

CO

1990

1 Б1191. Переход  $C^2\Delta_r - A^2\Pi_i$  ионов  $^{12}\text{CO}^+$  и  $^{13}\text{CO}^+$ . Новый вращательный анализ и исследования изотопического эффекта. The  $C^2\Delta_r - A^2\Pi_i$  transition of the  $^{12}\text{CO}^+$  and  $^{13}\text{CO}^+$  ions: New rotational analysis and isotope effect studies / Cossart D., Cossart-Magos C. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 141, № 1.— С. 59—78.— Англ.

С использованием специального охлаждаемого жидк. азотом разрядного источника возбуждения измерены спектры испускания  $^{12}\text{CO}^+$  и  $^{13}\text{CO}^+$  связанные с переходом  $C^2\Delta_r$  ( $v=0-2$ )  $\rightarrow A^2\Pi_i$  ( $v \equiv 0-5$ ). Ионы  $\text{CO}^+(^2\Delta)$  получались при пеннинговской ионизации метастабильных молекул  $\text{CO}(a^3\Pi)$  атомами  $\text{Ne}(^3P)$ . На основании анализа изотопных сдвигов определена абс. колебат. нумерация полос. Выполнен анализ вращат. структуры полос 0—2, 1—1, 2—2 обеих изотопомеров. Значения

M.A.



X. 1991, N1



равновесных молек. постоянных  $T_e$ ,  $A_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) и  $R_e$  (в Å) состояния  $C^2\Delta$ : молекула  $^{12}\text{CO}^+$  — 63002,64; 48,32; 1,7; 1145,93; 33,98; 1,3418; 0,035; 1,3537; молекула  $^{13}\text{CO}^+$  — 63002,49; 48,01; 1,57; 1120,64; 32,48; 1,2839; 0,033; 1,3531. Получены и обсуждены данные, свидетельствующие об изменении электронной конфигурации молекулы  $\text{CO}^+(C^2\Delta)$  с ростом колебат. квантового числа.

В. М. Ковба

CO

1990

23 Б1213. Диодно-лазерная спектроскопия  $\alpha^3\text{P CO}$ .  
Diode-laser spectroscopy of  $\alpha^3\text{P CO}$  / Davies Paul B.,  
Martin Philip A. // Mol. Phys.— 1990.— 70, № 1.— С.  
89—106.— Англ.

В области между 1635 и 1780  $\text{см}^{-1}$  с помощью диодного лазера с использованием детектирования модуляции заселенности измерены спектры поглощения оксида углерода  $\alpha^3\text{P CO}$ , полученного в разряде переменного тока. Произведено отнесение колебательно-вращат. переходов как основной полосы, так и «горячих» полос. Анализ данных выполнен с помощью модельного гамильтониана. Б. С. Авербух

М. П.

X. 1990, N 23

CO

1989

Frisch M. J., Del Bene  
Janet E.

pacrēm Int. J. Quantum Chem.  
ser. n. Quantum Chem. Symp.  
1989. 23, 363-9.

(see  $N_2O$ ; III)

00

1989

Торшечков В. М.,

Рачков Т. М. и др.

Торск. ун-т. Торский, 1989.

м. п. 18с. Библиогр. 3 назв. Рус.

Деп. в ВИНТИ 21.03.89,

№ 1785- ● В 89.

(см.  $\mathcal{I}_2$ ; III)

CO

1989

Graham C., Pierrus J.,  
Raab R. E.

et. n.

Mol. Phys. 1989. 67,  
NY. C. 939-955.

(cell.  CO<sub>2</sub>; III)

CO

(OM 32778)

1989

Geo H., Karplus M.,

J. Chem. Phys., 1989, 91,  
N3, 1719-1733.

универсальное,  
неоптимальное  
вакуум

Basis set and polarization  
function effects on optimi-  
zed geometries and harmo-

nic frequencies at the second-  
-order Møller-Plesset  
perturbation level.



CO

1989

Hart D. J., Bourne O. L.

M. n. Chem. Phys. - 1989 - 133,  
~ 1. - C. 103-12

● (Cur NO, III)

CO

1989

5 Д92. О внутренних крыльях потенциалов основных состояний CO и F<sub>2</sub>. On the inner wings of the ground state potentials of CO and F<sub>2</sub> / Jenč F., Brandt B. A. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 1.— С. 13—18.— Англ.

Методом редуцированной потенц. кривой проведен анализ спектроскопич. постоянных молекул CO и F<sub>2</sub>. В качестве потенциала основного электронного состояния был выбран аналитич. потенциал РКР, включающий поправки высших порядков, рассчитанные методом возмущенного осциллятора Морзе. Показано, что этот потенциал не верен для основного состояния CO: при значениях энергии, составляющих 80% энергии диссоциации и выше, наблюдается пересечение редуцированных потенц. кривых CO и других двухатомных молекул. Для молекулы F<sub>2</sub> показано, что несоответствие редуцированной потенц. кривой этого соединения кривым молекул других галогенов вызвано небольшими ошибками в оценках спектроскопич. постоянных.

Библ. 25. С. А. Богданова

М.Н.

☒ (4)

ср. 1990, № 5

CO

1989

8 Б1039. О внутренних крыльях потенциалов основного состояния CO и F<sub>2</sub>. On the inner wings of the ground state potentials of CO and F<sub>2</sub> / Jenč F., Brandt B. A. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 1.— С. 13—18.— Англ.

На основе построения приведенных потенциальных кривых выявлены и обсуждены ошибки в лит. данных по внутр. крыльям потенциальных кривых основного состояния молекул CO и F<sub>2</sub>. Анализ показал, что наилучший из известных Пт для CO (Пт Хафейкера) неверен при значениях энергии  $E > 0,8 D_e$  ( $v > 40$ ); Пт для F<sub>2</sub> также имеет нерегулярные отклонения от приведенной потенциальной кривой в области  $E > 0,7 D_e$ .

Н. Ф. Степанов

М.П.

(1) 17

ж. 1990, № 8

CO

Om 32 579

1989

7 4 Б1206. Новые спектроскопические данные о герцберговских полосах молекулы  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ . New spectroscopic studies of the Herzberg bands of the  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  molecule / Кера Р. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 135, № 1.— С. 119—130.— Англ.

Зарегистрированы 9 полос (4 из них впервые) герцберговской системы ( $C'\Sigma^+ - A'\Pi$ ) молекулы  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ . Вычислены вращат. постоянные  $B_v$ ,  $D_v$  и равновесные постоянные —  $B_e$ ,  $\alpha_e$  для  $C'\Sigma^+$  и  $B_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $\gamma_e$ ,  $\delta_e$ ,  $D_e$ ,  $\beta_e$  — для  $A'\Pi$  (без учета сильно возмущенных колебат. уровней). Комбинирование линий системы Герцберга с линиями системы Ангстрема позволило вычислить разности соотв. вращат. параметров для  $C'\Sigma^+$  ( $v=0$ ) и  $B'\Sigma^+$  ( $v=0,1$ ). Исправлены начала полос для системы Герцберга. Равновесные колебат. постоянные  $A'\Pi$  состояния получены при исключении сильновозмущенных уровней. Для  $C'\Sigma^+$  получены новые значения равновесных

M. N.

X.1990, NY

колебат. постоянных на основе более точных измерений волновых чисел и сравнения по изотопам. В заключение представлен достаточно полный анализ возмущений  $A'\Pi$  состояния в обл.  $0 \leq v \leq 8$   $1 \leq I \leq 45$  по обоим компонентам  $\Lambda$ -удвоения близколежащими  $I^1\Sigma$ ,  $D^1\Delta$ ,  $e^3\Sigma^-$ ,  $d^3\Delta'$  и  $a'^3\Sigma^+$  состояниями.

Н. В. Кулакова



$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$

Om 32579

1989

III: 14607a New spectroscopic studies of the Herzberg bands of carbon monoxide ( $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ) molecule. Kepa, R. (At. Mol. Phys. Lab., Pedagog. Univ., Rzeszow, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 135(1), 119-30 (Eng). In the  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ , 9 bands belonging to the Herzberg system ( $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$ ) were photographed from conventional spectroscopy. Under high resolu. and using Th std. lines the (0-0)-(0-4) bands were rephotographed and the (0-5)-(0-8) bands with 363 lines were registered. After the rotational anal. of the bands the following consts. were detd.: (1) the rotational consts.  $B_v$ ,  $D_v$ , and the equil. consts.  $B_e$ ,  $\alpha_e$ , ... for the  $\text{C}^1\Sigma^+$  and  $\text{A}^1\Pi$  states; (2) the band origins  $\nu_0$  of this system; and (3) the vibrational consts.  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ , ... for both combining states. The complex anal. of the bands belonging to the Herzberg and Angstrom systems made it possible to more precisely carry out a relative characterization of the  $v = 0$  level of the  $\text{C}^1\Sigma^+$  state and the  $v = 0$  and 1 levels in the  $\text{B}^1\Sigma^+$  state as well as more complete anal. of the perturbations of the  $\text{A}^1\Pi$  state in CO.

( $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$ )

c.A. 1989, 111, 42

CO

1989

24 Б1042. Теоретическое изучение низколежащих состояний  $^1\Sigma^+$  и  $^1\Pi$  молекулы CO. II. Дипольные моменты переходов, силы осциллятора и излучательные времена жизни. Theoretical study of low-lying  $^1\Sigma$  and  $^1\Pi$  states of CO. II. Transition dipole moments, oscillator strengths, and radiative lifetimes / Kirby K., Cooper D. L. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 9.— С. 4895—4902.— Англ.

На основе волновых ф-ций состояний  $X^1\Sigma^+$ ,  $A^1\Pi$ ,  $2^1\Sigma^+$ ,  $3^1\Sigma^+$  и  $2^1\Pi$  молекулы CO, полученных ранее авторами (J. Chem. Phys.— 1987.— 87.— 424) при расчете методом конфигурац. взаимодействия в расширенном базисе слейтеровских ф-ций, определены ф-ции дипольного момента переходов между этими состояниями. Рассчитаны силы осциллятора и излучательные времена

M. N -

X. 1989, N 24

жизни. Отмечены значит. расхождения между результатами различных измерений этих величин, что затрудняет сопоставление теор. и эксперим. данных.

А. А. Сафонов



CD

O.M. 30850

1989

 $(D^1 \Delta - X^1 \Sigma)$ 

110: 104189z Analysis of  $D^1 \Delta - X^1 \Sigma^+$  transition in carbon monoxide observed by two-photon excitation. Kittrell, Carter; Garetz, Bruce A. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *Spectrochim. Acta, Part A* 1989, 45A(1), 31-40 (Eng). The  $D^1 \Delta - X^1 \Sigma^+$  transition in carbon monoxide was obsd. by 2-photon excitation with a frequency-doubled pulsed dye laser. The rotational structure of thirteen  $v'' = 0$  bands was analyzed: the  $v' = 6-12$  bands in  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ,  $v' = 7, 10$  and  $12$  in  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ , and  $v' = 7, 10$  and  $12$  in  $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ . Detailed assignments are presented, and from them the rotational and vibrational consts. of the  $D^1 \Delta$  state were detd. Using a single mass-reduced fit, mol. consts. were calcd. for all 3 isotopomers. Anal. of the 7-0 band of the  $I^1 \Sigma^+ - X^1 \Sigma^+$  transition is also given.

C.A. 1989, 110, N12

CO

1989

111: 14418q Theoretical study of low-lying  $1\Sigma^+$  and  $1\Pi$  states of carbon monoxide. II. Transition dipole moments, oscillator strengths, and radiative lifetimes. Kirby, Kate; Cooper, David L. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(9), 4895-902 (Eng). Transition dipole moments between 5 low-lying adiabatic states of CO, X  $1\Sigma^+$ , A  $1\Pi$ , 2  $1\Sigma^+$  (B  $1\Sigma^+$  and D'  $1\Sigma^+$ ), 3  $1\Sigma^+$  (C  $1\Sigma^+$  and C'  $1\Sigma^+$ ), and 2  $1\Pi$  (E  $1\Pi$ ), were obtained. Ab initio calcs. of the electronic energies and wave functions for these states were reported previously. The calcd. oscillator strengths and radiative lifetimes were compared with various measurements of these quantities. These comparisons are complicated by the large discrepancies among the exptl. measurements, apparent even in the most recent studies.

НЛЕДНННН  
 ЗАКМРОН.  
 СОСТАВН.,  
 МЕРИМ-  
 ТРАЧЕМ

С.А. 1989, III, N 2

CO

1989

Kötzian Manfred,  
Rösch Notker, et al.

u. n. Chem. Phys. Lett. 1989.  
160, n2. C. 168-174.

(coll.  MF<sup>+</sup>; III)

CO

1989

Samson James A. R.,  
Yin Lifeng.

cerenue

noncousen.

J. Opt. Soc. Am. B: Opt.  
Phys. 1989, 6 (12), 2326 -  
-33.

(Cer. ● H<sub>2</sub>; III)

CD

Qm 32606

1989

111: 14482f Optogalvanic observation of the carbon monoxide  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  transition. Sekine, Shigeyuki; Adachi, Yukio; Hirose, Chiaki (Res. Lab. Resour. Utilization, Tokyo Inst. Technol., Yokohama, Japan 227). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(10), 5346-8 (Eng). The rotational structure of the  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  (0-0) band was resolved, and the values of spectroscopic parameters were derived as  $B'_0 = 1.5549 \pm 0.0068 \text{ cm}^{-1}$ ,  $r_0 = 0.1257 \pm 0.0003 \text{ nm}$ , and  $r_{00} = 15891.6 \pm 0.6 \text{ cm}^{-1}$ . The observation of the  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  (0-0) band supports S. Ogawa and M. Ogawa's (1974) assignment that the  $W^1\Pi$  state is the 1st member of the  $n\sigma$  Rydberg series converging to the  $A^2\Pi_i$  state of  $CO^+$ . The  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  (1-0) band was not obsd. with expected intensity, and the presence of dissociative perturbation was suggested.

(W<sup>1</sup> $\Pi$ -B<sup>1</sup> $\Sigma$ )c.A. 1989, 111, N2

CO

DM 32606 1989

24 Б1394. Оптико-гальваническое наблюдение перехода  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  в CO. Optogalvanic observation of the CO  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  transition / Sekine S., Adachi Y., Hirose Ch. // J. Chem. Phys.—1989.—90, № 10.—С. 5346—5348.—Англ.

Методом оптогальванич. спектроскопии разрешена вращат. структура полосы 0—0 перехода  $W^1\Pi-B^1\Sigma^+$  молекулы CO. В кач-ве источника возбуждения использовался полый катод. В спектре наблюдались только линии R и Q ветвей. Получены след. молек. постоянные:  $\nu_{00}=15891,6$  см<sup>-1</sup>,  $B_0'=1,5549$  см<sup>-1</sup>,  $T_0(W)=102807,8$  см<sup>-1</sup>,  $r_0'=1,25$  А. Наблюдение этого перехода подтвердило отнесение состояния  $W^1\Pi$  к первому члену  $ns\delta$  — ридберговской серии, сходящейся к состоянию  $A^2\Pi$ ; иона CO<sup>+</sup>. Из-за взаимодействия состояния  $W^1\Pi$  с диссоциирующими состояниями мала интенсивность полосы 1—0. Результаты согласуются с данными, полученными ранее при исследовании спектров испускания. Г. В. Чертихин

М.П.

X. 1989, N 24

12 (16)

(OM 32110)

1989

Winniewisser G., Armstrong  
(Eds.)

crekmp The Physics and Chemistry of  
eb-ba Interstellar Molecular Clouds  
pacrem mm and Sub-mm Observations  
in Astrophysics. Proceedings  
of a Symposium Held at  
Zermatt, Switzerland

22-25 September 1988 to Commemorate the 600th Anniversary of the University of Cologne and the 20th Anniversary of the Bornenrat Observatory.



CO

1989

Wong M. W., Nobles R. H.,  
et al

et al.

J. Chem. Phys. 1989, 91,  
NS. C 2971-2979.

(Cur.  N<sub>2</sub>; III)

CO

1990

5 Д115. Изучение методом молекулярных орбиталей ССП- $X_\alpha$ -РВ ридберговских состояний окиси углерода. An SCF- $X_\alpha$ -SW molecular orbital study of the Rydberg states of carbon monoxide / Z. phys. Chem. (DDR).— 1990.— 271, № 5.— С. 973—977.— Англ.

Методом ССП- $X_\alpha$ -РВ для молекулы окиси углерода выполнены расчеты серии ридберговских состояний, сходящейся к первому потенциалу ионизации. Найдены значения энергий термов, а также величины квантовых дефектов для  $n=3-9$ . Проведен детальный анализ полученных результатов в сравнении с имеющимися эксперим. данными. Отмечено, что конечный размер радиуса внешней сферы (который в расчетах брался равным  $100 a_0$ ) начинает существенно сказываться на точности результатов расчетов для ридберговских уровней с  $n>7$ . Сделан вывод о том, что метод ССП- $X_\alpha$ -РВ является достаточно точным для проведения расчетов энергетич. уровней молекулярных систем с целью последующей интерпретации их спектров поглощения в УФ-диапазоне.

А. И. К.

М.П.

ср. 1991, № 5

CO

1990

Bag M., Dutt R.

hommes.  
krub.

J. Phys. B: At., Mol.

Opt. Phys. 1990, 23 (18),  
3075-82.

( cer.  $I_2$ ; III)

CO

Om 35690

1990

24 Б1244. Метастабильное состояние CO в Ar-матрицах при 11 эВ. A metastable state of CO in Ar matrix at about 11ev / Bahrtdt J., Nahme H., Schwentner N. // Chem. Phys.— 1990.— 144, № 2.— С. 273—278.— Англ.

Изучены спектры возбуждения CO, изолир. в аргоновых матрицах (содержание CO  $\sim 0,03-1\%$ ). В области 10,7—11,1 эВ лежит метастабильное квинтетное состояние с временем жизни 15 Мс. Это состояние заселяется безызлучательно после возбуждения Ридбергова состояния, и распадается безызлучательно в смешанное  $a^3\Sigma^+ - b^3\Sigma^+$  состояние, фиксируемое по фосфоресценции. Дальнейшая безызлучат. релаксация из смешанного состояния медленна и более 50% общей заселенности излучается в низкие  $a'^3\Sigma^+$  и  $a^3\Delta$  состояния.

Г. В. Чертихин

М.П.

X: 1991, N 24

CO

[Om. 34627]

1990

unmen-  
cubmen.

Dang-Nhu M., Allegri-  
ni M., et al.,

J. Mol. Spectrosc. 1990,  
141, N 2, 348-350.

Intensities of the CO stretch  
Band of CH<sub>3</sub>OH at 9.7  $\mu$ m

CO

Am. 34263

1990

113: 87291u Diode-laser spectroscopy of a  $^3\Pi$  carbon monoxide. Davies, Paul B.; Martin, Philip A. (Dep. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *Mol. Phys.* 1990, 70(1), 89-106 (Eng). Diode-laser absorption spectra of a  $^3\Pi$  CO between 1635 and 1780  $\text{cm}^{-1}$  were measured in an a.c. discharge using population modulation detection, and assigned to vibration-rotation transitions of the fundamental and 1-2, 2-3, 3-4 hot bands in the  $\Omega = 0, 1$  and 2 fine structure states. The anal. was based on the  $R^2$  model hamiltonian of C. Effantin et al. (1982) and the  $v = 0-4$  data were fitted simultaneously with radio-frequency and microwave measurements, and with the perturbation by the  $a'^3\Sigma^+$  ( $v = 0$ ) level included explicitly.

 $a'^3\Pi$ , u.n.

C.A. 1990, 113, N570

CO

OM 33782 · 1990

19 B1181. Флуоресцентное время жизни электронного состояния  $D'^1\Sigma^+$  CO. Fluorescence lifetime of the  $COD'^1\Sigma^+$  electronic state / DeLeon R. L. / J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 3.— С. 1521—1522.— Англ.

Экспериментально измерено время жизни ФЛ ( $\tau$ ) состояния  $D'^1\Sigma^+$  молекулы CO. Поскольку минимум потенциальной кривой состояния  $D'$  существенно (на 0,5 Å) сдвинут в область больших межъядерных расстояний по сравнению с состоянием  $X^1\Sigma^+$ , значит, величины факторов Франка—Кондона имеют только переходы высоких колебат. уровней основного электронного состояния. Авторами использовалась следующая схема заселения высоких колебат. уровней состояния  $X^1\Sigma^+$ . Смесь CO и Ar (давл. 18—60 мм) пропускалась через оптич. ячейку, где под действием излучения мощного CO-лазера непосредственно заселялись уровни  $v_x'' \leq 13$ . Далее, за счет обмена колебат. энергией между колебательно-возбужденными молекула-

M.H.

X. 1990, ~19

ми СО заселялись уровни вплоть до  $\nu_X'' = 40$ . ФЛ  
 возбуждалась импульсным лазером на красителе с уд-  
 воением частоты в области переходов  $D', \nu' = 2 \leftarrow X, \nu'' = 33$  (293,8 нм) или  $D', \nu' = 3 \leftarrow X, \nu'' = 32$  (289,1 нм).  
 Для уровня  $D', \nu' = 2$  значение  $\tau = 3,87$  нс.  $\tau$  для  
 уровня  $\nu' = 3$  несколько меньше (значение не приво-  
 дится).

В. М. Ковба





CO

[Om 34 924]

1990

Domke M., Xue C., et al.,

Chem. Phys. Lett. 1990,  
173, N1, 122-128

Carbon and oxygen  
K-edge photoionization of the

CD molecule.

CO

1990

( 112: 128161b Linewidths in the pure rotational Raman spectra of hydrogen chloride and carbon monoxide and of nitrogen and carbon monoxide perturbed by hydrogen chloride. Edwards, H. G. M.; Long, D. A.; Sherwood, G. (Sch. Chem. Chem. Technol., Univ. Bradford, Bradford/West Yorkshire, UK BD7 1DP). *J. Raman Spectrosc.* 1990, 21(1), 65-9 (Eng). Pressure-broadening coeffs.,  $\sigma_p$ , were detd. for self-broadening of pure rotational Raman lines of CO and for pure rotational Raman lines of HCl, and CO and N<sub>2</sub> perturbed by HCl at 293 K. The results are discussed and compared with calcd. and exptl.  $\sigma_p$  values in the literature.

check

(+2) ~~112~~ HCl, N<sub>2</sub>

C.A. 1990, 112, N14

CO

[от 34717]

1990

Браилов А. Ю., Мезверев Э. С.,  
Месухин А. В.,

попеч.  
кривые,  
расчет.

Оптика и спектроскопия,  
1990, 69, № 5, 554-557.



CO

(AM 34492)

1990

Fernández F.M., Ogilvie

J.F.

факторы  
Франк-  
Кондона

Chem. Phys. Lett., 1990,  
169, N4, 292-296.

Franck-Condon Factors  
for diatomic molecules.

CO

1990

113: 65560d Measurements of electron-impact-ionization cross sections of nitrogen, carbon oxides, carbon sulfides ( $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}$ ,  $\text{CS}_2$ ), diatomic sulfur, and metastable nitrogen. Freund, Robert S.; Wetzel, Robert C.; Shul, Randy J. (AT and T Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *Phys. Rev. A* 1990, 41(11), 5861-8 (Eng). Electron-impact-ionization cross sections to form the parent ions of  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CS}$ ,  $\text{S}_2$ , and  $\text{CS}_2$  have been measured with the same app. used recently to measured ionization cross sections of 27 atoms with an abs. accuracy of  $\pm 10\%$ . The ionization cross sections for  $\text{CS}$ ,  $\text{S}_2$ , and  $\text{CS}_2$  are measured here for the first time to our knowledge. The results for  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ , and  $\text{CO}_2$  generally agree with previous measurements. A remeasurement of the ionization cross sections of metastable  $\text{N}_2$  improves upon our previous measurement.

are there  
noisy at all

(#3) ☒

C.A. 1990, 113, N 8

CD

DM. 35806

1990

Gothe M.C.,

Acta Univ. Upsal. : Compr.  
Summ. Uppsala Diss. Fac. Sci.  
1990, N292, 1-30

Inner Valence ~~study of the~~  
~~5s correlation~~ ● ~~satellite~~

Studies of  $N_2$ , CO and  $O_2$ .



CO

1990

Б 12 Д137. Основные резонансные состояния Хартри — Фока для молекул CO / Игава Акира // Сорюси-рон кэнкю.— 1990.— 80, № 5.— С. E61—E65.— Яп.

М.П.



Ф. 1990, N 12.

CO

(от 33928)

1990

Цомих Ю. З., Яковлевский С. П.

Оптика и спектроскопия,  
1990, 68, N 2, 288-293.

Возбуждение состояния  $A^2\Pi$   
иона  $CO^+$  при немиэговской  
ионизации ● колебательно —

возбужденных молекул CO  
атомарный водород в состоянии  
2<sup>1</sup>, 3<sup>2</sup>.

13 C<sup>16</sup>O

DM. 35134

1990

114: 217059h Analysis of the 0-7 band of the Herzberg system of carbon monoxide (<sup>13</sup>C<sup>16</sup>O). Kepa, R.; Para, A.; Rytel, M.; Janjic, J. D. (At. Mol. Phys. Lab., Pedagog. Univ. Rzeszow, PL-35-310 Rzeszow, Pol.). *Acta Phys. Hung.* 1990, 68(3-4), 205-14 (Eng). The so far unknown 0-7 band of the Herzberg system (C<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>-A<sup>1</sup>Π) in the <sup>13</sup>C<sup>16</sup>O mol. was registered by means of the photog. method. The rotational anal. made it possible to det. the B<sub>v</sub> and D<sub>v</sub> rotational consts. for both combined states as well as the *v*<sub>0</sub> band origin. The obsd. and calcd. isotope shift of the 0-7 band origins for the <sup>13</sup>C<sup>16</sup>O and <sup>12</sup>C<sup>16</sup>O mols. as well as the obsd. and predicted perturbations of the *v* = 0-7 levels of the A<sup>1</sup>Π state in <sup>13</sup>C<sup>16</sup>O were confronted. A new evaluation of relevant band intensities for all so far known Herzberg bands is also proposed.

C<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>-A<sup>1</sup>Π(0-7)

M.A.

C.A. 1991, 114, N22

CO

1990

Klobukowski M.,

Dingle T.W. et al.

pacze"ci

u.n.,

Ti

Theor. Chim. Acta 1990,

77 (3), 191-205.

(see  C<sub>2</sub>; iii)

CO

1990

112: 205008m Lifetimes of the A  $^1\Pi$  and low-lying triplet states of CO. Le Floch, Andre; Rostas, Joelle; Rostas, Francois (Dep. Phys., Univ. Tours, 37200 Tours, Fr.). *Chem. Phys.* 1990, 142(2), 261-78 (Eng). The available exptl. data concerning the lifetimes of the A  $^1\Pi$ ,  $a' ^3\Sigma^+$ ,  $e ^3\Sigma^-$  and  $d ^3\Delta$  is reassessed in the light of a recently completed perturbation anal. of the  $v = 0-4$  levels of the A  $^1\Pi$  state of CO. This work provides an extensive set of spin-orbit and rotation-electronic parameters characterizing the interactions of the A  $^1\Pi$  state with adjacent triplet and singlet states. Some of the resulting mixing coeffs. are used to analyze the available lifetime measurements both of short-lived levels, of essentially  $^1\Pi$  character, and long-lived triplet levels. In several cases, the intrinsic lifetimes of the A  $^1\Pi(v)$  and of the perturbing triplet state are detd. The strong  $J$  dependence of lifetimes are perfectly reproduced by the model and predictions are made for yet unmeasured levels.

M.A. 8  
CO model  
A  $^1\Pi$ ,  $a' ^3\Delta$ ,  
 $e ^3\Sigma^-$ ,  $d ^3\Delta$

C.A. 1990, 112, N22

CO

077. 25 159.

1990

11 B1202. Гетеродинные измерения частот CO и OCS ниже  $2100\text{ cm}^{-1}$ . Heterodyne frequency measurements of CO and OCS beyond  $2100\text{ cm}^{-1}$  / Maki A. G., Wells J. S., Jennings D. A. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 144, № 1.— С. 224—229.— Англ.

Методом гетеродинирования с использованием линии излучения перестраиваемого диодного лазера по отношению к излучению CO<sub>2</sub>-лазера измерены спектры поглощения полосы  $04^00-00^00$  OCS вблизи 62—64 ТГц и основной колебат. моды  $\nu=1^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  и изотопич. образцов  $^{13}\text{CO}$ ,  $\text{C}^{18}\text{O}$ ,  $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$  вблизи 60—65 ТГц с точностью около 10 МГц. Анализ спектров выполнен для CO с учетом 17 спектроскопич. постоянных Данхемана и для OCS с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения. На основе полученных эксперим. данных определены калибровочные волновые числа для переходов основной полосы  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  в области частот 1993—2254  $\text{cm}^{-1}$  и полосы  $04^00-00^00$  OCS в области частот 2081—2143  $\text{cm}^{-1}$  с точностью около 0,000020  $\text{cm}^{-1}$ .

С. Н. Мурзин

OCS

М.А.

(4) X

X. 1991, N 11

CD

[Om. 34 314]

1990

Musket F., Loftley T.P.,

Chem. Phys. Lett.,

1990, 165, N 6, 477-486

Resonance-enhanced sum-  
frequency generation of XUV



radiation in CO.



CO

[Om. 35277]

1990

Merkt F, Letley T.P.,

J. Chem. Phys. 1990, 93,  
N 3, 1540 - 1545

State selective  ive doubly  
enhanced sum - frequency -

cy mixing in CD.

~~of 1990, N/A.~~

CO

1990

Mintmire J.W.

Int. J. Quantum Chem.

Quantum Chem. Symp.

1990, N24, C, 851-857.

смысл  
мгновенно

(Ces. ●  $\text{Li}_2$ , III)

CO

1990

Мусаев Д.Т., Яковлев В.В.  
и др.

сер. н. Молекуляр. структура.  
(обзор) Иваново, 1990. с. 18-24.

(сер.  CN<sup>-</sup>; III)

1990

1 Б1043. Теоретические функции дипольного момента состояний  $a^3\Pi$  и  $a'^3\Sigma^+$  монооксида углерода. Theoretical dipole moment functions involving the  $a^3\Pi$  and  $a'^3\Sigma^+$  states of carbon monoxide / Peterson Kirk A., Woods R. Claude // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 7, — С. 5029—5036.— Англ.

Различными неэмпирич. методами с использованием больших наборов гауссовых орбиталей рассчитаны потенциальные кривые и ф-ции дипольного момента состояний  $a^3\Pi$  и  $a'^3\Sigma^+$  молекулы СО. Использованы многоконфигурац. метод ССП в полном активном пространстве (МК ССП ПАП); метод конфигурац. взаимодействия с одной исходной конфигурацией, учитывающий одно- и двукратно возбужденные конфигурации, как с поправкой на размер базиса (КВ 1+2,  $p$ ), так и без нее (КВ 1+2); квадратичный метод КВ 1+2 и квадратичный метод КВ 1+2, учитывающий трехкратно возбужденные конфигурации; первая версия метода связанных электронных пар (СЭП-1). Ф-ция дипольного

X.1992, N1

момента состояния  $a^3\Sigma^+$  методами КВ 1+2; КВ 1+2,  $\rho$  и МК ССП ПАП рассчитана впервые. Методами КВ 1+2 и МК ССП ПАП рассчитан также электронный момент перехода между двумя изученными состояниями. Наиболее точные из полученных спектроскопических постоянных удовлетворительно совпадают с их эксперим. значениями. В. Б. Павлов-Веревкин

<sup>13</sup>C<sup>18</sup>O

Om 35142

1990

114: 14263x The first negative ( $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ ) system of carbon-13- and oxygen-18-labeled carbon monoxide ion ( $1+$ ). Prasad, C. V. V.; Reddy, S. Paddi (Dep. Phys., Memorial Univ. Newfoundland, St. John's, NF Can. A1B 3X7). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 144(2), 323-33 (Eng). The first neg. ( $B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ ) system of the mol. ion  $^{13}\text{C}^{18}\text{O}^+$  excited in the cathode glow of a hollow-cathode discharge tube was recorded in the spectral region 2110-2755 Å. Of the 22 bands obsd. with  $v' = 0$  to 4 and  $v'' = 0$  to 7, the rotational structure of 13 bands was analyzed. The spin splitting of the spectral lines, which is a characteristic of a  $^2\Sigma^+ - ^2\Sigma^+$  transition, was obsd. in several bands. The mol. consts. obtained from the anal. of the individual bands of this system were first merged together by the method of correlated least-squares fit. The resulting consts. were then merged with those obtained from recent studies of the comet-tail ( $A^2\Pi_i - X^2\Sigma^+$ ) system [C. V. V. Prasad and S. P. Reddy, (1989)] and the Baldet-Johnson ( $B^2\Sigma^+ - A^2\Pi_i$ ) system [S. P. Reddy and C. V. V. Prasad, (1989)] of  $^{13}\text{C}^{18}\text{O}^+$ , and a precise set of mol. consts. for the X, A, and B states was obtained.

$B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$

M.A.

C.A. 1991, 114, N2



CO

1990

/ 112: 87410w Molecular K-shell photoionization cross sections in the relaxed-core Hartree-Fock approximation. Schirmer, J.; Braunstein, M.; McKoy, V. (Arthur Amos Noyes Lab. Chem. Phys., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91125 USA). *Phys. Rev. A* 1990, 41(1), 283-300 (Eng). The relaxed-core Hartree-Fock (RCHF) approach to the calcn. of K-shell photoionization cross sections was analyzed and applied to K-shell single-hole ionization in CO. A direct method based on the Schwinger variational principle and single-center-expansion techniques was used to generate the continuum orbitals assocd. with the motion of the photoelectron in the direct and exchange potential of the relaxed ion. A method is presented for evaluating the  $N$ -electron transition moment, a step that has posed a considerable computational obstacle due to the lack of orthogonality between the frozen and relaxed orbitals in the initial and final  $N$ -electron states, resp. Besides being practical and efficient, this formulation establishes the distinction between the direct and conjugate part of the transition moment, introducing bound-free dipole and overlap integrals, resp. Whereas for large photoelectron energies, the conjugate terms can be neglected, they become important near threshold, contributing, e.g.,  $\leq 30\%$  to the 1s cross sections in CO. An anal. by means of low-order perturbation

фотоионизация -  
задача

С.А. 1990, 112, N 10

theory shows that the RCHF model correctly describes the effect of ionic relaxation, i.e., essentially the screening of the 1s hole by the valence electrons. As a consequence the  $\sigma^*$  shape resonance is substantially shifted to higher energy and broadened compared with the frozen-core Hartree-Fock picture where the more attractive unscreened 1s-hole potentials are used. The remaining discrepancies with the exptl. results are attributed to the neglect of target polarization in the RCHF model.

12[160

[OM. 33085]

1990

Schneider M., Wells J.S.,  
Maxi A.B.,

J. Mol. Spectrosc. 1990,  
139, N2, 432-438

Heterodyne ● Frequency

Measurements of  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$   
Laser Transitions near  
 $2050\text{ cm}^{-1}$ .

CO

1990

⇒ 10 Б1034. Исследование ридберговских состояний моноксида углерода методом молекулярных орбиталей ССП- $X\alpha$  РВ. An SCF- $X\alpha$ -SW Molecular orbital Study of the Rydberg States of carbon monoxide / Senn P. // Z. Phys. Chem. (DDR).— 1990.— 271, № 5.— С. 973—977.— Англ.

и Методом ССП  $X\alpha$  РВ в приближении перекрывающихся атомных сфер рассчитаны значения термов, соотв. ридберговским состояниям молекулы CO. Вычисленные энергии термов соответствовали изменениям главного квантового числа  $n$  от 3 до 9. Анализ полученных значений энергий в рамках приближения квантового дефекта позволил определить величины квантовых дефектов для различных состояний и сопоставить их с эксперим. данными. При расчетах ридберговских состояний использовалась поправка Лэттера к ПТ во внешней области молекулы. Показано, что энергии ридберговских состояний, рассчитанные методом  $X\alpha$ -В, являются достаточно точными и могут быть использованы для отнесения оптич. переходов в области вакуумного ультрафиолета.

И. А. Тополь

Ридберг.  
состояние

X. 1991, N 10

CD

[OM 34352]

1990

Tadjeddine M., Flament  
J. P. et al.

J. Chim. Phys. Et. Phys. Chim.  
Biol., 1990, 87, NS, 989-1000.

Rovibronic corrections, temperature and electric field

dependence of polarizabilities  
in  $\text{LiH}$  and  $\text{CO}$ .

<sup>13</sup>CO

(Om 34890)

1990

/ 113: 200400u Rotational far infrared spectrum of carbon-13=  
labelled carbon monoxide. Zink, L. R.; De Natale, P.; Pavone, F.  
S.; Prevedelli, M.; Evenson, K. M.; Inguscio, M. (Eur. Lab.  
Nonlinear Spectrosc., I-50125 Florence, Italy). *J. Mol. Spectrosc.*  
1990, 143(2), 304-10 (Eng). The pure rotational spectrum of <sup>13</sup>CO  
between 0.66 and 3.3 THz was measured with a tunable far IR  
spectrometer. Revised values for  $B_0$ ,  $D_0$ , and  $H_0$  were obtained with a  
1 $\sigma$  std. deviation of 50 kHz. Addnl. measurements were performed  
with a Fourier transform spectrometer, and a 1 MHz ( $3.3 \times 10^{-5}$   
cm<sup>-1</sup>) measurement accuracy is demonstrated with this device. The  
rotational spectrum from  $J'' = 0$  to  $J'' = 30$  is calcd. and gives the  
frequencies with a 1 $\sigma$  uncertainty of less than 120 kHz.

braun-  
cnekmp,  
 $B_0, D_0, H_0$

C.A. 1990, 113, N22



CO

DM 34890

1990

10 B1281. Вращательный спектр  $^{13}\text{CO}$  в длинноволновой инфракрасной области. Rotational far infrared spectrum of  $^{13}\text{CO}$  / Zink L. R., De Natale P., Pavone F. S., Prevedelli M., Evenson K. M., Inguscio M. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 143, № 2.— С. 304—310.— Англ.

В далекой ИК-области (0,66—3,3 ТГц) измерен чисто вращат. спектр поглощения ( $J''=5-29$ ) молекулы  $^{13}\text{CO}$ . Использовался перестраиваемый лазерный спектрометр на базе двух  $\text{CO}_2$ -лазеров с фиксир. частотами ( $\nu_1$  и  $\nu_2$ ) и МВ-сканируемого источника ( $\nu_3$ ), излучение к-рых нелинейно смешивалось с помощью диода металл—изолятор—металл,  $\nu=(\nu_1-\nu_2)\pm\nu_3$ . Дополнит. измерения выполнены с использованием фурье-спектрометра. Значения (в МГц) полученных вращат. постоянных  $^{13}\text{CO}$ - ( $X^1\Sigma^+, V=0$ ):  $B=55101,0128$ ,  $D=0,1676860$ ,  $H=1,505\cdot 10^{-7}$ . Рассчитан вращат. спектр  $J+1\leftarrow J (\leq 30)$   $^{13}\text{CO}$ .

В. М. Ковба

М.П.

X. 1991, N 10