plane-parallel layer. A. M. Samson. *Opt. Spectry.* (USSR) (English Transl.) 8(1), 43-7 (1960). The influence of secondary absorption and emission

C. A. 1964 by NI 187e

processes on the duration of luminescence of a plane-parallel layer was studied. The formulas obtained make it possible to calc. the duration of luminescence under different conditions of irradiation and observation. There may be a considerable increase in the duration assocd. with high values of the quantum yield. The duration of the luminescence as observed through the layer is always greater than the corresponding duration observed by "reflection."

RCTT

X1 - 2131

1964

H₂

спектр

23 Б113. Спектр поглощения H₂ в вакуумной ультрафиолетовой области. I. Полосы Лаймана и Вернера. Namioka T. Absorption spectra of H₂ in the vacuum-ultraviolet region. I. The Lyman and the Werner bands. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 11, 3154—3165 (англ.)

Системы полос Лаймана ($B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$) и Вернера ($C^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$) в спектре поглощения H₂ исследованы на спектрографе с решеткой, дающей дисперсию 0,9 Å/мм при 890 Å. В качестве источника использовался He-континуум. Выполнен анализ вращательной структуры полос, соответствующих $17 \leq v' \leq 37$ для состояния $B^1\Sigma_u^+$ и $5 \leq v' \leq 14$ для состояния $C^1\Pi_u$, и вычислены вращательные постоянные H₂ в этих двух состояниях. Показано, что колебательные уровни в этих состояниях получены вплоть до соответствующих диссоциационных пределов. Обсуждается преддиссоциация на уровне $v'=13$ состояния $C^1\Pi_u$. В. Юнгман

X. 1965.23

X1-2151

1984

H₂.(универс.
м.к.)

✓ 3 Д165. Спектр поглощения H₂ в области вакуумной УФ-области. I. Полосы Лаймана и Вернера. Namio-
ka T. Absorption spectra of H₂ in the vacuum-ultraviolet
region. I. The Lyman and the Werner bands. «J. Chem.
Phys.», 1964, 40, № 11, 3154—3165 (англ.)

Изучен спектр поглощения H₂ в области 930—840 Å с помощью вакуумного спектрографа (фокус 6,8 м) и гелиевого источника сплошного спектра. Произведено исследование полос Лаймана и Вернера вплоть до их диссоциационных пределов. Приведены результаты анализа вращательной структуры полос. Обсужден ход потенц. кривой состояния C¹Π_u вблизи предела диссоциации. Отмечен факт. преддиссоциации, происходящий с уровня v=13 состояния C¹Π_u.

ф. 1965. 38

H_2

спектр

X1-2150

1964

14 Б110. Спектр поглощения H_2 в вакуумной ультрафиолетовой области. Полосы $B'-X$, $B''-X$, $D-X$ и $D'-X$. Namioka T. Absorption spectra of H_2 in the vacuum ultraviolet region. II. The $B'-X$, $B''-X$, $D-X$, and $D'-X$ bands. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 7, 2141—2152 (англ.)

Получен спектр поглощения молекулы водорода в области 840—930 Å на приборе с решеткой 600 штрих/мм ($f=6,8$ м). Выполнены колебательный и вращательный анализы полос $B'-X$ (полосы от 0,0 до 9,0), $D-X$ (от 0,0 до 2,0), $B''-X$ (полоса 0,0) и $D'-X$ (0,0). Отмечено наличие сильного гетерог. возмущения между состояниями $B'^1\Sigma_u^+$ и $D^2\Pi_u$ ($W_{mn}=16,2$ см⁻¹), слабого гетерог. возмущения между состояниями $B'^1\Sigma_u^+$ и $D'^1\Pi_u$ ($W_{50}=3,2$, $W_{60}=0,65$ см⁻¹) и среднего гомог. возмущения между состояниями $B'^1\Sigma_u^+$ и $B''^1\Sigma_u^+$ ($W_{40}=5,7$ см⁻¹).

x.1965.14

Вычислены вращательные постоянные B_v и D_v для различных колебательных уровней состояний B' , B'' , D и D' с учетом и без учета возмущений. Существованием сильного возмущения между состояниями B' и D объясняется преддиссоциация уровней с $V \geq 3D'1\pi_u$ состояния (тип b^0 по классификации Мулликена). Определены колебательные и вращательные постоянные молекулы H_2 в равновесии и энергия диссоциации для состояний $B'\Sigma_u^+$ и $D'\pi_u$.

Р. Ф.

1964

H_2
 спектр
 м.ч. (Фв)
 CS12-2150
 XI-1X

6 Д197. Спектр поглощения H_2 в вакуумной УФ-об-
 ласти. II. Полосы $B'-X$, $B''-X$, $D-X$ и $D'-X$. Na-
 mioka T. Absorption spectra of H_2 in the vacuum ultra-
 violet region. II. The $B'-X$, $B''-X$, $D-X$, and $D'-X$
 bands. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 7, 2141—2152
 (англ.)

Получен спектр поглощения молекулы водорода в
 области 840—930 Å на приборе с решеткой 600 штрих/мм.
 ($f=6,8$ м). Выполнен колебательный и вращательный
 анализ полос $B'-X$ (полосы от 0,0 до 9,0), $D-X$ (от
 0,0 до 2,0), $B''-X$ (полоса 0,0) и $D'-X$ (0, 0). Отме-
 чено наличие сильного гетерогенного возмущения меж-
 ду состояниями $B'^1\Sigma_u^+$ и $D^1\Pi_u$ ($W_{mn}=16,2\text{ см}^{-1}$), сла-
 бого гетерогенного возмущения между состояниями
 $B'^1\Sigma_u^+$ и $D'^1\Pi_u$ ($W_{50}=3,2\text{ см}^{-1}$, $W_{50}=0,65\text{ см}^{-1}$) и сред-

ф. 1965. 6Д

него гомогенного возмущения между состояниями $B'^1 \sum_u^+$ и $B''^1 \sum_u^+$ ($W_{40} = 5,7 \text{ см}^{-1}$). Вычислены вращательные постоянные B_v и D_v для различных колебательных уровней состояний B' , B'' , D и D' с учетом и без учета возмущений. Существованием сильного возмущения между состояниями B' и D объясняется преддиссоциация уровней с $v \geq 3$ $D'^1 \pi_u$ -состояния (тип b^0 по классификации Мулликена). Определены колебательные и вращательные постоянные молекулы H_2 в равновесии и энергия диссоциации для состояний $B' \sum_u^+$ и $D' \pi_u$.

Библ. 20 назв. ч. I см. РЖФиз, 1965, 3Д165.

1964

4 Д65. Интегралы перекрывания с колебательными волновыми функциями для ультрафиолетовых полос H_2 . Patch R. W. Vibrational overlap integrals for ultraviolet bands of H_2 . «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 6, 1881—1883 (англ.)

Электрон
интенсивность
перекрывания

С использованием модифицированного потенциала Хульбурта—Гиршфельдера между первым и последним узлами колебательной волн. ф-ций для линейной аппроксимации потенциала в окрестностях классич. точек поворота по методу ВКБ численно (на IBM704) найдены колебательные волн. ф-ции и соответствующие интегралы перекрывания для следующих электронных переходов в H_2 : $1\Sigma_u^+ - 1\Sigma_g^+$ и $1\Pi_u - \Sigma_g^+$; интегралы перекрывания для этих электронных переходов соответственно равны $q_{31} = -0,3155$, $q_{32} = 0,2087$ и $q_{02} = 0,5196$, $q_{03} = 0,3516$, $q_{13} = 0,4455$, $q_{23} = 0,2959$ ($qv'v''$ относится к переходу $e'v' \rightarrow e''v''$ между двумя электронно-колебательными состояниями, причем $e' \neq e''$ и $v' \neq v''$). Спектроскопич. постоянные (необходимые для подсчета электронного потенциала) заимствованы у Герцберга. Сравнение с

ф. 1965. 48

См. 1965.

экспериментом было проведено для произведения q_{03}^2 (полоса Вернера) и теоретич. силы осциллятора электронного перехода, которая входит в выражения для коэф. поглощения света. При этом оказалось, что эксперим. значение коэф. поглощения ($11,2 \text{ см}^{-1}/\text{атм}$) хорошо согласуется с теоретич. значением ($9,0 \text{ см}^{-1}/\text{атм}$ при 4000° К). Подчеркивается, однако, что несмотря на хорошее согласие, измерение коэф. поглощения производится с неудовлетворительной точностью и не может служить для определения электронных сил осцилляторов или относит. вероятностей колебательных переходов.

В. Быховский

1964

 H_2 ув. пер-
расч

7 Д65. Расчет поверхностей потенциальной энергии многоатомных систем методом разложения по зарядам. Preuss H. Die Berechnung der Potentialflächen von mehratomigen Systemen nach der Methode der Ladungsentwicklungen. «Molec. Phys.», 1964, 8, № 5, 441—454 (англ.)

Предложен метод расчета электронных энергий системы взаимодействующих атомов, основанный на разложении энергии в ряд по степеням заряда. Первым членом разложения является энергия объединенного атома, последующие члены разложения содержат в качестве коэф. степени межатомных расстояний. Метод иллюстрируется на примере расчета систем H_2 и H_2^+ .

Е. Никитин

☒

ф. 1965. 78

1964

 H_2 H_2^+

15 Б21. Расчет поверхности потенциальной энергии многоатомных систем методом разложения по зарядам. Preuss von H. Die Berechnung der Potentialflächen von mehratomigen Systemen nach der Methode der Ladungsentwicklungen. «Molec. Phys.», 1964, 8, № 5, 441—454 (англ.)

Предложен метод расчета электронных энергий системы взаимодействующих атомов, основанный на разложении энергии в ряд по степеням заряда. Первым членом разложения является энергия объединенного атома, последующие члены разложения содержат в качестве коэф. степени межатомных расстояний. Метод иллюстрируется на примере расчета систем H_2 и H_2^+ . Е. Никитин

x. 1965. 15

~~Министерство~~ ~~№ 2215~~ 3626 1964

Молек. пост. (H_2^+ , HeH^{2+} , H_2 , LiH^{2+} ,
 H_2^{2+} , HcH^+)

Резцова Н.,

Molec. Phys., 1964, 8, №3, 233-251 (рус.).

Die Σ - und $^3\Sigma$ -Energiekurven von
zweiatomiger System mit zwei Elektronen
(coll H_2^+) II

Резцова Н., 1964, 78/2 10 1966 г.р.к.

H_2
возбуждение
колебаний
состояния

XI-2238

1964

5 Д233. Возбуждение колебательных состояний молекулярного водорода быстрыми электронами.
Reich H. J., Schmoranzger H. Durch schnelle Elektronen angeregte Schwingungsterme des molekularen Wasserstoffs. «Phys. Letters», 1964, 9, № 2, 127—128 (нем.)

Поставлен опыт по возбуждению молекулярного водорода быстрыми электронами с энергией 15 кэВ. Исследован спектр излучения H_2 в области 900—5500 Å. Зарегистрированы сильные спектральные переходы с длинами волн 900—1650 Å. Показано, что при столкновении быстрых электронов с молекулярным водородом происходит интенсивное возбуждение первых колебательных уровней ($v=0, \dots, 8$) электронных состояний $2p^1\Sigma_u^+$, $2p^1\Pi_u$, $3p^1\Pi_u$. В. Е.

ф. 1965.5А

H₂

Quadrupole

1964

Quadrupole spectrum of hydrogen. D. H. Rank (Pennsylvania State Univ., University Park). *Mem. Soc. Roy. Sci. Liege, Collection in-8°* 9, 37-8(1964); cf. *CA* 59, 13448f. The relative intensities of the S(1) lines of the 1-0, 2-0, and 3-0 H quadrupole bands in the absorption spectra of up to 4.5 km. H at 3 atm. are 84, 14.5, and 1, resp. The 1-0 band line at a gas d. of 1.5 atm. has a half-intensity width of 0.6 doppler width, and shows no pressure broadening at 10 atm., in agreement with theory. J. H. Shaw

C. A. 1964 61 12 13884

H₂

1964

7 Д55. Разбиение гамильтониана и молекулярной энергии. Richardson James W., Pack A. K. Partitioning of Hamiltonians and molecular energies. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 3, 897—898 (англ.)

Энергия ΔE , необходимая для разделения квантовомеханич. системы на отдельные не взаимодействующие подсистемы (напр., энергия диссоциации молекулы на атомы), может быть вычислена двумя различными способами:

$$a) \Delta E = E_0 - E_1 - E_2 - \dots$$

и

$$b) \Delta E = \frac{\int \Phi (H_0 - H_1 - H_2 - \dots) \psi_0 d\tau}{\int \Phi \psi_0 d\tau}$$

5K

ф. 1965. 78



Здесь E_0 , H_0 и ψ_0 — энергия, гамильтониан и волн. ф-ция объединенной системы, а $E_1, E_2, \dots, H_1, H_2, \dots$ и Φ — энергии, гамильтонианы и произведение волн. ф-ций отдельных невзаимодействующих подсистем. Обращается внимание, что ф-лы а) и б) приводят к тождественным результатам только в том случае, когда ψ_0 и Φ — точные волн. ф-ции. При пользовании приближенными волн. ф-циями результаты различны. Расчет энергии диссоциации молекул H_2 , LiH , BH , HF и Li_2 с помощью известных в литературе приближенных волн. ф-ций показывает, что, как правило, ф-ла б) приводит к более точным результатам. При вычислении разности электронных энергий атома He и молекулы H_2 (а также Be и LiH) положение противоположное. С. Ветчинкин

A-295 1964

Ze (H_2 , D_2 , $H^{\dagger}Cl$, CO , $^{\dagger}Cl_2$, $NaCl$, OH ,
 CO_2 , CS_2 , HCN , DCN , $^{\dagger}ClCN$,
 $^{\dagger}B_2CN$, OCS , NNO , NH_3 , ND_3 ,
 H_2O , D_2O , H_2CO , D_2CO)

Poyama M., Oka T., Morino Y.

J. molec. Spectrosc., 1964, 13, n 2, 193-

- 215/any

Effect of vibration and rotation
on the intermolecular distance

Bu. Rus., 1965, 6092 W

+2

B.P. 3546-I

1964

H₂

Vareshni J. P., Shukla H.C.

(W.C., x.c.)

J. Chem Phys 1964,
40, 141, 250-