

1978



CO

Ommuck 447

1948

Ackermann R. J., Raab E. C.

Reo. int. Glauco, Temp.

M.H.

Refract., Fe, 1948, vol. 15,
pp 259-80.

10

[DM-36507]

1978

Asbrink L., Fiedk C.,
et al.,

Chem. Phys., 1978, 27,
159-168.

спектр
возбужд.
и  спектр



1978
3 Б77. Об аппроксимации функций потенциальной энергии двухцентровых систем. Barnsley Michael F., Aguilar Jacques G. On the approximation of potential-energy functions for two-center systems. «Int. J. Quant. Chem.», 1978, 13, № 5, 641—677 (англ.; рез. франц., нем.)

Проанализированы способы интерполяции функций потенциальной энергии $E(R)$ двухатомных систем. В кач-ве исходной информации предполагается знание либо значений энергии в нескольких точках на потенциальной кривой, либо значений функции и ее пр-ных в одной точке. Основу предлагаемого подхода составляет утверждение, что кривые $F(R) = F^2 E(R)$ м. б. получены при рассмотрении проблемы собственных значений оператора, линейно зависящего от R . Детально проанализированы св-ва кривых $F(R)$. Предложены различные способы построения оценок для $F(R)$ с помощью вариационного метода. Приведены примеры интерполяции потенциальных кривых молекул CO , HF , H_2 , HeH .
А. В. Немухин

CO
HF
H₂
HeH

кривые
потенциальной
энергии

(73) ☒

2. 1979, № 3

CO

1978

Behrens P.C.

см. наст.
двух
чел

Y. Less. - Common Met.
1978, 58 (1), 47-54

(см. Карбонильный мет. I)

CO

1978

9 Д425. Двухфотонное возбуждение вакуумного УФ-спектра поглощения молекул CO, свободное от доплеровского уширения. Bernheim R. A., Kittrell C., Viers D. K. Doppler-free two-photon excitation of the vacuum ultraviolet absorption spectrum of CO. «Adv. Laser Chem. Proc. Conf., Pasadena, 1978». Berlin e. a., 1978, 343—346 (англ.)

у.ф. спектр

В области $65\,950\text{--}66\,250\text{ см}^{-1}$ с высоким разрешением получен спектр газообразных молекул CO. Установлено, что наблюдавшийся спектр относится к системе переходов $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ и возбуждается в результате двухфотонного поглощения излучения перестраиваемого лазера на красителе. Структура спектра отождествлена. М. Т.

р. 1979, № 9

CO

оттиски 6849

1978

2 Д359. Двухфотонное лазерное возбуждение CO в вакуумной УФ-области спектра без доплеровского уширения. Bernheim R. A., Kittrell C., Veirs D. K. Doppler-free two-photon laser excitation of the vacuum ultraviolet absorption spectrum of CO. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 3, 1308—1309 (англ.)

лазерное
возбужд.

С помощью импульсного перестраиваемого лазера на красителе (ширина полосы $0,03 \text{ см}^{-1}$) получен спектр двухфотонного возбуждения CO без доплеровского уширения в вакуумной УФ-области (переход $A^1\Pi - X^1\Sigma$). Для калибровки по длинам волн использован спектр возбуждения флуоресценции J_2 в видимой области, который регистрировался одновременно со спектром возбуждения CO. Положение пелос в спектре CO определено с точностью $0,012 \text{ см}^{-1}$. Отмечено, что эта точность далеко не является предельной для данного метода.

В. С. Иванов

Р. 1979.2

CO

Виттис 6849

1978

6 Б161. Двухфотонное лазерное возбуждение вакуумного ультрафиолетового спектра поглощения в отсутствие доплеровского уширения. Bernheim R. A., Kittrell C., Veirs D. K. Doppler-free two-photon laser excitation of the vacuum ultraviolet absorption spectrum of CO. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 3, 1308—1309 (англ.)

Спектр

Измерен спектр двухфотонного лазерного возбуждения CO в вакуумной УФ-области (переход $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$). Излучение перестраиваемого лазера на красителе (видимая область) преобразовывали во вторую гармонику после прохождения кристалла дигидрофосфата калия и пропускали в прямом и обр. направлениях (для устранения доплеровского уширения) через оптич. ячейку содержащую окись углерода. Регистрировали интенсивность ВУФ-флуоресценции CO из состояния $A^1\Pi$, как функцию перестраиваемой частоты возбуждения. Калибровку исходной частоты излучения лазера осуществляли по спектру флуоресценции йода одновременно с измерением спектра CO. Полученный спектр хорошо согласуется со спектром поглощения высокого разрешения, измеренным обычным способом.

X. 1979, N6

В. М. Ковба

10

1978
Boča Roman, et al.

Theor. chim. acta. 1978,
50, N1, 11-19.

ссыл. по числ.
равновесия.
расстояни.

ссыл. LiH - III

CO

Выпущен 6155

1978

12 Д408. Составляющие высших порядков коэффициентов Данхэма: приложение к расчету основного состояния CO. Bouanich J. P. Higher-order contribution to the Dunham coefficients: application to the ground state of CO. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 19, № 4, 381—386 (англ.)

Уточнены значения коэф. Данхэма Y_{ij} путем учета составляющих 8-го и в некоторых случаях 10-го порядков. С помощью данной методики проведен анализ основного электронного состояния молекулы $^{12}\text{C}^{13}\text{O}$. Отмечено, что определение достоверных значений коэф. a_i ($i > 6$) в выражении для потенц. энергии на основе новейших эксперим. спектроскопич. данных не представляется возможным.

Резюме

XIV-9215



расчет
основн.
состояния

ф. 1978, N 12

$^{13}\text{C}^{16}\text{O}$

Received 6155
XIV-9215

1978

(Y_{ij})

88:2001058 Higher-order contributions to the Dunham coefficients; application to the ground state of carbon monoxide. Bouanich, J. P. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris Sud, Orsay, Fr.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1978, 19(4), 381-6 (Eng). The Dunham coeffs. Y_{ij} were expanded through the 8th-order contributions and for some coeffs. through the 10th-order contributions. The formation obtained was applied to an anal. of the ground electronic state of $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$. From the most recent spectroscopic data, it was not possible to deduce reasonable values for the potential energy coeffs. a_i with $i > 6$.

C.A. 1978, 88, 426

кн. 6155

1948

CO

19 Б18. Вклады высших порядков в коэффициенты Данхэма. Приложение к основному состоянию CO. Bouanich J. P. Higher-order contributions to the Dunham coefficients: application to the ground state of CO. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1978, 19, № 4, 381—386 (англ.)

Приведены разложения в ряды теории возмущений вплоть до членов 10-го порядка коэф. v_{ij} ряда Данхэма для колебательно-вращательных уровней энергии. Коэф. v_{ij} выражены через параметры ангармоничности a_i потенциальной функции и спектроскопич. постоянные B_1 и ω_1 . С использованием новейших эксперим. данных о v_{10} и v_{11} для основного электронного состояния молекулы CO рассчитаны соотв. значения па-

раметров $a_0, a_1, \dots, a_6$ и постоянных B_1 и ω_1 . Полученные величины м. б. использованы для вычисления остальных коэф. v_{ij} . Отмечено, что оценка параметров a_i при $i > 6$ затруднительна из-за неопределенностей в эксперим. данных и приближенного характера теории, лежащей в основе данхэмовских разложений.

А. В. Немухин

исследован
состоянии.

1948-118

X. 1948, N 19

CO

1976

Broyer M., et al

Adv. Atom. and Mol. Phys.

Vol. 12. New York e.a., 1976,
165-213.

сбор:
онлайн
нарака

CO

Оттиски 6373

1978

кв. мех.
рассет, у.

1 Д130. Орбитальные вклады в энергии релаксации, сопровождающей ионизацию остовов в ряду CO, CON^+ , HCO^+ и H_2CO . Clark David T., Cromarty Benjamin J., Sgamellotti Antonio. Orbital Contributions to Relaxation Energies Accompanying core Ionizations in the Series CO, CON^+ , HCO^+ and H_2CO . «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, 74, № 6, 1046—1055 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное сопротивление CO (I), CON^+ (II), H_2CO (III), HCO^+ в линейной (IV) и изогнутой V геометрии. Использован базис сгруппированных гауссовских ф-ций, близкий к двухэкспонентному и содержащий поляризационные ф-ции. Проведена полная оптимизация геометрии. Рассчитаны энергии ионизации остовных электронов и соответствующие энергии релаксации в формализме Δ ССП (как разности энергий основного и соответствующего ионизированного состояний). Обнаружено, что длина связи C—O в IV на 3%

(+3) ☒

фр. 1979, N 1

больше, а в II — на 2% меньше, чем в I; такие изменения требуют очень небольших затрат энергии. Сравнение данных для II, IV и V показало, что для атома C выгоднее σ -протонирование, а для O — π -протонирование. Сдвиги энергий орбитальных электронов (энергии увеличиваются) C1s и O1s при протонировании I близки (10,8 и 10,0 эв). Отмечено сходство перераспределения электронной плотности при протонировании и ионизации I. При присоединении H⁻ к V энергии связи уменьшаются. Сделан вывод, что при координации CO к сильным акцепторам σ -электронов энергии связи сильно увеличиваются. Подробно обсуждены изменения энергий релаксации при ионизации в рассмотренном ряду молекул. В. Л. Лебедев

что

я г

CO

Ammon 7022

1978

$\text{C}^3\text{N}-\text{a}^3\text{N}$

Ductus E; et al.

u_{gr}

C. Y. Acad. Sci., 1978, C287

163-164

Formation d'oxyde de carbone
à l'état triplet pas...

CO omnick 6448 1978

Dwivedi P.H., et al

Astrophys. J. Suppl. Ser.

1978, 36, 573-86

Rotational dependence of ...

1978

CO

S₂

смерт
мертосте
Трошину,

88: 97015m Thermoluminescence following UV irradiation of molecules trapped in rigid matrix at 6 K. Fournier, J.; Deson, J.; Lalo, C.; Vermeil, C. (Ec. Super. Phys. Chem. Ind., CNRS, Paris, Fr.). *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1978, 82(1), 100-1 (Eng). After 147-nm irradiation of a mixture of 0.1% OCS in Ar matrix, an asymmetric emission was observed between 450 and 470 nm peaking at 456 nm; this observation is consistent with the dissociation process $\text{OCS} + h\nu \rightarrow \text{CO} (^1\Sigma^+) + \text{S} (^1\text{S})$. After irradiation the matrix was warmed and a thermoluminescence spectrum was observed (the $\text{S}_2(B^2\Sigma_u \rightarrow X^3\Sigma_g)$ emission). This emission appeared from 10 K but the S₂ emission never appeared during irradiation of the sample.

(41) ☒



C.A. 1978, 88, N14

CO

dimmau 6735 1978

μ , m.n.
factor
nucleus.
across SCF

Bready J. E. et al.
Chem. Phys., 1978,
31, 467-83

Commun 6298

1978

CO

Mase H.-L., et al

(3)

Theor. chim. acta, 1978,
48, N 1, 44-57

(Cu H₂O; III)

CO

summary 6602

1978

nonlinear
9-44-78

89: 82221x High-accuracy analytic potential function for diatomic molecules; application to carbon monoxide. Huffaker, J. N. (Dep. Phys. Astron., Oklahoma Univ., Norman, Okla.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 71, 160-74 (Eng). A method is presented for making the analytic perturbed-Morse-oscillator (PMO) potential as accurate as an RKR potential through the use of an explicit relation between coeffs. of the analytic RKR potential and PMO parameters. In addn., it is possible to include higher-order WKB effects in both RKR and PMO potentials via an iterative calcn. Techniques are applied to the ground state of the CO mol.; results are compared with those of previous calcs. and tested with a modified version of the Cooley-Cashion program.



C.A. 1048, 89, N10

CO

оттиск 6602

1978

3 Б72. Аналитическая потенциальная функция высокой точности для двухатомных молекул; применение к молекуле CO. Huffaker J. N. High-accuracy analytic potential function for diatomic molecules; application to CO. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 71, № 1—3, 160—174 (англ.)

Выведены общие ф-лы для аналитич. потенциальных ф-ций двухатомных молекул, в к-рых для расчета параметров возмущенного осциллятора Морзе (ВМО) используется их явная связь с коэф. потенциала Ридберга — Клайна — Риса (РКР). В кач-ве примера приводится расчет основного состояния молекулы CO, который сравнивается с имеющимися в литературе работами. 62-параметрич. потенциал ВМО для CO вплоть до уровня $v=32$ в точках поворота совпадает с потенциалом РКР. Предложена итерационная процедура, позволяющая использовать для расчета потенциалов ВМО и РКР приближение ВКБ высших порядков.

Н. И. Бутковская

номерец,
р-уча

Л. 1979, № 3

CO

оттиски 6602

1978

2 Д184. Аналитические потенциальные функции высокой точности для двухатомных молекул; применение к молекуле CO. Huffaker J. N. High-accuracy analytic potential function for diatomic molecules; application to CO. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 71, № 1-3, 160—174 (англ.)

потенци-
р-ции

Получены соотношения между коэф. аналитической потенц. ф-ции Ридберга—Клейна—Риса (т. е. коэф. разложения поворотных точек потенциала РКР) и коэф. возмущенного потенциала Морзе $V(r) = V_1 \left[y^2 + \sum_{n=4} b_n y^n \right]$; $y = 1 - \exp[-a(r - r_1)]$. Пред-

ложена итерационная процедура для построения возмущенного потенциала Морзе из потенциала РКР с учетом поправок высших порядков к приближению ВКБ.

Р. 1979. 2

Процедура иллюстрирована на примере основного электронного состояния молекулы СО. Полученный возмущенный потенциал использован для вычисления E_v колебательных уровней с $v \leq 28$ и зависимости вращательной постоянной B_v от v . Результаты расчета E_v и B_v из потенциалов РКР и Морзе согласуются между собой в пределах погрешностей измерений. М. Р. Алиев

CO

оттиск 6879

1978

6 Б162. Система Герцберга молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$.
 Janjić J. D., Conkić Lj. U., Pešić D. S., Ke-
 pa R., Rytel M. The herzberg system of $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ mole-
 cule. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 2, 297—300
 (англ.)

Измерена система Герцберга (переход $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$)
 в спектре испускания молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ возбуждаемом
 в разрядной трубке с полым катодом (графит), запол-
 ненной кислородом (90% $^{18}\text{O}_2$) ($P=3$ мм). Приведены
 волновые числа линий вращательной структуры R-,
 Q- и P-ветвей и начала полос $v'=0-v''=0-6$. В по-
 лосах 0—0, 0—1 и 0—6 наблюдались возмущения свя-
 занные с состояниями $e^3\Sigma^-$ и $d^3\Delta$. Определены значения
 $B_e = 1,5385 \pm 0,0002 \text{ см}^{-1}$ и $\alpha_e = 0,012170 \pm 0,00005 \text{ см}^{-1}$.
 $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ ($\text{A}^1\Pi$).
 В. М. Ковба

M.H.

X. 1979, N 6

CO

Этиси 6879

1978

3 Д300. Система полос Герцберга молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$.
 Janjić J. D., Conkić Lj. U., Pešić D. S., Ke-
 ra R., Rytel M. The Herzberg system of $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ mole-
 cule. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 2, 297—300
 (англ.)

Исследован эмиссионный спектр молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$,
 возбужденный в лампе с полым графитовым катодом,
 наполненной $^{18}\text{O}_2$ (90%) при давлении 3 мм рт. ст.
 Выполнен анализ вращательной структуры полос
 $0-v'$ с $v' \leq 6$ системы электронного перехода $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$
 в области $27\,362 - 18\,095 \text{ см}^{-1}$. Определены значения
 вращательной и центробежной постоянных:
 $B_e = 1,5385 \text{ см}^{-1}$ для $\text{A}^1\Pi$. М. Р. Алиев

М. П.

9, 1979, N 3

CO

Emmuc 6879

1948

M.N.

89: 120225m The Herzberg system of carbon monoxide ($^{12}\text{C}^{18}\text{O}$) molecule. Janjic, J. D.; Conkic, L. U.; Pesic, D. S.; Kepa, R.; Rytel, M. (Fac. Nat. Sci., Univ. Novi Sad, Novi Sad, Yugoslavia). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 72(2), 297-300 (Eng). An anal. was made of the bands of the Herzberg system of the $^{12}\text{C}^{12}\text{O}$ mol. and showed that in spite of the report by J. Janzic et al. (1972) of perturbation existence in the near $B^1\Sigma^+$ state, the $v = 0$ level in the $C^1\Sigma^+$ state of $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ is unperturbed within the limits of exptl. error. The wavenos. of the rotational structure of the measured bands are given. The rotational consts. of the $C^1\Sigma^+$ state was computed by combining $R(J)$ and $P(J)$ lines and by forming $\Delta_2 F'(J)$ differences.



C.A., 1948, 89, N 14

CO

Lammuck 71651

1978

Kendrick J.

KB, exr.

Factor

J. Phys. B: Atom.

and Mol. Phys., 1978,

11 (20),



2601 - 2603.

CO

Оптика 7921

1979

22 Б162. Анализ системы Герцберга для молекул $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и частично $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. Кера R. The analysis of the Herzberg system in the $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and partly in the $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ molecules. «Acta phys. Acad. sci. hung.», 1978, 15, № 2, 133—147 (англ.)

Проанализирована колебательная и вращательная структура системы полос Герцберга (переход $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$) в спектре испускания $\text{CO}(^{12,13}\text{C})$ возбуждаемом в разрядной трубке с полым катодом. Табулировано положение линий R, Q и P-ветвей вращательной структуры ($I \leq 32$) полос $\nu' = 0 - \nu'' = 0-6$ молекулы $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и полос 0-2 и 0-3 молекулы $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. Получены след. значения вращательных молек. постоянных $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ (в см^{-1}): состояние $\text{C}^1\Sigma^+ - B_0 = 1,85847$, $D_0 = 5,67 \times 10^{-6}$, состоящие $\text{A}^1\Pi - B_1 = 1,5092$, $B_2 = 1,4895$, $B_3 = 1,4679$, $B_4 = 1,4463$, $B_5 = 1,64241$, $B_6 = 1,3988$. Колебательные постоянные $\text{CO}(\text{C}^1\Sigma^+)$ сопоставляются со значениями ω_e и $\omega_e x_e$ для др. ридберговских состояний.

В. М. Ковба

M. H.

X. 1979, 122

CO

оттиски 7921

1978

11 Д463. Анализ системы Герцберга молекулы $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и, частично, $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. Кетра R. The analysis of the Herzberg system in the $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and partly in the $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ molecules. «Acta phys. Acad. sci. hung.», 1978, 45, № 2, 133—147 (англ.)

Система Герцберга в спектре испускания: изотопич. молекул CO сфотографирована с дисперсией 0,6 Å. Для $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ получены все 7 полос этой системы, тогда как для $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ только полосы 0—2 и 0—3. Выполнен вращательный анализ спектров. Определены вращательные постоянные состояний $\text{C}^1\Sigma^+$ и $\text{A}^1\Pi$ и источники полос для перехода $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$. Уточнены значения колебательных постоянных в состоянии $\text{C}^1\Sigma^+$.

(М.Н.)



Ф. 1049/111

CO

Unnumbered 7921

1978

90:195005u Analysis of the Herzberg system in carbon monoxide $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and partly in $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ molecules. Kepa, R. (At. Mol. Phys. Lab., Pedagog. Coll., Rzeszow, Pol.). *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.* 1978, 45(2), 133-47. (Eng). In the emission spectra of the CO isotopic mols. the Herzberg bands at a 0.6 Å/mm dispersion were obtained. For the $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ mol., all 7 bands of this system were obtained and for the $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ mol. the 0-2 and 0-3 bands only. A rotational anal. of these bands was performed and the following consts. were detd.: the rotational consts. of the $\text{C}^1\Sigma^+$ and $\text{A}^1\Pi$ states, the band origins for the $\text{C}^1\Sigma^+ - \text{A}^1\Pi$ transitions, and the new vibrational consts. for the $\text{C}^1\Sigma^+$ state.

min.

C.A. 1979, 20, N24

CO

1978

3 Д301. Системы полос $E^1\Pi-A^1\Pi$ молекул $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$. Кера R., Rytel M., Rzeszut Z. The $E^1\Pi-A^1\Pi$ system bands in $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ molecules. «Acta phys. pol.», 1978, A54, № 3, 355—361 (англ.)

Исследованы эмиссионные спектры молекул $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ в обогащенных образцах в разрядной трубке Гейслера. Выполнен анализ вращательной структуры полос 0—1, 0—2 и 1—0 системы электронного перехода $E^1\Pi-A^1\Pi$. Определены значения колебательно-вращательных постоянных состояния $E^1\Pi$ этих молекул.

М. Р. Алиев

М. Р.

Ф. 1979, №3

CO

1978

89: 188408d The E^{111} - A^{111} system bands in carbon monoxide ($^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$) molecules. Kepa, R.; Rytel, M.; Rzeszut, Z. (At. Mol. Phys. Lab., Pedagogical Coll., Rzeszow, Pol.). *Acta Phys. Pol. A* 1978, A54(3), 355-61 (Eng). The emission bands of the E^{111} - A^{111} transition in isotopic CO mols. were obtained at high resolu. and analyzed. The bands 0-1, 0-2, and 0-1 were obtained for $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ mols., resp. A complete rotational anal. of these bands was performed and the fundamental consts. of the E^{111} state, i.e., the rotational, vibrational and Λ -doubling consts. were calcd. The values of the band origins for all the bands of both mols. were computed as well. The distance between the $v = 0$ level in the E^{111} state and the $v = 0$ level in the $B^1\Sigma^+$ state was esp. accurately calcd. for all isotopic mols. analyzed so far.



C.A. 1948, 89, 1522

CO

функции
 μ и E

1978
1 Б40. Теоретическое изучение функций дипольного момента молекул. II. Состояния $d^3\Delta$ и $a'^3\Sigma^+$ молекулы CO. Kirby K., Liu B. Theoretical study of molecular dipole moment functions. II. The $d^3\Delta$ and $a'^3\Sigma$ states of CO. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 200—203 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны зависимости полной энергии и дипольного момента μ от межъядерного расстояния R для состояний $d^3\Delta$ и $a'^3\Sigma^+$ молекулы CO. Использовано то же приближение, что и для основного состояния $X^1\Sigma^+$ (см. пред. сообщ. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, 4309). При помощи полиномиальной аппроксимации рассчитанных потенциальных кривых определены спектроскопич. постоянные и вычислены колебательные уровни энергии, к-рые согласуются с эксперим. данными с точностью 30—40 см^{-1} . Функции дипольного момента $\mu(R)$ возбужденных состояний ведут себя, как и в случае основного состояния. При малых R дипольный момент отвечает полярности $\text{C}-\text{O}^+$ и уменьшается по абс. величине с ро-

Q. 1979, M

стом R . При значениях R , несколько больших равновесного, происходит изменение полярности (C^+O^-), после чего $\mu(R)$ возрастает, достигая максимума вблизи $R=4$ ат. ед., а затем асимптотически приближается к нулю. При этом, за исключением очень малых R , кривая $\mu(R)$ для состояния $d^3\Delta$ лежит выше кривой для состояния $a'^3\Sigma^+$.

А. В. Абраменков



1978

CO

89: 138993v Theoretical study of molecular dipole moment functions. II. The $d^3\Delta$ and $a'^3\Sigma^+$ states of carbon monoxide. Kirby, K.; Liu, B. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(1), 200-3 (Eng). Approx. dipole moment functions for the $d^3\Delta$ and $a'^3\Sigma^+$ states of CO were calcd. by using CI wave functions including internal and semiinternal electronic correlation effects. The best theor. dipole moments for individual vibrational levels are in good agreement with exptl. data. The theor. dipole moment functions are of higher accuracy than those derivable from existing exptl. data.

JK

C.A. 1978, 29, N16

1978
12 Д248. Теоретическое изучение функций молекулярных дипольных моментов. II. $d^3\Delta$ и $d'^3\Sigma$ состояния CO. Kirby K., Liu B. Theoretical study of molecular dipole moment function. II. The $d^3\Delta$ and $d'^3\Sigma^+$ states

of CO. «J. Chem. Phys.», 1978. 69, № 1, 200—203 (англ.)

В интервале межатомных расстояний 1,6—20 ат. ед. рассчитаны значения дипольных моментов молекулы CO в возбужденных состояниях $d^3\Delta$ и $d'^3\Sigma^+$. Расчеты проводились с ф-циями метода КВ двух типов, отличающихся числом и видом учитываемых конфигураций. Вычисленные равновесные расстояния обоих состояний с точностью до 0,01 ат. ед. совпадают с соответствующими эксперим. значениями, а энергии диссоциации несколько завышены. Отмечено большое сходство в поведении ф-ций дипольных моментов $\mu(R)$ возбужденных состояний $d^3\Delta$ и $d'^3\Sigma^+$ и $\mu(R)$ основного состояния $X^1\Sigma^+$. При $R < 3$ ат. ед. $\mu(R)$ соответствует распределению зарядов C-O⁺; при больших R полярность CO меняется на противоположную. Ч. I K. Kirby-Docken, B. Lin, «J. Chem. Phys.», 1977, 66, 4309.
О. В. Сизова

сп. 1978, № 2

CO.

номер 7031

1978

Letokhov V. S.

$A' \leftarrow X B^x$

сверх резка.
возбужд.

Optics and Laser
Technology, 1978,
247-56

Laser spectroscopy...

CO

1978

Makushkin Yu. S. et al

Opt. Spektrosk 1978, 44(1),
73-80 (Russ).

M.N.

numerous groups

coll. HCL - III

[Osmunich 8302]

1978.

CO

$d^3_{34}; e^3_{\Sigma^+}$

nomeres.

красное

Mohammad S. Noor

Indian J. Pure Appl.

Phys., 1978, 16(8), p761.

Number 7755

1078

90: 76861k Core pseudopotential valence electron calculations on diatomic molecules containing second-row atoms. Nagy = Felsobuki, Ellak; Peel, J. Barrie (Dep. Phys. Chem., La Trobe Univ., Bundoora, Aust.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1978, 74(12), 2204-9 (Eng). A valence-electron-only model potential, incorporated in the GAUSSIAN 70 computer program, was tested by calcns. of the orbital energies and equil. bond lengths of the multiple-bonded diat. mols. CO, CS, SiO, and SiS using both the STO-3G and STO-6G min. basis sets. The model potential procedure shows a uniform performance for both 1st- and 2nd-row atoms. A comparison of CS with CH₂S and MeSH indicates that the procedure accurately reflects the change in mol. structure within the series.

CO

CS

SiO

SiS

kb. sec.
factor, χ_e .

(+3)



C.A. 1979, 20, N10

CO
CS
SiO
SiC
CH₂S
CH₂SH

кв. лат.
расст

2.1949, N 15

Отмечено 7455

(45) ☒

1978
15 Б17. Расчеты в валентном приближении с использованием основного псевдопотенциала двухатомных молекул, содержащих атомы третьего периода. Nagy-Felsobuki Ellak, Peel J. Barrie. Core pseudopotential valence electron calculations on diatomic molecules containing second-row atoms. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, № 12, 2204—2209 (англ.)
Методом Хартри—Фока в приближении псевдопотенциала проведены расчеты энергетич. и структурных характеристик молекул CO, CS, SiO, SiC, CH₂S, CH₃SH. Использованы атомные псевдопотенциалы в форме, предложенной Бонифачичем и Хузинагой (с просктированием на орбитали остова). Параметры псевдопотенциалов подобраны так, чтобы энергии атомов совпадали с соотв-щими величинами, найденными ограниченным методом Хартри—Фока с учетом всех электронов. Вычисления проведены с базисами STO-3 ГФ и STO-6 ГФ с одинаковыми показателями экспонент для s и p-функций. Полученные значения равновесных межъядерных

расстояний двухатомных молекул отличаются от данных неэмпирич. расчетов и эксперим. данных не более чем на 0,04 А. Отличия псевдопотенциальных орбитальных энергий от соотв-щих неэмпирич. величин не превышают 0,05 ат. ед. (среднее отклонение составляет 0,014 ат. ед.). Согласие с результатами неэмпирич. расчетов для плотностей заряда и дипольных моментов значительно хуже. Для многоатомных молекул CH_2S и

CH_3SH различия в полных энергиях и длинах связей $\text{C}-\text{S}$ составляют 0,016 и 0,02 ат. ед., соотв. Отмечено что в приближении псевдопотенциала (в сочетании с теоремой Купманса) порядок потенциалов ионизации σ - и π -состояний предсказывается правильно для молекулы CO и неправильно для молекулы CS .

А. В. Немухин

CO

1978

Norton P.R., et al.

Chem. Phys. Lett. 1978,

потомки 53, N3, 465-470

сч. N2 - III

CO

HBr

HI

OH

M.N.

(43)

CM. 6067

1978

88: 96764t Dunham energy parameters of isotopic carbon monoxide, hydrogen halide, and hydroxyl radical molecules. Ogilvie, J. F. (Dep. Chem., Kuwait Univ., Kuwait, Kuwait). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 69(2), 169-72 (Eng). Dunham potential energy coeffs. a_1 - a_6 for $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, H^{81}Br , HI , and OH were calcd., including error limits, from published exptl. spectroscopic data. There is no indication of deviation from Born Oppenheimer behavior for a_1 - a_6 of the CO mols., and the mass-independent internuclear sepn. R_e and force consts. k_e and a_0 were also calcd.

XI-5934

C.A., 1978, 88, N14

CO

HBr

H₂

OH

Ч.е; сч.м.м.

сч.м.

(49) ☒

ф. 1978, N 9

Оттиски 6067
XI-5934

1978

9 Д158. Данхэмские энергетические параметры (молекул) изотопов окиси углерода, галоидогидридов и гидроксила. Ogilvie J. F. Dunham energy parameters of isotopic carbon monoxide, hydrogen halide, and hydroxyl radical molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 2, 169—172 (англ.)

По известным экспериментальным спектроскопич. данным найдены параметры Данхэма a_1 — a_6 для молекул $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{13}\text{O}$, H^{81}Br , HJ и OH в основном электронном состоянии. Эти параметры для различных изотопич. модификаций окиси углерода совпадают в пределах ошибок определения. Приведены также вычисленные значения массово-независимых межъядерных расстояний, силовых постоянных и параметров a_0 для рассматриваемых молекул, а для HBr , HJ и OH вычисленных и эксперим. значений коэф. Y_{ij} . Р. Мухтаров

Оттиск 6067

1978

CO

4265-1734
Лайчет
Котар.
Фанжма

17

2, 1978, N 15

15 B79. Энергетические параметры Данхэма для изотопных молекул окиси углерода, галогенводородов и гидроксильного радикала. Ogilvie J. F. Dunham energy parameters of isotopic carbon monoxide, hydrogen halide, and hydroxyl radical molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 2, 169—172 (англ.).

С использованием новейших спектроскопич. данных вычислены коэф. a_0 — a_6 потенциальной ф-ции Данхэма для молекул $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, H^{81}Br , HJ и OH . Различия в коэф. a_1 — a_6 для изотопных молекул CO не превосходят стандартных отклонений, обусловленных эксперим. ошибками, тогда как у a_0 наблюдается заметная зависимость от масс ядер. Изотопически инвариантные значения коэф. a_0 , силовой постоянной K_e и равновесного межъядерного расстояния R_e получены методом Росса («Opt. Commun», 1974, 12, 433). В случае HBr , HJ и OH точность определения a_5 и a_6 недостаточна для того, чтобы судить об истинных величинах этих коэффициентах. Вычисленные значения коэф. Данхэма и спектроскопич. постоянных табулированы с указанием станд. отклонений. А. В. Абраменков,

CO

1978

аппарат
и.к. спектр

Park, Jae H.
From Sci. Tech. Aerosp. Rep.
1978, 16(3), Abstr. No. N78-I2608.

см. H₂O-II

1978

CO

(Ar^+)

Politzer P., et al.,

"J. Chem. Phys.", 1978, 68,
N11, 5289-5291.

● (calc. OH^- ; III)

2-атомные молекулы

1948

CO

номер 6791

Ramakrishna M.
et al.

диссоциация
молекул

Chem. Phys. Lett. 1948,
57, N4, 557-60

coll. H₂ - II

CO
Kb. Mex.
packet,
Do, re

1978
Ringers J.A., et al
avail. NTIS. From Gov.
Rep. Announce. Index
(U. S.) 1978, 78(10), 116

(Cu. NO; III)

CO

1978

Sakai R. et al

Infrared Phys., 1978, 18, 25-6,
577-583,

character-
istic



(see H₂O; III)

ommucc 8196 1978

CO

CO⁺

M. N.

90: 177541m New emission bands of carbon monoxide (CO and CO⁺), Singh, N. P.; Singh, I. S. (Dep. Phys., Banaras Hindu Univ., Varanasi, India). *Curr. Sci.* 1978, 48(6), 235-7 (Eng). Some new electronic band systems in CO and CO⁺ were obsd. in emission, using a high-voltage (30 kV) d.c. discharge through relatively low-pressure CO₂. The emission spectrum (2100-5600 Å) was photographed on Hilger large quartz, Steinheil 2 prism quartz and Bausch and Lomb 1.5-in. grating spectrographs. In addn. to the band systems usually obsd. in this region for CO and CO⁺, ~55 new bands were photographed. The majority of the new bands could be arranged in 3 band systems, 2 of which are proposed to be due to CO and 1 band system to CO⁺. Vibrational consts. of the 3 band systems were detd.

(+1) ☒



C.A. 1979, 20, N22

CD

1978

Тарасов Ю. В.

орфо. т.
зага, ко
враной.
срывать

"Мр. Моск. гуг.-мех. ии-но.
Сер. Обис. и материяр. гуг."
1978, N10, 154-58

ав. № - III

1978

CO

CO⁺

M. N.

11 Д462. Новые полосы испускания молекулы CO и иона CO⁺. Singh N. P., Singh I. S. New emission bands of CO and CO⁺. «Curr. Sci. (India)», 1978, 48, № 6, 235—237 (англ.)

В области 2100—5600 Å со средним разрешением сфотографирован спектр излучения высоковольтного (30 кэВ) разряда в CO₂. Наряду с хорошо известными, обнаружены 55 новых полос CO и CO⁺. Большинство новых полос принадлежит трем системам, две из которых связаны с CO и одна с CO⁺. Определены колебательные постоянные для новых систем. Библ. 48.

В. С. Иванов

(+1) ☒



Ф. 1979, N 11

CO annuaire 6745 1978

Tresic M, et al.

Can. J. Chem., 1978, 56

(11), 1582 - 85

Les fonctions de Hartree -
Fock Slater ● comme ...

1978

CO

24 Б1403. Процессы переноса энергии в молекулах $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ ($A^1\Pi$, $v'=13$), возбужденных монохроматическим светом. Vikis A. C. Energy transfer processes in monochromatically excited $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ ($A^1\Pi$, $v'=13$) molecules. «J. Photochem.», 1978, 9, № 2-3, 132—133 (англ.)

процессе
переноса
энергии

Излучение Кг на узкой необращенной резонансной линии 123,58 нм возбуждает только переход $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ (13,0) Q (13) молекулы $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$. Излучение Кг на более широкой обращенной линии 123,58 нм возбуждает переходы $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ (13,0) P (11), Q (13) и R (15) молекулы $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и переходы P (10), Q (11) и R (14) молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$. Возбужденные молекулы $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ флуоресцируют в резонансных переходах $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ (13, v'') в спектральной области 200—310 нм. Изучена дезактивация электронного возбуждения состояния $A^1\Pi$, $v'=13$ и вращательная релаксация в зависимости от давл. различных газов. Состояние $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ ($A^1\Pi$, $v'=13$) тушится след. молекулами (указаны сечения тушения $\sigma_q = k_q/c$ в $\text{\AA}^2$, где k_q — константа скорости тушения, c — скорость света): $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ 198; $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ 38,0; $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ 57,1; CO_2 119; O_2

х. 1978, № 4

43; N_2 78,5; H_2 19,0; D_2 29,3; He <0,4; Ar 3,23; Xe 114.
 Состояние $^{12}C^{18}O$ ($A^1\Pi$, $v'=13$) тушится след. молекулами: $^{12}C^{18}O$ 257; $^{12}C^{16}O$ 28,0. Для вращательной релаксации $^{13}C^{16}O$ ($A^1\Pi$, $v'=13$, $J'=13$) получены значения $\sigma(A^2)$: He 3; $^{13}C^{16}O$ 16; $^{12}C^{18}O$ 16. Сечения тушения состояния $A^1\Pi$, $v'=13$ различными молекулами коррелируют с доступностью подходящих электронных состояний и(или) каналов хим. р-ций. Сильная зависимость σ дезактивации электронного возбуждения состояния $A^1\Pi$, $v'=13$ от изотопного состава молекулы-тушителя CO приписана быстрым процессам переноса энергии между состоянием $A^1\Pi$, $v'=13$ и рядом соседних электронных состояний ($a^3\Pi$, $a'^3\Sigma^+$, $d^3\Delta$, $e^3\Sigma^-$, $f^1\Sigma^-$, $D^1\Delta$), к-рые, как известно из спектроскопич. данных, оказывают возмущающее действие на $A^1\Pi$ -состояние молекулы CO .

В. Е. Скурат



CO

1948

89: 154957s Electronic excitation of the $A^1\Pi$ and $b^3\Sigma^+$ states of carbon monoxide ($^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$) by krypton(3P_1) and Kr(1P_1). Vikis, A. C. (Div. Chem., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *J. Photochem.* 1978, 9(2-3), 154-5 (Eng). Kr 3P_1 and 1P_1 atoms, formed by resonance absorption of 123.58- and 116.48-nm radiation by ground state Kr, sensitize the $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ and $b^3\Sigma^+-a^3\Pi$ fluorescence of CO. The Kr(3P_1) state excited preferentially the $A^1\Pi v' = 13$ state of $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ by a resonance energy transfer process. The Kr(1P_1) state excites indiscriminately the $b^3\Sigma^+$ state of all 3 isotopic mols. The population ratio of the 2 accessible vibrational levels of the $b^3\Sigma^+$ state $N(1)/N(0)$, was 0.17 for all 3 isotopic mols. Energy transfer in the latter case proceeds by a nonresonance mechanism due to the forbidden character of the $b^3\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ transition. The vibrational distribution of the $b^3\Sigma^+$ state and the lack of resonance behavior is indicative of strong interaction between the energy donor and the energy acceptor similar to energy transfer reactions of rare gas and Hg metastables.

correct
 after 1978
 6-25-79



C.A. 1948, 89, N18

CO

1 Б1338. Электронное возбуждение состояний $A^1\Pi$ и $b^3\Sigma^+$ молекул $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ атомами $\text{Kr}(^3P_1)$ и $\text{Kr}(^1P_1)$. Vikis A. C. Electronic excitation of the $A^1\Pi$ and $b^3\Sigma^+$ states of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ by $\text{Kr}(^3P_1)$ and $\text{Kr}(^1P_1)$. «J. Photochem.», 1978, 9, № 2—3, 154—155 (англ.)

1978

Показано, что атомы $\text{Kr}(^3P_1)$ и $\text{Kr}(^1P_1)$ сенсibiliзируют флуоресценцию CO в переходах $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ и $b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$. Состояние $\text{Kr}(^3P_1)$ возбуждает преимущественно состояние $A^1\Pi$, $v'=13$ молекул $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ по механизму резонансного переноса энергии. Такой перенос не происходит между $\text{Kr}(^3P_1)$ и $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. Анализ энергетич. уровней всех трех изотопных разновидностей CO показывает, что в случае $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ имеется несколько близких к резонансу переходов ($\Delta E < 50 \text{ см}^{-1}$) с небольшими изменениями $|\Delta J|$, начинающихся с низких вращательных уровней, к-рые обладают высокой заселенностью при комн. т-ре. В то же время $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ может возбуждаться атомами $\text{Kr}(^1P_1)$ в резонансном процессе лишь в переходах с малыми $|\Delta J|$, но начинающихся со слабо заселенных высоких вращательных уровней, или же в переходах, начинающихся с низких вращательных уровней, но с большими $|\Delta J|$. Ни один из этих процессов не имеет большой вероятности, что находится в согласии с экспериментом. Атомы $\text{Kr}(^1P_1)$

Электрон.
возбужд.

2-1979, N1

возбуждают $b^3\Sigma^-$ -состояние молекул всех трех типов, причем отношение заселенностей нижних колебательных уровней $N(1)/N(0)$ равно 0,17 для всех трех изотопных разновидностей. Предположено, что этот процесс переноса энергии не является резонансным ввиду запрещенного характера перехода $b^3\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$. По-видимому, между донором и акцептором энергии имеется сильное взаимодействие, аналогичное наблюдавшемуся ранее для переноса энергии между атомами редких газов и метастабильными возбужденными атомами ртути.

В. Е. Скурат

уя
да и
эпе

Оттиски 6789

1978

C17

4 Б123. Флуоресценция ($A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ и $b^3\Sigma^+-a^3\Pi$)- $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, возбуждаемая $\text{Kr}(^3P_1)$ и $\text{Kr}(^1P_1)$. Vikis A. C. Sensitized fluorescence ($A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ and $b^3\Sigma^+-a^3\Pi$) of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ by $\text{Kr}(^3P_1)$ and $\text{Kr}(^1P_1)$. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 57, № 4, 522—525 (англ.)

М.П.

Приведены результаты изучения флуоресценции различных изотопных модификаций СО, возбуждаемой при столкновениях с атомами Кг в состояниях 3P_1 и 1P_1 или при непосредственном облучении криптоновой лампы. Обнаружено, что состояние $A^1\Pi v^1=13$ $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ находится в резонансе с состоянием 3P_1 Кг, а состояния $b^3\Sigma^+ v'=0$ и $v'=1$ $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ возбуждаются при нерезонансном взаимодействии с Кг (1P_1). Обсуждается возможность применения резонансного возбуждения $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ для разделения изотопов в природном СО. Указывается, что использование смесей СО с Кг более эффективно, чем освещение чистого СО резонансной линией криптоновой лампы, поскольку коэф. поглощения Кг значительно выше, чем СО.

Л. В. Серебренников

1961225-11X

2.1978.14

CO

ommu 6789 1978
XIV - 4249acneup
p.i.yopecy.

89: 171275k Sensitized fluorescence ($A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ and $b^3\Sigma^+-a^3\Pi$) of carbon monoxide ($^{12}C^{16}O$, $^{13}C^{16}O$, and $^{12}C^{18}O$) by krypton(3P_1) and $-(^1P_1)$. Vikis, A. C. (Div. Chem., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 57(4), 522-5 (Eng). The $Kr(^3P_1)$ state excites preferentially the $A^1\Pi \nu' = 13$ state of $^{13}C^{16}O$ and $^{12}C^{18}O$ by a resonance process. No resonance energy transfer was obsd. between $Kr(^3P_1)$ and $^{12}C^{16}O$. The $Kr(^1P_1)$ state excites the $b^3\Sigma^+ \nu' = 0$ and $\nu' = 1$ states of $^{12}C^{16}O$, $^{13}C^{16}O$, and $^{12}C^{18}O$ by a non-resonance process.

C.A. 1978, 89, N20

CO

6122

1978

Vici's A.C.

Chem. Phys. Lett

1978, 53 (3), 565-67

^{13}CO isotope enrichment
in the photolysis of CO ...

CO

Оттиски 7566

1978

1D849. Возбуждение монохроматическим излучением полосы $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ молекул $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$. Vikiš A. C. Monochromatic excitation of the $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ (13,0) band of $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 2, 697—702 (англ.)

Получены спектры флуоресценции молекул $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ в газовой фазе при давлении ~ 1 мм рт. ст. Флуоресценция возбуждалась резонансным Кг-источником света ($\lambda = 123,58$ нм). Установлено, что возбуждение узкой и широкой линиями (от 10 до 20 см^{-1}) приводит к испусканию полосы $A^1\Pi \rightarrow X(1,3, \nu'')$. Показано, что флуоресценция молекул $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ соответствует в этой области (шириной ~ 10 см^{-1}) излучательному распаду высоколежащих вращательных уровней, не заселяющихся при комнатной т-ре. Излучение, отнесенное ранее другими авторами к полосе $A \rightarrow X(13, \nu'')$ $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, по-видимому, связано с присутствием примесных линий CO в использовавшихся источниках света. Обсуждены проблемы фотохимич. обогащения CO. Библ. 16.

сильно
флуоресц.

р. 1979, № 2

CO (кв. мх. расст)

O₂

SO₂

NiO

NiCH₂

Ni(CH₃)₂ }

ор. 1948, №2

1948

12 Д179. Неэмпирические расчеты и расчеты в приближении псевдопотенциала некоторых молекул, образованных элементами второго, третьего и четвертого периодов. Сравнительное изучение. Wahlgren Ulf. Ab-initio and pseudo-potential calculations on some first, second and third row molecules. A comparative study. «Chem. Phys.», 1978, 32, № 2, 215—221 (англ.)

Проведен сравнительный анализ результатов неэмпирич. расчетов и расчетов с псевдопотенциалом Филлипса — Клеймана молекул CO, O₂, SO₂, NiO, NiCH₂, Ni(CH₃)₂ и атомов Ni и Mn. Сравнение результатов двух расчетов проведено по геометрич. параметрам и орбитальным энергиям. Наиболее чувствительными к выбору параметров псевдопотенциала оказались геометрич. параметры соединений, включающих углерод, что приписывается эффектам гибридизации. По этой причине рекомендуется оптимизировать параметры псевдопотенциала для валентного электронного состояния атома углерода. Орбитальные энергии валентных электронов полученные методом псевдопотенциала, хорошо согласуются с хартри-фоковскими энергиями для всех изученных молекул и атомов.

А. Дементьев

(15)

1978

CO

O₂

.

Фактов,
геометрич.
исл. мик. расч.

1 Б48. Неэмпирические и псевдопотенциальные расчеты некоторых молекул, содержащих атомы второго, третьего и четвертого периодов. Сравнительное исследование. Wahlgren Ulf. Ab-initio and pseudo-potential calculations on some first, second and third row molecules. A comparative study. «Chem. Phys.», 1978, 32, 215—221 (англ.)

Проведены расчеты энергии и равновесных геометрич. конфигураций молекул CO, O₂, SO₂, NiO, NiCH₂, Ni(CH₃)₂, а также атомов Ni и Mn. Сопоставлены между собой результаты неэмпирич. расчета с учетом всех электронов в системе и расчетов в приближении псевдопотенциала. Используются выражения для псевдопотенциалов в форме Бонифачича — Хузинга, но с другой параметризацией. Базисные наборы для расчетов с псевдопотенциалами составлены из орбиталей 2s- и 2p-типа для атомов второго и третьего периодов, 3s- и 2d-типа для металлов и 4s- и 2d-типа для никеля. На основе полученных результатов сформулированы след. выводы. Значения энергии и геометрич. параметров оказываются значительно чувствительнее к

(+4) ☒

2.1979, N1

параметрам псевдопотенциала в случае молекул, содержащих атомы углерода, чем в случае молекул, содержащих атомы кислорода или серы. Для атомов третьего периода базисные наборы должны содержать более двух функций на каждую электронную оболочку. При расчетах св-в металлов необходимо пользоваться большими базисными наборами, чтобы избежать вариационного коллапса для состояний с низкой симметрией.

А. В. Немухин

рем,
энер

Оттиски 7368

1978

CO

6 Д415. Электронная спектроскопия автоионизационных состояний молекулы CO с использованием техники электрон-электронных совпадений. Wilden David G., Hicks Peter J., Comer John, Weingartshofer Antonio. Ejected-electron spectroscopy of autoionising states of CO using an electron-electron coincidence technique. «J. Phys.», 1978, B11, № 21, 3693—3706 (англ.)

Электр.
Спектроск.

В области 15—16 эв получены спектры энергетич. потерь электронов в CO при давлении 0,1 мм рт. ст. С использованием техники регистрации совпадений упругорассеянных электронов и электронов, отщепляемых в процессе ионизации молекул CO, получены параметры сверхвозбужденного состояния. ридберговской серии, сходящейся к состоянию $A^2\Pi$ иона CO^+ . Показано, что использованный метод и метод фотоэлектронной спектроскопии в газовой фазе дают аналогичную информацию при исследовании сверхвозбужденных состояний. Библ. 22.

М. Т.

Ф.1979, №6

CO

1978

11 Б98. Использование метода электрон-электронных совпадений в электрон-инжекционной спектроскопии автоионизированных состояний CO. Wilden David G., Hicks Peter J., Comer John, Weingartshofer Antonio. Ejected—electron spectroscopy of autoionising states of CO using an electron—electron coincidence technique. «J. Phys.», 1978, B11, № 21, 3693—3706 (англ.)

Измерены спектры энергетич. потерь электронов выше порога ионизации и спектры электрон-электронных совпадений в CO. В спектре энергетич. потерь ($\Delta E = 14-18$, $E = 50$ эв, угол рассеяния 0° , разрешение $0,030$ эв) наблюдались прогрессии полос, отнесенные к ридберговским переходам $1\pi \rightarrow n s \sigma$, $1\pi \rightarrow n d \pi$ ($n = 3-8$, $v' = 0-4$). Часть наблюдаемых пиков в интервале $\sim 15,0-16,0$ эв исследована методом электрон-электронных совпадений, при этом порознь регистрировались рассеянные электроны, возбуждающие отдельные автоионизированные уровни CO, и электроны, испускаемые в результате автоионизац. процессов. Измерены отно-

Спектр
Эмиссия

2.1979, N11

сит. интенсивности полос переходов, связанных с пусканием электрона в результате автоионизации ней CO с переходом на различные колебательные уровни основного электронного состояния CO⁺. Эти значения интенсивностей согласуются с расчетными, полученными в приближении Франка-Кондона с использованием потенциалов Морзе. При этом предполагалось, что равновесное межъядерное расстояние для автоионизированных состояний составляет 1,243 Å, т. е. очень близко к значению R для CO⁺ в состоянии A²π; последнее, вероятно, является пределом наблюдавшихся ридберговских серий. Полученные данные сопоставлены с результатами исследований фотоэлектронных спектров и спектров фотоионизации.

СНМ
ИИ
ИТИ

В: М. Ковба

CO

CO₂

кв. нек.
расчет

⑦ ☒

фр., 1979, N 1

1978

1 Д105. Критический анализ неэмпирической схемы NDDO на примере расчетов молекул CO и CO₂. Зюбин А. С., Клименко Н. М., Чаркин О. П. «Ж. структур. химии», 1978, 19, № 4, 579—586

На примере расчетов молекул CO и CO₂ показано, что основным принципиальным недостатком схемы NDDO является невозможность в ее рамках достаточно простым способом учесть нескомпенсированные трехцентровые вклады в недиагональные элементы фокиана, поскольку величины таких вкладов могут достигать 0,1—0,2 а. е. На основе предположений о величинах и степени скомпенсированности трехцентровых вкладов для соединений различных типов обсуждаются границы применимости схемы NDDO. Резюме

CO

1979

9 Б10. Расчеты одноэлектронных свойств молекулы CO в зависимости от межъядерного расстояния методами ССП и КВ. Amos Roger D. SCF and CI calculations of the one-electron properties of carbon monoxide as a function of internuclear distance. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2—3, 536—539 (англ.)

Методами ССП и КВ проведены расчеты электронного строения и нек-рых физ. одноэлектронных св-в молекулы CO. В расчетах волновых ф-ций использован базисный набор 5s 4p 2d-ГФ на обоих атомах, состоящий из сокращенного набора 5s4p Даниннга с двумя поляризац. d-ф-циями ОСТ-2ГФ (с экспонентами 2,6 и 0,15 на O и 2,15 и 0,08 на C). В разложении КВ учтены все одно- и двукратные возбуждения из хартли-фоксовской конфигурации (2801 конф.). Рассчитаны дипольный, квадрупольный, октупольный и гексадека-



М. 17

Ласкет

Д. С. Каров

2. 1980. IV 9

польные моменты, градиент электрич. поля на атоме кислорода, намагниченность и компоненты тензора ядерного магнитного экранирования. Расчеты проведены не только для найденного равновесного расстояния 2,132 ат. ед. (1,128 Å), но и для интервала 1,832—2,432 ат. ед. Найдена колебательная структура и найдена зависимость вычисл. св-в от последней. Для всех рассмотренных св-в, кроме дипольного момента, в рамках КВ получено хорошее согласие с эксперим. значениями.

С. Долин:

CO

1979
92: 66970x SCF and CI calculations of the one-electron properties of carbon monoxide as a function of internuclear distance. Amos, Roger D. (Univ. Chem. Lab., Cambridge, Engl. CB2 1EW). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 68(2-3), 577-9 (Eng). The dipole, quadrupole, octopole and hexadecapole moments, the elec. field-gradient at the O nucleus, and the magnetizability and nuclear magnetic shielding tensors of the CO mol. are calc. for a range of internuclear distances, using accurate SCF and CI wavefunctions. The vibrational dependence of these 1-electron

Ref. Acc. Factors

properties is calc. With the exception of the dipole moment function, there is excellent agreement between the CI results and available exptl. data.

C.A. 1980. 22, N8

1979

CO

Asbrink L., et al.

Int. J. Mass Spectrom. and Ion
Phys. 1979, 32, N1, 93-6.

A.P.



av. No - III.

CO

Lammuck 90321

1979

^L
Boea R.

ice, melt,
faster.

Collect. Czech. Chem.
Commun. 1979, 44
3041-44

CO

15 B98. Влияние резонансов на функцию возбуждения электронным ударом излучения $b^3\Sigma \rightarrow a^3\Pi$ молекулы CO. Böse Norbert. Influence of resonances in the electron impact excitation function of CO $b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ radiation. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 61, № 2, 367—369 (англ.)

спектр
оптического
возбуждения

Исследован спектр оптич. возбуждения перехода $b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ в молекуле CO медленным моноэнергетическими ($\Delta E_{1/2} \sim 60$ мэв) электронами ($E \leq 15$ эв). Изменялась интенсивность излучения в видимой и УФ-области (2000—6000 Å) (I) и в области перехода $b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ CO (2820—3450 Å, интерференц. светофильтр) (II). Для калибровки спектра по энергии использовалась интенсивная резонансная полоса 10,04 эв (I, переход $A^1\Pi - XCO$). В области 10,5—13,3 эв наблюдался ряд полос, принадлежащих в основном переходам из состояний $b^3\Sigma^+$ (I, II) и $B^1\Sigma^+$ (I). Полученные данные сопоставляются со спектрами энергетич. потерь электронов и результатами измерений функции оптич. возбуждения др. методами. Возбуждение различных состояний CO происходит в основном за счет возбуждения и распада различных резонансных состояний CO-.

В. М. Ковба

X. 1979, N 15

CO

1) 9 Д866. Резонансы в функции возбуждения электронным ударом оптического перехода $\text{CO } b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$. Böse Norbert. Influence of resonances in the electron impact excitation function of $\text{CO } b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$ radiation. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 61, № 2, 367—369 (англ.)

Исследована интегр. люминесценция молекул CO ($b^3\Sigma^+ \rightarrow a^3\Pi$) (2660—3830 Å), возбуждаемых моноэнергетич. электронами с энергиями в диапазоне 9,5—15 эв при разрешении 60 мэв. В области энергий электронов от 10,44 до 13,29 эв обнаружены резонансы, положение которых согласуется с относительными диффер. сечениями рассеяния электронов на CO . Проведено сравнение полученных данных с данными по рассеянию электронов на молекулах CO . Появление резонансов на экспоним. кривых оптич. ф-ции возбуждения CO электронным ударом обусловлено процессами заселения возбужденного состояния CO ($b^3\Sigma^+$) при автоионизационном распаде образующихся ионов CO^- . Ю. В. Чижев

Ю. В. ЧИЖОВ

Александр,
Александр

ob. 1979, N9

CO

1979

Боженко К.В.

Кв. мех.
расчет

Авторедерат диссерт.
на соискание ученой
степени кхн.

М., июнь, 1979

CO

(ommica 9180) 1979

nomens.
кфубаил,
у. до, че
паеро

Brescansin d. vll.
etal.

J. Chem. Phys., 1979,
71 (12), 4923-30.

См H2; III

CO

omnuch 8327 | 1979

Rb. sex.
flacet,
E.

Castro E.A.

Int. J. Quant. Chem.,
1979, 15, 355-358.

CO

символ 8627

1979

Chandrasekhar J; et al.

Кв. мех.
расст

Theor. chim. acta, 1979
52, 303 - 310.

CO

рассет
энергии

1 Д115. Релаксация одноэлектронных орбитальных энергий в атомах первого периода, сопровождающая ионизацию остова. Исследование зависимости расчетных энергий релаксации одноэлектронных орбитальных энергий для молекулы CO. Single orbital relaxation energies accompanying core ionization in first row atoms and an investigation of the basis set dependence of computed single orbital relaxation energies for CO. Clark David T., Cromarty Benjamin J., Sgamellotti Antonio. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1979, 17, № 3, 149—156 (англ.)

Исследуется эффект релаксационного изменения электронной энергии молекулы при ионизации остова. Ранее авторами было показано, что эта величина может быть выражена через релаксационные энергии отдельных орбиталей. Теперь изучается зависимость величины релаксации для орбиталей одноэлектронного базиса, используемого в расчете. Рассмотрена молекула CO. Удаляется К-электрон при атоме О или при С. Применена стандартная схема неэмпирич. расчета по методу ЛКАО-МО в хартри-фоковском приближении. Рассмотрены пять различных базисных наборов. Релакса-

9.1980. N1

ционные энергии рассчитаны также для атомов от В до
Ne. Для молекул CO , N_2 и NO построены корреляцион-
ные диаграммы, связывающие орбитальные релаксаци-
онные энергии в молекуле и в составляющих атомах.
Замечено, что потеря К-электрона одним или другим
атомом ведет к существенно различным последствиям
для отдельных орбиталей и для молекулы в целом.
Меняется не только полная энергия релаксации, но
происходит также качественное перераспределение релакса-
ционных вкладов между отдельными орбиталями.

Д. Н. Ивзев

1979

Чесной А.С., Томас В.А.,
и др.

Конгр. по теории атомов и мо-
лекул, Вильнюс, 1979. Мф.
докл. Ч. 2. Вильнюс, 1979, 43.

ав. Ли Н-II

расши-
ренная
и сводит.
матрица

CO
D

CO

(2i) 1116-1118

оттиск 4980, 12291

19 B257. Уточненные лазерные частоты и коэффициенты Данэма для изотопозамещенной монооксида углерода. Dale R. M., Herman M., Johns J. W. C., McKellar A. R. W., Nagler S., Strathy I. K. M. Improved laser frequencies and Dunham coefficients for isotopically substituted carbon monoxide. «Can. J. Phys.», 1979, 57, № 5, 677—686 (англ.; рез. франц.)

Измерено ~200 лазерных линий $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ в области $1390\text{--}1650\text{ см}^{-1}$ с использованием обычного решеточного спектрометра. Точность измерений лучше, чем $\pm 150\text{ Мгц}$. Наблюдены и измерены частоты переходов с участием уровней вплоть до $v=28$ для всех изотопов. Метод гетеродинного смешивания использован для измерений разности частот между 40 парами лазерных линий, включающими все комбинации изотопов $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$. Эти измерения проводили для колебательных уровней до $v=20$ с точностью $4\text{--}20\text{ Мгц}$. Полученные данные обработаны совместно с большим кол-вом лит. данных для CO по МНК и определены 15 приведенных коэф. Данэма. Отмечено, что преимуществом анализа является одновременный расчет по всем изотопозамещенным пр-ным CO. Из новых коэф. рассчитаны лазерные частоты CO, к-рые рекомендуются как наиболее точные и самосогласованные из имеющихся в литературе.

С. Б. Осин

1940

5082 2404

оттиск

2. 1949, 119

CO

ommene 85141

1979

deFrees D. J. et al.

paere

pubroben.

vercey

J. Amer. Chem. Soc.

1979, 101(15) 4085-89

(encl. A2; 11)

papers on (H₂, Br₂, Cl₂, N₂, O₂, CO, Fe₂) 1979

Dunlap B.I., Connolly J.W.D.,

Sabin J.R.,

XI-6249

J. Chem. Phys., 1979, 71, 12, 4993-4998

On first-row diatomic molecules
and local density models.

PuXue, 1980, 1352,

W. (92)

CO

[annua 8305] 1979
Epstein J; et al.

can. not.

J. Chem. Phys., 1979,
70 (4), 1796-1801

●
(see. H₂; 101)

1979

2 Д93. Систематический подход к расширенным орбитальным базисам равномерного приближения для атомных и молекулярных расчетов. Systematic approach to extended even-tempered orbital bases for atomic and molecular calculations. Feller David F., Ruedenberg Klaus. «Theor. chim. acta», 1979, 52, № 3, 231—251 (англ.)

Предложена явная ф-ла для построения из примитивных гауссовых ф-ций базисов равномерного приближения, позволяющих систематически улучшать аппроксимацию полного базисного набора. Рассмотрена связь введенных базисных наборов с интегр. преобразованиями хартри-фоковских АО. На примере расчета атомов Be, C, O, S и Se проиллюстрирована процедура построения расширенных базисов равномерного приближения и исследована их сходимость к полному базису. Полученные результаты использованы для построения оптимальных базисных наборов АО, которые являются эффективными в молекулярных расчетах. Модельные расчеты, использующие введенные базисные наборы, проведены для молекул CO, H₂, C₂H₂, CH₄.

Е. А. Жилинская

CO

H₂C₂H₂CH₄расчет
молекулы

(+3) ☒

9.1980.02

CO

1979

Ferriera L. G., Leite J. R.

разреш
номеров.
кривых

Phys. Rev., A20, n3, 689-
- 699 (англ.)



(сер. N_2 ; III)

CO ommeu 4481 1979

Ford T. A.

M.N. J. Chem. Education, 1979,
56 (1), 57-58.

CO

1979

Fournier J., et al.

J. Chem. Phys., 1979, 70,
N12, 5726-30.

crecuti
sp. spec.

coll. N2O-III

7 (~~F_2~~ , ~~O_2~~ , N_2 , CO , ~~H_2~~ , H_2O , NH_3 , CH_4 , CF_4) 1979

Гуцев Г. Л., Петин А. А., XI-6372

те. структура. химии, 1979, 20, 45, 74-78

Исследование электронной структуры
молекул с помощью самосогласованных дискретных
вариационных χ_2 -методом в базисе
генеральных карьер-фоновых функций
III Расчет потенциалов ионизации молекул.

Ри Ри, 1980, 20122

10

(9)

CO

BP-XV-9485

1979

90: 177473r Absolute wavenumbers and molecular constants of the fundamental bands of carbon monoxide ($^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$) and of the 2-1 bands of carbon monoxide ($^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$), around $5\mu\text{m}$, by Fourier spectroscopy under vacuum. Guelachvili, G. (Lab. Infrarouge, CNRS, Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(2), 251-69 (Eng). This paper is part of a more general work undertaken on the detn. of Dunham coeffs. for all the isotopic species of CO. The abs. wavenos. of 466 CO lines obtained from absorption spectra of 6 different isotopic forms in the $5\text{-}\mu\text{m}$ region are reported with an accuracy of the order of 3 MHz or

M.N.

C.A. 1979, 92, 122

less for ~ 300 lines. Absolutely measured within 9 MHz, 43 lines of $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$ (a mol. whose spectrum has not been obsd. in the IR before) are given together with 59 wavenos. measured within 3.2 MHz of $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, also reported for the 1st time. The wavenos. extend from 1939 to 2271 cm^{-1} . More than 50 accurate mol. consts. are available allowing precise detn. of pure rotational transitions. These metrologic data should be helpful both for microwave or IR identification in astronomy, for instance, and for more specific mol. purposes. The high self-consistency of these Fourier results measured vs. the Kr line, and their consistency with all the other accurate measurements suggest that the reported values be adopted as secondary stds.

CO

ВФ-ХIV-9485

1979

22 Б264. Абсолютные волновые числа и молекулярные постоянные фундаментальных полос $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ и полос 2—1 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ около 5 мкм, измеренные методом фурье-спект-

роскопии в вакууме. Guelachvili G. Absolute wavenumbers and molecular constants of the fundamental bands of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ and of the 2—1 Bands of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, around 5 μm , by fourier spectroscopy under vacuum. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 251—269 (англ.)

С помощью фурье-спектроскопии измерены колебательно-вращательные спектры изотопных модификаций $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ при низком давл. (0,5—12 мм) в области фундаментальных полос. Кроме переходов 1—0 наблюдаются переходы 2—1 для $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$. Измерения проводили в ячейке типа Уайта, эффективная длина поглощающего слоя

M, N

X. 1979, N 22

составляла 82 м. В кач-ве эталона использована линия Кг. Приведены волновые числа 466 линий CO. Точность измерения большинства линий оценена в 3 Мгц и лучше. Впервые измерено 49 линий $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$ с точностью 9 Мгц, а также 59 линий $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$ с точностью 3,2 Мгц. Рассчитаны молекулярные постоянные ν_0 , B , D , H в состояниях $v=0,1$ для шести изотопозамещ. пр-ных CO, а также в состояниях $v=1,2$ $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$. Отмечено, что полученные данные хорошо согласуются с имеющимися в лит., однако более точны и самосогласованы. Измеренные волновые числа рекомендуются использовать в кач-ве вторичных стандартов.

С. Б. Осин



CO

B92-XIV-9485

1079

12 Д380. Абсолютные волновые числа и молекулярные постоянные основных полос $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ и полосы 2—1 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, определенные в области 5 мк с помощью вакуумной фурье-спектроскопии. Absolute wavenumbers and molecular constants of the fundamental bands of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{17}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ and of the 2—1 bands of $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ and $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$, around 5 μm , by fourier spectroscopy under vacuum. Guelachvili G. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 2, 251—269 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного CO в области 5 мк при давл. 0,05—40 мм рт. ст. в слое 42 и 82 м с помощью фурье-спектрометра с регистрацией 10^6 точек. Измерены частоты колебательно-вращательных линий в области основного тона CO со всеми стабильными изотопами C и O и линии горячего перехода 2—1 молекул $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ и $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$. Приведены частоты линий, измеренные с точностью около 10^{-4} см $^{-1}$. Рассчитаны колебательные частоты и постоянные B,

спектр
поглощения

9.10.79/112

го момента по нормальной координате Q_4 . Библ. 19.
М. Тонков

19 1277 Обнаружение нестационарного состояния

(H)

CO

[оттиски 8055]

1979

Honjou K. et al.

Mol. Phys., 1979,

37 (5), 1593-1604

кв. мех.
расчет

похоже,
крупнее

CO

номер 7806

1979

расчет

Inglesfield J. E.

энергии

орбитали

Mol. Phys., 1979, 37 (3)

889-903

CO

1979

УДД379. Сечения фотоионизации газов в вакуумной УФ-области. Ч. I. HeI-спектры простых соединений. Kimura K., Achiba Y., Morishita M., Yamazaki T. Vacuum uv photoelectron intensity of gaseous compound. I. HeI spectra of simple compounds. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1979, 15, 269—274. (англ.)

сечения

фотоионизации
газов

Предложен метод определения абс. сечений фотоионизации газов, основанный на получении фотоэлектронных спектров смеси исследуемого газа с калибровочным (в данной работе — N_2). При известных абс. сечениях фотоионизации N_2 и парциальных давлениях компонентов смеси, по площади полос спектра можно вычислить искомое сечение. Возможности модели проиллюстрированы на примере молекул CO , O_2 , H_2O , NH_3 , CH_4 , ряда кислород- и азотсодержащих алифатич. соединений. Отмечено, что величины сечений, полученные предложенным методом, хорошо согласуются с данными, полученными из спектров поглощения. Библ. 29. М. Т.

(4) 8

Рис. 94, 1979, № 2

CO

Commen 8459 | 1979

Kitaura K., et al.

M.N. .

Chem. Phys. Lett.,
1979, 65(2), 206-211

CO

1949

Kobeissi H., et al

passem
weaken

Proc. of the Inter. Symp. on
Atom. mol. and Solid-State
Theory, Collision Phenomena,
Quantum Statistics and
Comput. Methods, Flagler Beach,
Fla, March 11-14, 1949.
"Int. J. Quantum 'chem.'" Quant.
chem. Symp. NB, 169-174.
(see I 2, III)

CO

number 8622

1979

Korzeniewski G., et al.

chem
в матрице

J. Chem. Phys., 1979, 70.

(11) 5174-83

Vibrational Spectroscopy of
matrix isolated...

CO

omruk 8617

1979.

Lauet G., et al.

момент,
рецепт.

Theor. chim. acta,
1978, 52, 319-328

CO

1979

CO⁺

7 Д766. Интенсивности полос A—X и B—X молекулы CO и иона CO⁺ в кометах. Krishna-Swamy K. S. Intensities of A—X and B—X bands of CO and CO⁺ in comets. «Astrophys. J.», 1979, 227, № 3, Part 1, 1082—1085 (англ.)

Рассчитаны интенсивности полос спектров флуоресценции в системах переходов A—X и B—X для молекулы CO и иона CO⁺. Учтены переходы с участием 14 нижних колебательных уровней для каждого состояния. Результаты расчета использованы для интерпретации излучения комет в УФ-области спектра, зарегистрированного с помощью спектральной аппаратуры, установленной на спутниках. Отмечено удовлетворительное согласие расчетных и эксперим. спектров. Расхождения объяснены несовершенством примененных спектральных приборов. Библ. 21. М. Т.

спектр
флуорес.

(+1) ⊗

Рис. 94, 1979, л. 4

(+) CO

1979

91: 219649f Mechanism of excitation of electron states of carbon monoxide molecules in a glow discharge. Maksimov, A. I.; Polak, L. S.; Sergienko, A. F.; Slovetskii, D. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1979, 47(3), 451-6 (Russ). In a stream of pure CO in a pos. column of a glow discharge with reduced pressure, the intensity of the bands $B'^1\Sigma \rightarrow A'^1\pi$, $A'^1\pi \rightarrow X'^1\Sigma$, $b^3\Sigma \rightarrow a^3\pi$, and $a'^3\Sigma \rightarrow a^3\pi$ of CO mol. was measured. The mechanism of the population of the electronically excited state of the CO mol. were analyzed on the basis of exptl. and theor. data. The population of these excited levels is detd. by the rate of decrease of the intensity of the bands after turning on the discharge.

(check)

C.A. 1979, 21, N26

CO

1979

Cнекрп

94:55151w Mechanism of excitation of vibrational levels $X^1\Sigma^+$, $A''\Pi$, and $B^1\Sigma^+$ of electron states of a carbon monoxide molecule in a direct-current charge beam. Malakhov, V. P.; Pugin, V. I.; Sokolov, A. P. (Ryazan. Radiotekh. Inst., Ryazan, USSR). *Deposited Doc.* 1979, VINITI 3029, 17 pp. (Russ). Avail. VINITI. The population of the vibrational levels $B^1\Sigma^+$, $A''\Pi$, $X^1\Sigma^+$ electronic states, the electron concn., av. electron energy, and electron distribution function with respect to velocity were studied in a longitudinal discharge tube contg. a $\text{CO}_2 + \text{He}$ mixt. The nature of the excitation of the vibrational levels of these electronic states for the CO was discussed on the basis of these data. The vibrational levels of the $A''\Pi$ state are excited stepwise with vibrational levels of the ground $X^1\Sigma^+$ state. The vibrational levels of the $B^1\Sigma^+$ state and $v = 12-19$ vibrational levels of the $X^1\Sigma^+$ state of CO are excited by direct electron bombardment.

©. A. 1981. 94, NS

СО

1973

11 Д291 ДЕП. О механизме возбуждения колебательных уровней $X'\Sigma^+$, $A'\Pi$, $B'\Sigma^+$ электронных состояний молекулы СО в столбе разряда постоянного тока. Малахов В. П., Пугнин В. И., Соколов А. П. Рязан. радиотехн. ин-т. 1979. 16 с., ил., библиогр. 13 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 13 авг. 1979 г. № 3029—79 Деп.).

Изложены результаты измерений населенности колебательных уровней $X'\Sigma^+$, $A'\Pi$, $B'\Sigma^+$ электронных состояний молекулы СО, концентрации электронов n_e , средней энергии электронов ϵ и функции распределения электронов по скоростям в положит. столбе разряда смеси углекислого газа с гелием и на основании полученных данных проведено обсуждение характера возбуждения колебательных уровней электронных состояний $X'\Sigma^+$, $A'\Pi$ и $B'\Sigma^+$ молекулы СО.

возбужд.
колебат.
уровней
эл. состоян.

Ф. 1079/11

CO

4 Б16. Расчет многофотонных ИК-спектров малых молекул. Применение к CO. Moloney J. V., Faisal F. H. M. Computation of multiphoton IR spectra of small molecules: Application to CO. «J. Phys.», 1979, B12, № 17, 2829—2840 (англ.)

Предложен метод расчета многофотонных колебательно-вращательных спектров малых молекул, не использующий теорию возмущений. Применимость указанного подхода продемонстрирована на примере молекулы CO. Показано, что частотная селективность возбуждения на высокие колебательные уровни требует строгого выполнения условий перехода. Найдено, что в случае, когда уширение индивидуальной колебательно-вращательной линии становится сравнимым с вращательной постоянной молекулы, проявляются новые нелинейные эффекты, приводящие к возникновению дополнительных линий в спектре. Отмечено, что использование упрощенных моделей при описании вращения приводит к неверным результатам для многоквантовых переходов.

Б. И. Жилинский

Расчет
колебательно-
вращат.
спектров

х. 1980. № 4

CO

1979

4 Д413. Измерения интегральной интенсивности и относительной силы полос Ангстрема молекулы CO. Integrated intensity measurements and relative band strengths of CO (Angstrom) bands. Murthy N. Sreedhara, Prahlad U. D. «Physica», 1979, BC97, № 4, 385—387 (англ.)

М.П.

Измерены относительные интегр. интенсивности полос $v' = 0 - v'' = 0 \div 4$ системы $B^1\Sigma^+ - A^1\Pi$ молекулы CO. С использованием потенциала Морзе рассчитаны коэф. Франка—Кондона и r -центроиды для полос этой системы. Определена зависимость электронного момента перехода от межъядерного расстояния, $R_e(r) = \text{const} (1 - 1,748r + 0,766r^2)$.

Ф. 1980 N 4

CO

определит.
матриц.
элементов

9.1949.19

9 Д198. Определение матричных элементов ангармонического осциллятора: использование соотношений коммутации в частном случае потенциала Дэнхэма, разложенного до членов шестого порядка. Nia y P., Coquant C., Bernage P. Détermination des éléments de matrice d'un oscillateur anharmonique: utilisation des relations de commutation dans le cas particulier d'un potentiel de Dunham développé jusqu'au sixième ordre. «Can. J. Phys.». 1979, 57, № 4, 572—581 (франц.; рез. англ.)

На основании потенц. ф-ции Дэнхэма для колебаний двухатомной молекулы, разложенной в ряд по степеням межъядерного расстояния x до членов 6-го порядка, получены колебательные энергии и волн. ф-ции. С помощью соотношений коммутации между гамильтонианом и x^e выведена рекуррентная ф-ла для диагонального матричного элемента x^e , содержащая коэф. разложения потенциальной и полной энергии. С помощью правил сумм вычислены также недиагональные матричные элементы x^e . Численные результаты получены для молекул CO и НВг. Для CO достигнуто хорошее совпадение вычисленных и эксперим. значений матричных элементов дипольного момента.

М. А. Ковнер

1979

8564

См. мат.



Ф. 1049, № 9

CO

ommueu 8313 1949

Neer Mohammad S.

placua "Physica," 1949, BC 96, #3, 4/10-13
ms. 8313

ecc. 32 - 11

CD

Number 8907

1979

Ohwada H.

Spectrochim acta,

Ch. 1. 1979

1979, A55, 1353-57.

1979

CO

LiF

(90) 142377k Approximate estimation of properties of heteronuclear diatomic molecule based on the Thomas-Fermi theory. Plindov, G. I.; Pogrebnya, S. K. (Inst. Yad. Energ., Minsk, USSR). *Dokl. Akad. Nauk BSSR* 1979, 23(2), 139-42 (Russ). For a description of the properties of a heteronuclear diat. mol. the quasi-unidimensional statistical model is suggested. By using numerical soln. of the equations obtained in the model the electronic energy values and mean operators r_1^{-1} , r_2^{-1} , r_1^2 , and r_2^2 are evaluated for CO and LiF. The results are compared with quantum mech. values.

Оценки

счетов, экстр. энерг.

(71) 17

C.A. 1979, 90, N18

CO

1979

сигнал
в пламени

91:148891r Background-free CARS studies of carbon monoxide in a flame. Rahn, Larry A.; Zych, Ludwik J.; Mattern, Peter L. (Appl. Phys. Div., Sandia Lab., Livermore, CA 94550 USA). *Opt. Commun.* 1979, 30(2), 249-52 (Eng). Background-free coherent anti-Stokes Raman spectra (CARS) of CO were obtained in a rich CH₄/air flat flame. Use of this background rejection method, requiring only 2 laser frequencies, results in an increase in signal-to-noise of >200 in the $|x^{(3)}|^2$ spectrum in comparison with normal CARS. This technique provides a means for detg. the symmetry of obsd. Raman transitions. The principles of background-free CARS are derived, and the capabilities are demonstrated with exptl. data.

C. A. 1979, 9/18

CO

N₂фотоэлектронный
спектр

(+) ☒

Ф. 1979, № 10

10 Д363. УФ-фотоэлектронная спектроскопия CO и N₂ в матрицах и в конденсированном состоянии. Schmeisser D., Jacobi K. UV photoelectron spectroscopy of matrix-isolated and condensed CO and N₂. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 62, № 1, 51—56 (англ.)

Исследованы HeI- и HeII-фотоэлектронные спектры CO (I) и N₂ (II), изолированных в Хе-матрице при т-ре 9° К и конденсированных на поверхности Au-подложки. Энергии связи электронов относительно уровня Ферми для конденсированных I и II равны (в эв): 8,8, 11,75 14,5 (I); 10,5, 12,0, 13,8 (II); а для изолированных в Хе-матрице I и II равны: 11,5, 14,1 (I); 10,2, 11,5, 13,2 (II). Показано, что полосы с этими энергиями связи соответствуют удалению электронов с МО типа 4σ, 1π и 5σ. Установлено, что фотоэлектронные полосы конденсированных и изолированных в Хе-матрице I и II сдвинуты в среднем на 1 эв в сторону меньших энергий связи по сравнению с полосами газообразных I и II. Проанализированы ширины полос в фотоэлектронных спектрах. Обсуждены причины появления сателлитных полос в фотоэлектронных спектрах конденсированных I и II. Библ. 17.

Ю. В. Чижов

1979

№ 13 Б99. К-спектры возбуждения углерода в малых молекулах по данным метода электронного удара с высоким разрешением. Тронс М., King G. C., Read F. H. Carbon K-shell excitation in small molecules by high-resolution electron impact. «J. Phys.», 1979, В12, № 1, 137—157 (англ.)

Методом электронного удара изучены дискретные уровни К-спектра возбуждения углерода в CO , CH_4 , CF_4 , CO_2 , COS , C_2H_2 и C_2H_4 . Энергия перв. пучка 1,5 кэВ, разрешение 70 мэВ. Измерены энергии перехода

методом.

(см CH_4 , 14)



✶

г. 1979, № 13

- CO
- CH_4
- CF_4
- CO_2
- COS
- C_2H_2
- C_2H_4

CO

1979

8 Б149. Возбуждение электронным ударом низкой энергии состояния $b^3\Sigma^+$ молекулы CO. Twist J. R., Paske W. C., Rhymes T. O., Haddad G. N., Golden D. E. Low energy electron impact excitation of the $b^3\Sigma^+$ state of CO. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 6, 2345—2351 (англ.)

М.И.

Методом задержанного совпадения измерено время жизни уровня $v'=0$ состояния $b^3\Sigma^+$ молекулы CO, возбужденной электронным ударом низкой энергии. Спектры регистрировали в области 2000—3500 Å с разрешением 50 Å при энергиях пучка электронов от 10,5 до 13,5 эВ. Рассчитаны компоненты времени жизни: $51,86 \pm 0,24$, 358 ± 20 и 1500 ± 900 нсек с доверительным интервалом 95% при экстраполяции к нулевому давлению. Определены также сечения столкновительного

X. 1980 N 8

тушения для мгновенного распада и первого каскада, равные $(7,7 \pm 3,8) \times 10^{-5} \text{ см}^2$ и $(7,1 \pm 3,5) \times 10^{-15} \text{ см}^2$.
Заклучено, что начало первого каскада связано с уровнями $v''=32-41$ состояния $a'^3\Sigma^+$, поскольку, как предполагалось ранее, высокие колебательные уровни состояния a' сильно возмущают уровни $v''=0$ и 11 состояния $b^3\Sigma^+$. Этот вывод подтвержден полученными результатами для сечений тушения, к-рые для компонент мгновенного и первого каскада практически равны. Обсуждены возможные причины несоответствия с лит. значениями для времени жизни состояния $b^3\Sigma^+$.
С. Б. Осин

CO

[ommuch 8075]

1979

Wilson S., et al.

nomerous.
reputable

Chem. Phys. Lett.,
1979, 63(2), 367-69

(see. N_2 ; 14)

CO

1979

Yencha A. Z.

правее
(7)

Синтез бинарного Гласс
Spectrosc. 1979, 27, N3,
135-56.

см. $\text{He}^+ - \text{III}$

1979

CO

CO₂кв. еек.
расчет

15 Б16. Исследование неэмпирической схемы PRD-DO на примере расчетов молекул CO и CO₂. 3 ю-бии А. С. «Ж. структур. химии», 1979, 20, № 2, 195—202

Предложено несколько непараметрич. и параметрич. вариантов неэмпирич. схемы ЧУДДП, к-рые по простоте вычислительной схемы и затратам машинного времени близки к известной схеме ПДДП, но существенно превосходят ее в отношении точности имитации результатов неэмпирич. расчетов в том же базисе. В их рамках выполнены сравнительные расчеты молекул CO и CO₂. В наиболее точном из них одноэлектронные уровни, матричные элементы фокиана и заселенности АО, рассчитанные неэмпирически, воспроизводятся с погрешностью $\sim 0,02-0,04$ а. е.

Резюме

(41) 12

2.1979/15

CO

1980

11 Д88. Многоэлектронные вклады в оже-спектр CO. Manu-electron contributions in the Auger spectrum of CO. Agren Hans, Siegbahn Hans. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 3, 498—503 (англ.)

Оже-
спектр

Показано, что эксперим. оже-спектры валентных оболочек для двухатомных молекул имеют колебательную структуру и демонстрируют две группы переходов, относящихся к различным положениям дырок в атомном остове, но к одному и тому же набору конечных валентных орбиталей. По этим причинам оже-спектры двухатомных молекул, в частности спектр CO, обеспечивают наилучшую проверку справедливости одноэлектронной модели интенсивности. Показано, что внутренние корреляционные эффекты приводят к расщеплению переходов на внутренние валентные состояния с двумя дырками. В результате расщепления появляется несколько интенсивных компонент. Сделано предположение, что слабые пики и повышение фона в низкоэнергетич. части спектра CO связаны с выбросом электронов в конечные состояния и с эффектами неупругого рассеяния. Различие в форме $1s^{-1}$ -спектра и $1s^{-1}$ -спектра объяснено на основании различных потенц. кривых для этих уровней.

С. К. Ковалёва

Ф. 1280
12/14

1980

CO

17 Б133. Пороговые фотоэлектронные спектры CO, полученные методом прилипания электронов. Ajello J. M., Chutjian A., Winchell R. Threshold photoelectron spectrum of CO by electron attachment (TPSA). «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1980, 19, № 3, 197—203 (англ.)

порог,
спектр

Получены пороговые фотоэлектронные спектры CO в области энергий фотонов 14,0—21 ЭВ. Спектры измерены методом прилипания электронов, в котором регистрируются отриц. ионы (Cl^-), образующиеся в результате прилипания фотоэлектронов (от молекул исследуемого газа) с близкой к нулю энергией к электроотриц.



Л 1980 N17

добавкам — акцепторам электронов (CFCl_3). В полученных спектрах идентифицированы колебат. уровни электронного состояния $X^2\Sigma^+$ вплоть до $v'=12$ и показано, что их заселенность сильно завышена по сравнению с заселенностью, получаемой из обычных фотоэлектронных спектров. На основании анализа спектров сделан вывод, что сильное увеличение заселенности обусловлено большим вкладом резонансной автоионизации. Идентифицированы также колебат. уровни состояний $A^2\Pi$ и $B^2\Sigma^+$. Установлено, что для этих состояний заселенность по колебат. уровням близка к франк-кондоновской, что указывает на доминирование прямой фотоионизации при образовании этих состояний.

Е. Николаев

CO

1980

Aufderheide K. H.,
et al.

protein Si, 149th ACS Nat. Meet.
M.H. Houston, Tex., 1980. Abstr.
Pap. Washington, D.C.,
Sa., 76.

(see. LiH; III)

CO

Communa 10481

1980.

Auf der Heide K.H. et al.

нв. еух.
пачет

J. Chem. Phys., 1980, 73
(4), 1789-1804.

CO

1980

Заселенность
R-ветви
колебательного
спектра

19 Б226. Инфракрасная спектроскопия сверхзвуковых молекулярных пучков с использованием перестраиваемых диодных лазеров. Bassi D., Boschetti A., Marchetti S., Scoles G., Zen M. Infrared spectroscopy of supersonic molecular beams with tunable diode lasers. «Symp. Atom. and Surface Phys. '80, Salzburg, 1980. Contrib.» Innsbruck, s. a., 117—122 (англ.)

Измерена зависимость заселенностей вращательных состояний R-ветви колебательного спектра CO в области около 2150 см^{-1} от квантового числа J в свободной молек. струе CO и He—CO при давлениях в источнике молек. пучка 1,3; 2 и 3 атм. При измерениях использован метод зондирования молек. пучка при помощи пере-

X. 1980 N 19

страиваемого диодного лазера (область перестройки $\sim 50 \text{ см}^{-1}$) с последующим детектированием молек. пучка при помощи болометра на жидк. гелии. Ширина линии сигнала составила $\sim 20 \text{ Мгц}$ и определялась характеристиками лазерного источника. Допплеровское уширение не превышало 5 Мгц . Согласно эксперим. данных с вычисленными на основе модифицированной теор. модели вполне удовлетворительное. Отклонения от максвелловского распределения в молек. пучке вызваны заметным вкладом неупругих столкновений.

С. Н. Мурзин

CO

1980

2 Д623. ИК-спектроскопия сверхзвуковых молекулярных пучков с использованием перестраиваемого по частоте излучения диодных лазеров. Infrared spectroscopy of supersonic molecular beams with tunable diode lasers. Bassi D., Boschetti A., Marchetti S., Sco-

les G., Zen M. «SASP. Symp. Atom. and Surface Phys., Maria Alm-Salzburg, 1980. Contrib.» S. 1., s. a., 123—128 (англ.) (Место хранения ГПНТБ СССР)

ИК спектр

Исследованы спектры ИК-поглощения молекул CO (I) в сверхзвуковом потоке I+He на фоне перестраиваемого по частоте излучения диодных лазеров ($\nu \sim 2150 \text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu \sim 50 \text{ см}^{-1}$, $\delta\nu \sim 20 \text{ МГц}$, $P \sim 1 \text{ мВт}$). Проведен масс-спектрометрич. анализ компонент сверхзвукового потока. Измерены интенсивности ИК-полос I при давлении газообразных молекул I в потоке 1,3—3 атм. Обсуждено распределение интенсивности ИК-полос вращатель-

ф. 1982, 18, N2.

ных переходов колебания молекул I в потоке. Отмечено, что максвелловское заселение вращательных подуровней колебания I в потоке нарушается при больших величинах J . Предположено, что наблюдаемое энергетич. распределение молекул I в потоке определяется изменением эффективности процессов вращательной релаксации в I при расширении сверхзвукового потока

И. В. А



CO

1980

Birnbaum G.

Proc. Int. School Phys.

Enrico Fermi, Varenna
on Lake Como, 1978.

Course 75. Amsterdam e.a.,
1980, 111 - 145.

(cur. M2 ; III)

CO

Lommuch 10225 1980.

Blä's R., et al.

(M, Y)

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1980, 13,
2693 - 2700

00

(номер 11166)

1980

сродство
к
протоны

Bohme D.K., et al.
J. Chem. Phys., 1980,
73, N 10, 4976-4986.

● (ссл. $M_2 H^+$; III).

CO

1980

Carr B.R., et al

J. Mol. Struct., 1980, 62,
291-295.

u.k. чекір

vi



cu C_2N_2 ; III

1980

CO

OH

C₂

Mantz

M.N.

(42)



V93: 158436b High-resolution near infrared study on molecules of astrophysical interest carbon monoxide, hydroxyl radical, diatomic carbon. Chauville, J.; Maillard, J. P.; Mantz, A. W. (Lab. Telesc. Infrarouge, Obs. Meudon, 92190 Meudon, Fr.). *Spectres Mol. Simples Lab. Astrophys., Commun. Colloq. Int. Astrophys., 21st* 1977 (Pub. 1980), 442-57 (Fr). Univ. Liege, Inst. Astrophys.; Cointe-Sclessin, Belg. The emission spectra of CO, OH, and C₂ were studied by Fourier transform spectroscopy of an oxyacetylene flame. For CO accurate mol. consts. were derived for vibrational levels $v = 0-5$. Bands of $\Delta v = 3$ sequence and some transitions involving high rotational levels for $v = 2-5$ were obsd. for OH. These observations provided improved mol. consts. and λ -doubling consts. for the OH ground state. The Phillips system of C₂ ($A^1\pi_u-X^1\sigma_g^+$) was studied; and 5 new bands are reported. The rotational perturbations of upper

electronic states are also described, and more accurate consts. of $C, ^3\sigma_{cu}^+$ perturbing state are given.

C.A. 1980, 93, N16

CO

Summa 9712

1980

кв. мех.
факт

Chestry A.S. et al.

Chem. Phys., 1980,
49, 104-115

(ср. Lit; III)

XV-3727

CO (ne)

[ommu 10308] 1980.

Clouter M. J.; et al.

Raman
spectr

J. Chem. Phys., 1980, 73
(2), 673-82

Pure vibrational Raman
spectra

CO

Commeca 94901

1980

рацем
глицерин
соединения

Costa-Cabral B. J.
et al.

J. Phys. B: Atom.
and Mol. Phys.,
1980, 13, 211-216

see Ch; III

CO

1980

21 Б1071. Спектроскопическое определение относительных концентраций колебательно-возбужденных молекул CO в сероуглеродном пламени. Дудкин В. А. «Физ. горения и взрыва», 1980, 16, № 3, 73—78

Описана упрощенная методика нахождения относит. конц-ий молекул CO на колебательных уровнях $v=2-10$ по ИК излучению CO в области 2,3—2,7 мкм для условий высокот-рной среды.

Резюме

И. К. Скляр

изучения

Концентрация
молекул.

X. 1980 № 21

1980

CO

2 Д611. Анализ колебательного распределения молекул CO ($a^3\Pi$), образующихся при фотодиссоциации CO₂. Analysis of CO ($a^3\Pi$) vibrational distribution produced by photodissociation of CO₂. Dueñas Fana-
nas J. A., Cabello A. «Nuovo cim.», 1980, B59, № 75—80 (англ.; рез. итал., рус.)

Выполнен простейший анализ колебательного распределения молекул CO ($a^3\Pi$), образующихся при фотодиссоциации CO₂. Показано, что колебательное распределение хорошо описывается суммой двух распределений Пуассона. Проанализирована зависимость колебательного распределения от энергии квантов возбуждающего излучения. Предложено два механизма, ответственных за образование CO ($a^3\Pi$) при фотодиссоциации CO₂.
В. С. Иванов

образов.
при фотодисс.
CO₂.

сп. 1981. №2

ommuck 9322

1980

CO

N₂

BF

Page 17.
Epsilon

☒

(+2)

92; 188668a Molecular Rydberg transitions in carbon monoxide; term value ionization energy correlation of boron fluoride (BF), carbon monoxide and nitrogen. Fock, J. H.; Guertler, P.; Koch, E. E. (II. Inst. Experimentalphys., Univ. Hamburg, 2060 Hamburg, 52 Fed. Rep. Ger.). Chem. Phys. 1980, 47(1), 87-93 (Eng). The linear correlation between the term value and ionization energy for mol. Rydberg transitions is tested for the sequence of isoelectronic mols. BF, CO and N₂ based on a new measurement of the absorption spectrum of CO and data for BF and N₂. For the $np\sigma$ series and $np\pi$ series converging on the first ionization potential, there is excellent linear behavior (within 10 meV) corroborating (i) the correlation and (ii) the individual assignments. For Rydberg series leading to the $A^2\Pi$ and $B^2\Sigma^+$ states, where no data for BF are available, a comparison of term values for CO and N₂ is presented.

6099-111X

CA 1980 92 or 22

(see BF: III)

CO

Физик. III ч.

1980

спектр
испускания

7 Д806. Спектры испускания и радиационные времена жизни полос Камерона молекул CO в твердых инертных матрицах. Emission spectra and radiative lifetimes of the Cameron bands of CO trapped in solid rare gas matrices, Fournier J., Mohammed Hassan H., Deson J., Vermeil C., Schamps J. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 12, 6039—6045 (англ.)

Исследованы спектры испускания CO ($a^3\Pi-X^1\Sigma^+$) в твердых Ne-, Ar- и Kr-матрицах, возбуждаемые резонансным излучением Xe ($\lambda=147$ нм). По затуханию люминесценции определены времена жизни состояния $a^3\Pi$. Время жизни состояния $a^3\Pi$ в Ne-матрице равно 90 мс. Затухание экспоненциально в пределах ошибки эксперимента. Расчетное значение времени жизни в предположении спин-орбитального смешения состояний $^1\Sigma^+$ и $^3\Pi_0$ равно 94 мс для $J=0$. Времена жизни состояния $a^3\Pi$ в Ar- и Kr-матрицах равны соответственно 7,2 и <1 мс. Уменьшение времени жизни согласуется с матричным сдвигом полосы 0—0 (-305 , -946 и -2812 см $^{-1}$ в Ne-, Ar- и Kr-матрицах соответственно). Библ. 32.

В. С. Иванов

Ф. 1981. № 7

CO

(5)

13 Б140.

1980
Спектры испускания и радиационные вре-

мена жизни полос Камерона молекул CO, изолированных в твердых матрицах инертных газов. Fournier J., Mohammed H. H., Deson J., Vermeil C., Schamps J. Emission spectra and radiative lifetimes of the Cameron bands of CO trapped in solid rare gas matrices. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 12, 6039—6045 (англ.)

Измерены спектры испускания изолированных в матрицах Ne, Ar и Kr молекул CO, возбуждаемые ксеноновой резонансной лампой ($\lambda = 147$ нм). Спектры регистрировались в области полос Камерона, связанных с запрещенным переходом $a^3\Pi - X^1\Sigma^+$. Во всех матрицах наблюдается по 5 переходов — 0—0—0—4. Распределение интенсивностей наблюдаемых полос хорошо согласуется с рассчитанными факторами Франка — Кондона. Измерены сдвиги полос CO в разных матрицах относительно газ. фазы. Во всех случаях обнаружены красные сдвиги, увеличивающиеся от Ne к Kr. Сдвиги полос 0—0 равны -305 ± 30 , -946 ± 70 и -2812 ± 30 см⁻¹

спектр
излучения.

Х. 1981. N 13

в Ne, Ar и Kr, соотв. Измерены времена жизни τ состояния $a^3\Pi$ CO в матрицах из Ne (90 ± 2 мс) и Ar ($7,2 \pm 0,1$ мс). Для Kr получен верхний предел τ , равный <1 мс. Полученные времена жизни хорошо коррелируют с матричными сдвигами полос CO. Показано, что кривая распада состояния $a^3\Pi$ в пределах ошибки эксперимента является экспоненциальной. В предположении спин-орбитального взаимодействия между состояниями $^1\Sigma^+$ и $^3\Pi_0$ рассчитано время жизни верхнего состояния для $I=0$ (94 мс), что отлично согласуется с измеренным значением. Результаты обсуждены в сравнении с лит. временами жизни возбужденных состояний $a^3\Pi$ изолированных в матрицах родственных молекул — GeO, GeS, SnO, SnS, CS.

С. Б. Осин

00

1980

Бадарин С. Г.,

орбискулярно-
колебатель-
ный.

Журнал. Живот. 1980, 6(2),
215-20

см. № 2 - III

1980

CO

92: 137875h Numerical calculation of dipole matrix elements of vibration transitions of diatomic molecules. Gagarin, S. G.; Slovetskii, D. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1980, 48(1), 176-8 (Russ). The anal. potential, proposed by J. N. Murrell and K. S. Sorbie (1974), was used to calc. the dipole moment matrix element of the vibrational-rotational transitions between the 2 states (V' , J') and (V'' , J'') of diat. mols. Calcs. were performed on CO. The Murrell-Sorbie potential and the method of approxn. of the $\mu(r)$ curve are useful in the quantum mech. calcn. of the dipole matrix element.

(fmr)

B054

C.A. 1980. 92, N°6

CO

2/760

1980

расчет
магн.
резонанс.
(γ)

Golebiewski A., et al
Acta phys. pol., 1980,
A57, n4, 585-97.

● (con O₂) III

CO

1980

Grimm F. A., et al

фотон.
спектр.

J. Chem. Phys., 1980, 72,
N5, 3041-48.



(see N2) III

CO

Common 9075 1980.

Halpern J.B., et al.

unmeasured.

Spencer J. Mol. Spectrosc.,

1980, 79, 1-30.

Rotational Line Strengths.

1980

CO

Cr(CO)₆

17 Б51. Эффекты базисного набора в квантовомеханическом описании комплексов переходных металлов. Heijser W., Baerends E. J., Ros P. Basis-set effects in the quantum-mechanical description of transition-metal complexes. «J. Mol. Struct.», 1980, 63, № 1, 109—120 (англ.)

Влияние расширения базисного набора на результаты расчетов дискретно-вариационным методом (ДВМ) исследовано на примере расчета CO (I) и Cr(CO)₆ (II). В случае I рассматривали базисы от одноэкспонентного (ОБ) до двухэкспонентного (ДБ) с добавлением *s*, *p*-, *d*-поляризац. функций. В случае II рассматривали базисы ОБ до ДБ с добавлением поляризац. 3*d*-функций для С и О и доп. набора 3*d*-функций для Cr (во всех случаях основные 1*s*-функции С и О и 1*s*-, 2*s*-, 2*p*-функции

расчет
молекулы

⊕1

⊗

X 1980 N 17

С заморожены). В случае I анализ карт электронной плотности показал, что для удовлетворительного описания распределения электронной плотности необходимо использовать ДБ с добавлением поляризац. функций причем добавление поляризац. *d*-функций приводит к лучшим результатам, чем добавление *s*-, *p*-функций. В случае II расчет в ОБ также дает неудовлетворительное описание электронного строения комплекса, тогда как расчет в ДБ дает распределение электронной плотности в области связи $\text{Cr}-\text{CO}$, а также энергию связи $\text{Cr}+6\text{CO}$ и потенциалы ионизации, близкие полученным в расширенном базисе. Отмечено удовлетворительное согласие рассчитанных в рамках ДВМ и полученных экспериментально карт разностной электронной плотности.

О. Гриценко

CO

1980

Huber H.

Theor. Chim. acta, 1980,
55, N 2, 117-26

кв. мех.
расчет
геометр.
мол-л

См H₂O ; III.

CO

оттиск 9951

1980

11 Д140. Двухатомные молекулы как возмущенные осцилляторы Морзе. V. Центробежное искажение. Dia-

atomic molecules as perturbed Morse oscillators. V. Centrifugal distortion. Huffaker J. N. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 4, 2601—2605 (англ.)

центробежное
искажение

Получены ф-лы для расчета параметров Данхэма Y_{jk} для $k \leq 3$ и произвольного j через параметры возмущенного потенциала Морзе двухатомной молекулы. Параметры Y_{jk} позволяют рассчитать постоянные центробежного искажения $D_v, H_v, \dots$ и т. д. Для молекулы CO на основе модели возмущенного потенциала Морзе найдены параметры Данхэма, и с их помощью воспроизведены колебательно-вращательные уровни E_{vj} основного электронного состояния для $v \leq 28$ и $J \leq 100$. Полученные E_{vj} сравниваются с результатами других обработок с целью показать хорошую сходимость разложений в модели возмущенного осциллятора Морзе. Ч. IV Huffaker J. N. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, 1303. А. Дементьев



ф. 1980
н 11

1980-111-28

CO

1980

груд. к.

Теор. хим. акт, 1980,
57 №2, 104-30

гематрия
и. еван
(2)

свч. H₂-III

CO

1980

изотропные
комптоновские
профили

Kaijser Per
et al.

Mol. Phys, 1980,
41, NS, 1143-1151.

● (см. №2; III)

CO

1980

Katsuki Shinichi, et al.

Int. J. Quantum Chem.

1980, 18, N1, 25-9.



env. N2-15

CO

1980

Krishnan R., et al

расчет
энергии
и равнов.
геометрия

J. Chem. Phys., 1980, 72,
N 1, 650-654.



see Lile; III

CO

1980

Lin C. L.; et al.

(u. n)

J. Quant. Spectrosc.
Radiat. Transfer, 1980,
23 (4), 387-98.

(corr. HCL; III)

9181

1980

14 Б67. Геометрия и си... колебательной частоты
молекулы CO в кристалле... рассчитанный методом
силового поля. ... J., ... K. The geometry
and vibrational frequency... of CO molecules in an
argon matrix studied by force-field calculations. «Chem.
Phys.», 1980, 46, № 3, 457—468 (англ.)
Изучение...

Изучены искажения, возникающие в кристалле Ag вокруг включенной в него молекулы CO, а также сдвиг колебательной частоты этой молекулы, вызванный ее взаимодействием с решеткой Ag (молекула CO замещала один из атомов в гранецентрированной кубич. решетке Ag). При расчетах энергии взаимодействия Ag—CO и геометрии системы использованы атом-атомные потенц. взаимодействия C...Ag и O...Ag в форме, предложенной Букингемом (6- $\exp$); численные значения параметров потенциалов взяты из работы «Chem. Phys.», 1980, 46, № 3, 445. Энергетически наиболее выгодна конфигурация, в к-рой центр масс молекулы CO, ориентированной вдоль крист. оси (0, 0, 1), сдвигается по этой оси на 0,249 Å от центра взаимодействия (к центру движется атом C), а первая оболочка ато-

Di
geometris.
molecul.

№ 1980 N 14

мов Ag, окружающих CO, принимает форму эллипсоида, полуось к-рого лишь на 0,06 Å отличается от радиуса неискаженной оболочки, равного 3,756 Å; отклонение от сферичности для второй оболочки атомов Ag оказывается на порядок меньше, искажениями последующих крист. слоев пренебрегают. Сдвиг центра масс молекулы CO приводит к понижению потенциальной энергии на 1,2 кдж/моль. (с 1,36 до 0,16 кдж/моль). Дальнейшее понижение энергии, связанное с релаксацией решетки, оказывается сравнительно малым и составляет 0,32 кдж/моль. Сдвиг колебательной частоты молекулы CO, рассчитанный для равновесной конфигурации системы, составляет $5,1 \text{ см}^{-1}$ (эксперим. значение $4,7 \text{ см}^{-1}$). Расхождение объясняется влиянием связи CO на невалентные взаимодействия $\text{C} \dots \text{Ag}$ и $\text{O} \dots \text{Ag}$, к-рое учитывается введением в потенциальную функцию CO—Ag дополнительного, слагаемого, описывающего трехчастичные взаимодействия и содержащего один эмпирич. параметр. Учет трехчастичных взаимодействий изменяет сдвиг колебательной частоты CO в пределах нескольких см^{-1} и практически не сказывается на равновесной геометрии системы CO—Ag. В. А. Куприевич

CO

[*Gamma 10270*]

1980.

Mattera L; et al.

repulsive
nucleus,
oxygen

J. Chem. Phys., 1980,
72 (12), 6815-6816

on Ar₂; III

CO

1980

13 B230. Чисто вращательные спектры и вращательные постоянные монооксида углерода, меченной ^{14}C . Mink J., Ayoub A., Kemény G., Kremó R., Kling F. Pure rotational spectra and rotational constants of ^{14}C -labelled carbon monoxide. «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 2, 151—152 (англ.)

На фурье-спектрометре в области частот от 20 до 70 см^{-1} с разрешением 0,2 см^{-1} измерено 14 чисто вращательных переходов со значениями квантового числа J от 5 до 18 для образца $^{14}\text{C}^{16}\text{O}$. Анализ спектра выполнен с учетом квартичного центробежного искажения с использованием полиномиального представления для вращательных состояний. Получены следующие значения вращательной постоянной $B_0 = 1,7689(3) \text{ см}^{-1}$ и постоянной центробежного искажения $D_0 = 8,5(5,5) \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$. Полученные данные хорошо согласуются с известными МВ-измерениями, а также с данными для др. изотопич. образцов монооксида углерода.

С. Н. Мурзин

20 1980 N 13

(см News Lett., 1980, N 124)

CO

1980

7 Д404. Вращательные спектры и вращательные постоянные окиси углерода, содержащей C^{14} . Pure rotational spectra and rotational constants of ^{14}C -labelled carbon monoxide. Mink J., Ayoub A., Kemény G., Kremó R., Kling F. «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 2, 151—152 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения окиси углерода, обогащенной изотопом ^{14}C , в области $20-75\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,2\text{ см}^{-1}$ при давл. 68 кПа. С точностью $3 \cdot 10^{-2}\text{ см}^{-1}$ определены частоты линий с J от 5 до 18. По частотам рассчитаны вращательные постоянные B_0 и D_0 .

М. Т.

ф. 1980. №

CO

Литтиск 10084

1980

23 Б27. Сравнение метода ЛКАО-Х α с методами Хартри — Фока и Х α -рассеянных волн на примере окиси углерода. Mintmire J. W., Sabin J. R. A comparison of the LCAO-Х α method with the Hartree-Fock and multiple-scattering-Х α methods on carbon monoxide. «Chem. Phys.», 1980, 50, № 1, 91-103 (англ.)

кв. мех.
Hartree,
(7)

Проведены расчеты молекулы СО методами ЛКАО-Х α , Хартри — Фока (ХФ) и Х α -РВ. Использована модифицированная версия исходного метода ЛКАО-Х α Самбе и Фелтона (МСФ), в котором подгонка электронной плотности ρ производится по несферич. гауссовым функциям (вплоть до f). По уточненной ф-ле рассчитывается энергия кулоновского межэлектронного взаимодействия:
$$\int \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) r_{12}^{-1} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 \approx 2 \int \rho(r_1) \times \times \tilde{\rho}(\vec{r}_2) r_{12}^{-1} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 - \int \tilde{\rho}(\vec{r}_1) \tilde{\rho}(\vec{r}_2) r_{12}^{-1} d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2$$
, где $\tilde{\rho}(\vec{r})$ — приближенная электронная плотность. Как в методе ХФ,

Х. 1980
N 23

так и в ЛКАО- $X\alpha$ использован одинаковый базис (9s, 5p) на атомах С и О. Подгонка ρ и $\rho^{1/3}$ проводилась по 64 примитивным гауссовым функциям, сгруппированным в 34 функции цилиндрич. симметрии. В обоих $X\alpha$ -расчетах взято одинаковое $\alpha = 0,75006$. Наилучшее согласие с экспериментом характеристик потенциальной кривой СО обнаружено для ЛКАО- $X\alpha$. Метод $X\alpha$ -РВ приводит к отталкивательному характеру потенциала. Рассчитанные в рамках метода ЛКАО- $X\alpha$ значения потенциалов ионизации лучше согласуются с экспериментом, чем результаты расчетов по ХФ и $X\alpha$ -РВ. В методе ЛКАО- $X\alpha$ удовлетворительно воспроизводится также дипольный момент СО.

М. Кузьминский



CO

Лоттмак 10084

1980

11 Д85. Сравнение метода ЛКАО $X\alpha$ с методами Хартри — Фока и $X\alpha$ рассеянных волн для окиси углерода. A comparison of the LCAO- $X\alpha$ method with the Hartree-Fock and multiple-scattering- $X\alpha$ methods on carbon monoxide. Mintmire John W., Sabin J. R. «Chem. Phys.», 1980, 50, № 1, 91—103 (англ.)

Методом ЛКАО $X\alpha$, неэмпирич. методом Хартри — Фока (ХФ) и методом $X\alpha$ рассеянных волн (РВ) исследовано электронное строение CO для интервала междьядерных расстояний 1,5—3 ат. ед. Использован базис гауссовых ф-ций 9s5p. Рассчитанные потенц. кривые для ЛКАО $X\alpha$ и ХФ приводят к близким и хорошо согласующимся с эксперим. данными результатам, тогда как

электр.
строение,
потенциал,
кривые
(у)

ф. 1980 г. 68

метод РВ минимума не обнаруживает. Методы ЛҚАО и ХФ $X\alpha$ приводят также к хорошо согласующейся с эксперим. значением частоте валентного колебания, а для энергии диссоциации и дипольного момента согласие даже лучше, чем в случае ХФ; причины этого подробно проанализированы при рассмотрении карт электронной плотности. Рассчитанные методом ЛҚАО $X\alpha$ первые 4 потенциала ионизации согласуются с эксперим. данными существенно лучше, чем в методе РВ и даже несколько лучше, чем в случае ХФ. В. Л. Лебедев

CO

Lommick 1084

1980

V93: 138256q A comparison of the LCAO- $X\alpha$ method with the Hartree-Fock and multiple-scattering- $X\alpha$ methods on carbon monoxide. Mintmire, John W.; Sabin, J. R. (Quant. Theory Project, Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). Chem. Phys. 1980, 50(1), 91-103 (Eng). The results of the LCAO- $X\alpha$ method of B. I. Dunlap et al., (1979), based on the Slater $X\alpha$ exchange potential are compared with the results of the Hartree-Fock method and the MS $X\alpha$ method. Identical orbital basis sets were used for the LCAO- $X\alpha$ and LCAO-HF calcs. with the outcome that the LCAO- $X\alpha$ results are close to exptl. results for CO, with equal or better agreement with expt. than the LCAO-HF results.

Кв. мех.
факт

C.A. 1980, 93, N14

CO

1980

14 Б66. Молекула окиси углерода в кристаллической решетке аргона: эмпирическая оценка параметров потенциальной энергии взаимодействия $\text{Ar} \dots \text{Ar}$, $\text{C} \dots \text{Ar}$ и $\text{O} \dots \text{Ar}$. Mirsky K. Carbon monoxide molecules in an argon matrix: empirical evaluation of the $\text{Ar} \dots \text{Ar}$, $\text{C} \dots \text{Ar}$ and $\text{O} \dots \text{Ar}$ potential parameters. «Chem. Phys.», 1980, 46, № 3, 445—455 (англ.)

расчет
парамет.
потенц.
энергии

Метод атом-атомных потенциалов использован для расчета взаимодействия в монокристалле Ar, содержащем молекулы CO. Потенциал взаимодействия $\text{CO} \dots \text{Ar}$, представленного суммой взаимодействий $\text{C} \dots \text{Ar}$ и $\text{O} \dots \text{Ar}$, позволяет удовлетворительно описать показания, вносимые молекулой CO в крист. структуру Ar, а также воспроизвести сдвиг колебательной частоты и либрац. спектра молекулы CO в кристалле Ar. Результаты расчета потенциальной поверхности взаимодействия $\text{Ar} \dots \text{CO}$ показывают ориентационную зависимость энергии взаимодействия, обусловленную несферичностью молекулы CO. Для равновесного расстояния $\text{Ar}-\text{CO}$ получено значение 3,63 Å, а для глубины потенциальной ямы — значение — 1,321 кДж/моль; равновесные расстояния $\text{C} \dots \text{Ar}$ (3,83 Å) и $\text{O} \dots \text{Ar}$ (3,56 Å) для димера $\text{CO}-\text{Ar}$ оказы-

№ 1980 N 14

ваются несколько больше, чем соответствующие суммы ван-дер-ваальсовых радиусов (2,2—3,7 и 3,2—3,4 Å). Атом-атомная потенциальная функция выбрана в форме $\varphi = -A_{\alpha} r^{-6} + B \exp(-\alpha r)$. Численные значения параметров потенциалов взаимодействия С...Аг и О...Аг получены из значений параметров С...С, О...О и Аг...Аг с использованием известных комбинац. правил и составляют: $A_{\text{С...Аг}} = 3379$ кдж/моль·Å⁶, $B_{\text{С...Аг}} = 3,12 \times 10^5$ кдж/моль, $\alpha_{\text{С...Аг}} = 3,493 \text{ Å}^{-1}$; $A_{\text{О...Аг}} = 2737$ кдж/моль·Å⁶, $B_{\text{О...Аг}} = 3,28 \times 10^5$ кдж/моль, $\alpha_{\text{О...Аг}} = 3,706 \text{ Å}^{-1}$. Параметры потенциалов взаимодействия С...С и О...О взяты из лит. данных и позволяют хорошо воспроизвести крист. структуру и теплоты сублимации модельных соединений; параметры потенциальных функций Аг...Аг ($A_{\text{Аг...Аг}} = 6554$ кдж/моль·Å⁶, $B_{\text{Аг...Аг}} =$

$= 3,27 \times 10^5$ кдж/моль, $\alpha_{\text{Аг...Аг}} = 3,305 \text{ Å}^{-1}$) подобраны по эксперим. данным для кристаллов Аг — величинам равновесной постоянной решетки и ее энергии при нулевой т-ре, величине изотермич. сжимаемости. Предложенные потенциальные функции взаимодействия Аг...Аг и СО...Аг более удобны для использования в крист. расчетах и лучше согласуются с эксперим. данными, чем потенциальные функции, имеющиеся в лите-

В. А. Куприевич

CO

1980

Mohammad N.S.

колебат.
вращ.
сост.

Int. J. Quantum Chem.,
1980, 17; N 5, 943-954.

● колебат. вращ. сост.
(см 2^у атом. масс.) III

CO

1) 1 Д84. Возбуждение низкоэнергетическим электронным ударом и радиационный распад $d^3\Delta$ -состояния CO. 1980
 Low energy electron impact excitation and radiative decay of the $d^3\Delta$ state of CO. Paske W. C., Twist J. R., Garrett A. W., Golden D. E. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 11, 6134—6139 (англ.)

возбужден.
 Эл. ударом

Проведено детальное изучение времен жизни (τ) молекулы CO на уровнях $v=4,5$ $d^3\Delta$ -состояния, возбуждаемых при электронном ударе. Регистрация распада возбуждаемых состояний проводилась по интенсивности излучения с помощью многоканального анализатора. Энергия электронов выбиралась ниже порога возбуждения $B^1\Sigma^+$ -состояния. Значения τ определены из экстраполяции измерений в области давл. $(1-20) \cdot 10$ мм рт. ст. на нулевое давление и составляют (в мсек) $4,67 \pm 0,33$ ($v=4$), $4,02 \pm 0,32$ ($v=5$) для $^3\Delta_{2,3}$ -подполос и $4,27 \pm 0,31$ ($v=4$), $3,69 \pm 0,34$ ($v=5$) для $^3\Delta_1$ -подполос. Для изучаемых уровней обнаружено присутствие долгоживущей каскадной компоненты с временем жизни $16,1 \pm 0,9$ мсек ($v=4$) и $13,3 \pm 1,1$ ($v=5$). Обсуждается соответствие полученных результатов по временам жизни и сечениям тушения и имеющихся в литературе и возможные причины существующих расхождений.

ф. 198/1/1

А. Ф. Шестаков

оттиски 10.17.5

CO

оттиски 10.175

1980

3 Б107. Возбуждение электронным ударом с низкой энергией и излучательный распад состояния $d^3\Delta CO$. Paske W. C., Twist J. R., Garrett A. W., Golden D. E. Low energy electron impact excitation and radiative decay of the $d^3\Delta$ state of CO. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 11, 6134—6139 (англ.)

Методом запаздывающих совпадений определены времена жизни (τ) и сечения тушения при столкновениях (σ) для уровней $v'=4,5$ компонент мультиплета $d^3\Delta CO$. Спектры (переход $d^3\Delta (v'=4,5) \rightarrow a^3\Pi (v''=0)$ CO) возбуждались электронным ударом с низкой энергией (9,8 и 11,3 эв). Значения λ ($v'-v''=0$ (А), мгновенных и каскадных времен жизни (τ_m , τ_k) (в мкс) и сечений тушения (σ_m , σ_k) (A^2) CO ($d^3\Delta$): $v'=4$, $^3\Delta_1$ 5982, $\tau_m=4,27$, $\sigma_m=33,3$, $^3\Delta_2$ 6010, $\tau_m=4,68$, $\tau_k=27,8$, $^3\Delta_3$ 6034, $\tau_m=4,65$, $\tau_k=22,5$, $\tau_k(^3\Delta_{1,2,3})=16,1$, $\sigma_k(^3\Delta_{1,2,3})=25,5$; $v'=5$, $^3\Delta_1$ 5624, $\tau_m=3,69$, $\sigma_m=4,0$, $^3\Delta_2$ 5647, $\tau_m=4,02$, $\sigma_m=3,65$, $^3\Delta_3$ 5670 $\tau_m=4,02$, $\sigma_m=3,65$, $\tau_k(^3\Delta_{1,2,3})=13,3$, $\sigma_k(^3\Delta_{1,2,3})=22,8$. Изменение τ в зависимости от I не наблюдалось. Коэф. ветвления ($d-X$): ($d-a$) для $v'=4$ и 5 равны 0,093 и 0,088. Полученные результаты сопоставляются с данными по τ_m и σ_m , полученными ранее др. методами. В. М. Ковба

Эл. удар,
(τ)

У. 1981 N 3

CO

1980

NiCO

кв. мех.
расчет

10 Д98. Натуральные гибридные орбитали: результаты расчетов CO и NiCO неэмпирическим методом ССП и КВ. Natural hybrid orbitals. Ab initio SCF and CI results for CO and NiCO. Rives A. B., Weinhold F. — Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 10—20, 1980. — «Int. J. Quantum Chem.», 1980, Quantum Chem. Symp. № 14, 201—209 (англ.)

Предложенная ранее процедура построения натуральных гибридных орбиталей (НГО) обобщена на случай волн. ф-ций ССП и КВ в миним. и расширенном базисах. По этой схеме проанализированы волн. ф-ции CO и NiCO, рассчитанные неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО в миним. и двухэкспонентном базисах сгруппированных гауссовых ф-ций и методом КВ с частичным (339 конфигураций) учетом одно- и двукратновозбужденных конфигураций. Проанализиро-

⊕ 1

☒

Ф. N10. 1981

вано влияние расширения базиса и учета корреляции электронов на форму НГО. Отмечено, что такие характерные свойства, как *p*-характер гибридов и поляризация связей хорошо воспроизводятся даже в миним. базисе. Расширение базиса приводит к некоторой де-локализации натуральных орбиталей неподеленных пар, а учет корреляции — к увеличению заселенности π^* -МО СО. В соответствии с качественными химич. соображениями показано, что координация СО к атому Ni приводит к поляризации неподеленной пары электронов атома С по направлению к атому Ni и смещению π -электронной плотности связи С—О к атому О.

CO

ommua 9950

1980

Requena A; et al.

factes
molecules;
Ei

Int. J. Quant. Chem., 1980,
17, 931-42.

1980

11 В262. Перенос колебательной энергии от CO($v=1$), N₂($v=1$), CO₂(001), N₂O(001) и OCS(001) к O₃. Robertshaw J. S., Smith I. W. M. Vibrational energy transfer from CO($v=1$), N₂($v=1$), CO₂(001), N₂O(001) and OCS(001) to O₃. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 10, 1354—1370 (англ.)

Исследована колебательная релаксация по флуоресценции в газовых смесях двухатомных [CO (I), N₂ (II)] и трехатомных [CO₂ (III), N₂O (IV), OCS (V)] молекул с озоном (O₃). Для выяснения доминирующего механизма переноса энергии от I—V к O₃ проведены теор. вычисления вероятностей столкновительного переноса по модифицированной теории Шарма — Брау и показано, что релаксация для исследованных возбужденных молекул I—V идет в основном через колебательно-колебательный (V—V) обмен энергией с O₃. Получены след. значения для постоянных скорости релаксации [для T = (294 ± 4) K]:

CO($v=1$) + O ₃ :	$k_3 = (3,6_{-0,3}^{+0,1}) \cdot 10^{-13}$ см ³ мол ⁻¹ с ⁻¹ ;
N ₂ ($v=1$) + O ₃ :	$k_6 = (2,4_{-0,9}^{+0,7}) \cdot 10^{-13}$ см ³ мол ⁻¹ с ⁻¹ ;
CO ₂ (001) + O ₃ :	$k_7 = (9,3 \pm 0,4) \cdot 10^{-13}$ см ³ мол ⁻¹ с ⁻¹ ;
N ₂ O(001) + O ₃ :	$k_{11} = (2,8 \pm 1,0) \cdot 10^{-13}$ см ³ мол ⁻¹ с ⁻¹ ;
OCS(001) + O ₃ :	$k_{13} = (1,7 \pm 0,6) \cdot 10^{-12}$ см ³ мол ⁻¹ с ⁻¹ .

CO
N₂
CO₂
N₂O
OCS
(+4)
рассматрив.
свойства
температура
де. 1981. № 11

Определены также постоянные скорости релаксации для др. колебательных процессов, постоянные первого порядка для флуоресценции; приведены вычисленные и эксперим. вероятности переноса энергии. Возбуждение молекул I—V осуществлено электронно-колебательным ($E-V$) переносом энергии от $O(^1D)$ атомов, полученных в результате лазерного импульсного фотолиза O_3 при 275 нм. Приведена и описана блок-схема эксперим. установки. Отмечена важность полученных постоянных скорости релаксации для расчета хим. лазеров, для выяснения механизмов переноса энергии в потоках в верхней атмосфере.

В. М. Михайлов

CO

1980

Seeger G., et al

RB. ucl.
paorei

Int. J. Quantum Chem.
1980, 17, n5, 955-68.

(core H₂) III

CO

1980.

Tatewaki H., et al.

Int. J. Quantum Chem.

u.h. 1980, Quantum Chem.

Symp. N 14, 93-106.



(Cur. F2 ; III)

CD

1980

Tavouktsoglou A.N., et al.

J. Chem. Phys., 1980, 72,
N 2, 1385-1391.

расчет
равнов.
конст.
E; М.П.



см N 2 ; III

CO

Lomnick 12736 | 1980.

Tripathi R., Rai S.B.

from
M.N.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1980, 18,
372-74.

Went
CO

annua 9944

1980

Trivedi H.P. et al

paet
nn.

J. Chem. Phys., 1980, 72,
N5, 3438-39.

● (see Ref) III

CO.

Number 9973

1980

Tsuji M., et al.

Э.И. Переход,
Е; спектр
ионизации.

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Phys., 1980, 34,
273-86

( cm. OCS⁺; 14)

CO

Commu 9740 | 1980

Varandas A. J. C.

fact.

Nonces.

p-547

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1980, 76,
129-135

CO

93: S3787f The isotope dependence of diatomic Dunham coefficients. Watson, James K. G. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, Engl. SO9 5NH). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(2), 411-21 (Eng). The isotope dependence of the Dunham vibration-rotation coeffs. Y_{kl} of a diat. mol. was studied. Rovibronic interactions between different electronic states are taken into account by transformation to an effective

vibration-rotation Hamiltonian for each electronic state. This contains modified vibrational and rotational reduced masses as well as the adiabatic correlation of the potential energy. The effects of these contributions on the vibration-rotation energies are expressed in terms of 2 functions $\tilde{R}_i(r)$ and $\tilde{S}_i(r)$ for each atom i . The resultant formula for Y_{kl} is $Y_{kl} = \mu_c^{-(k+2l)/2} U_{kl} (1 + m_c \Delta_{kl}^b / M_b + O(m_c^2 / M_i^2))$, where U_{kl} , Δ_{kl}^a , and Δ_{kl}^b are isotopically invariant, M_a and M_b are the at. masses, and $\mu_c \equiv M_a M_b / (M_a + M_b - C m_c)$ is the at. reduced mass, modified by the mol. charge no. C for charged species. The U_{kl} with $l \geq 2$ can be calcd. from those with $l = 0$ and 1. The corrections $U_{kl} \Delta_{kl}^i$ are related to the functions $\tilde{R}_i(r)$ and $\tilde{S}_i(r)$ and to the Dunham correlations. Recent data for the CO mol. are discussed, and it is suggested that some large Δ_{kl}^i values are assocd. with accidentally small U_{kl} values, since the size of $U_{kl} \Delta_{kl}^i$ is not directly related to that of U_{kl} .

M. N.

(+) 2 х ат.
молек.

Котер.

ДЕНТМА



CA 198023 N8

1980

10075

CO

Lomnick 9668 | 1980

Кривые
потенц.
энергии,
расчет
 E_j

Wilson S., et al.

J. Chem. Phys., 1980,
72 (3), 2159-65.



(con N₂) III

CO

ommuca 12090

1981.

Adams G.F., et al.

молекула.
количество

chem. Phys. Lett;

1981, 81 (3), 461-66

(Do)

$\text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}$ (see, CH_3OH ; III)

CO

DMMLCK 12298

1981

NeHe

КВ, мкс.
 факт,
 номер.
 кривая

(+1) ☒

C.A. 1981, 95, N16.

95: 139068h Application of an approximate double substitution coupled cluster (ACCD) method to the potential curves of carbon monoxide and neon-helium (NeHe): higher order correlation effects in chemically and weakly bonded molecules. Bachrach, Steven M.; Chiles, Richard A.; Dykstra, Clifford E. (Dep. Chem., Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(5), 2270-5 (Eng). The recently introduced approx. double substitution coupled cluster (ACCD) method (C. et al., 1981) is applied to two diatomics: CO and NeHe. Application to these two diatomics provides an opportunity to compare higher order correlation effects in chem. bonded and weakly attractive species. The ACCD agrees quite well with double-substitution coupled cluster (CCD) for both systems. However, the higher order correlation effects seem much less important in NeHe than in CO, where CCD reduces the error in the prediction of the vibrational frequency by a factor of 3 over a variational treatment that accounted only for singly and doubly substituted correlating configurations.

CO

Оттиск 12298

1981

расчет
потенц.
кривых

3 Д68. Применение приближенного метода двойного замещения связанного с кластерным разложением к расчету потенциальных кривых CO и NeHe. Учет корреляционных эффектов высокого порядка в химически и слабо связанных молекулах. Application of an approximate double substitution coupled cluster (ACCD) method to the potential curves of CO and NeHe. Higher order correlation effects in chemically and weakly bonded molecules. Bachrach Steven M., Chiles Richard A., Dykstra Clifford E. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 5, 2270—2275 (англ.)

Предложенный ранее (Chiles R. A., Dykstra C. E. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, 4544) т. наз. метод двойного замещения, связанный с кластерным разложением, применяется к расчету потенц. кривых основного состояния молекулы CO и ван-дер-ваальсова комплекса NeHe. Метод разработан для учета корреляционных эффектов высокого порядка, ответственных, в частности, за слабое ван-дер-ваальсово притяжение между атомами с

Ф. 1982, 18, №3

замкнутыми оболочками (напр., атомов инертных газов), для которых обычный метод ССП и приближения КВ с небольшими базисными наборами потенциала притяжения не дают. В предлагаемом подходе используется комбинация метода электронного парного оператора, включающего однократно и двукратно замещенные конфигурации, и метода кластерного разложения, операторы которого, действуя на ф-ции, соответствующие двукратному замещению некоторой референтной замкнутой ф-ции, вводят между последними эффективную связь, учитывая т. обр. корреляционные эффекты высокого порядка. Проводится сравнение на примерах СО и NeNe влияния этих эффектов в химически и слабо связанных системах. Найдено, что во втором случае эти эффекты играют заметно меньшую роль чем в первом. Проводится сравнение с результатами точного метода двойного замещения. Найдено, что используемый здесь его приближенный вариант дает достаточно точные результаты.

А. А. Зембеков

CO Lotruck 12815 1981

Bohm cl.c., Gleiter &
Theor. chim. acte, 1981,
59(2), 153-179.

CO

[Dmmex 13006]

1981

(remerci
-2-0 nonoch)

/ 95: 228620z Absorption intensity measurements of the first overtone band of carbon monoxide. Chandraiah, G.; Hebert, G. R. (Dep. Phys., Mem. Univ. Newfoundland, St. John's, NF Can. A1B 3X7). *Can. J. Phys.* 1981, 59(10), 1367-72 (Eng). The abs. intensity A_{2-0} of the 2-0 band of CO was measured with He and Ar as pressure broadening gases at pressures up to 600 amagat. A sep. band intensity value was derived from the measurements of several P-branch line intensity data and the Herman-Wallis formula. The best value obtained is $A_{2-0} = (2.11 \pm 0.08) \text{ cm}^{-2}\text{-amagat}^{-1}$. The square of the rotationless matrix element, $|R_{2-0}(0)|^2$ is $(4.39 \pm 0.02)10^{-5} \text{ D}^2$, as estd. from the measured line intensity values.

C. A. 1981, 95, N26.

CO

1981

Chojnacki M., et al.

ср. вост., Acta Phys. Pol. A 1981,
Ze. A60 (5), 687-695.

● (ср. N₂; III)

CO

Оттиск 11458

1981

18 Б37. Теоретическое изучение некоторых синглетных и триплетных состояний молекулы CO. Cooper D. M., Langhoff S. R. A theoretical study of selected singlet and triplet states of the CO molecule. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 2, 1200—1210 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые состояний $X^1\Sigma^+$, $B\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+$, $(4)^1\Sigma$, $1^1\Sigma^-$, $A^1\Pi$ и $a^3\Pi$ молекулы CO. В базисный набор, состоявший из 48 орбиталей слейтеровского типа, включены диффузные ф-ции для описания ридберговских состояний $B^1\Sigma^+$ и $C^1\Sigma^+$. Расчеты проведены методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с использованием орбиталей, полученных методом Хартри—Фока для состояний $X^1\Sigma^+$ и $A^1\Pi$. В результате отбора конфигураций (на основе их вкладов в корреляц. энергию по теории возмущений Релея—Шредингера), строилась волновая ф-ция, включавшая ~10 000 конфигураций, после чего проводилась экстраполяция энергии для учета конфигураций, не включен-

ш.п.; E_i

Ж 1981 N 18

ных в эту ф-цию. Вычисл. потенциальные кривые и
 определенные на их основе спектроскопич. постоянные
 r_e , T_e , ω_e и $\omega_e x_e$ хорошо согласуются с эксперим. дан-
 ными, особенно для низколежащих состояний. Для со-
 стояний $X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$ и $a^3\Pi$ получены кривые дипольных
 моментов. Вычислены моменты переходов $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$,
 $B^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ и $(4)^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$ и излучатель-
 ные времена жизни состояний $A^1\Pi$, $B^1\Sigma^+$ и $C^1\Sigma^+$, со-
 ставляющие для низшего колебательного уровня 6,2—
 9,9; 11,2 и 2,1 нс соответственно. А. Сафонов

CO

Оттиск 11458

1981

10 Д48. Теоретическое исследование отдельных синглетных и триплетных состояний молекулы CO. A theoretical study of selected singlet and triplet states of the CO molecule. Cooper David M., Langhoff Stephen R. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 2, 1200—1210 (англ.)

Методом ССП+КВ в расширенном слэтеровском базисе рассчитаны потенц. кривые для состояний $X^1\Sigma^+$, $B^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+$, $(4)^1\Sigma^+$, $I^1\Sigma$, $A^1\Pi$ и $a^3\Pi$ молекулы CO. Рассчитанные значения спектроскопич. постоянных T_e , R_e , ω_e , $\omega_e x_e$ находятся в хорошем согласии с экспериментом. Для состояний $X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$ и $a^3\Pi$ рассчитаны функции дипольного момента $\mu(R)$, согласующиеся с результатами ранних теоретич. работ и подтверждающие ошибочность полученных Вики и Клемперером эксперим. данным по $\mu(R)$ для состояния $a^3\Pi$. Рассчитаны дипольные моменты переходов для систем полос $A^1\Sigma - X^1\Sigma^+$, $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ и $(4)^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$. Эти моменты сильно меняются при изменении межатомного расстояния. Оценены времена жизни для низших колебательных уровней состояний $A^1\Pi^-$, $B^1\Sigma^+$ и $C^1\Sigma^+$ (6,2—9,9; 11,2 и 1,2 нсек соответственно). В. И. Барановский

(Ei)

ф.10.1981

CO

Dmmuck 12088

1981

 $(a^3\Pi, d^3\Delta)$

95: 177945z Laser-excitation study of triplet carbon monoxide. Clyne, Michael A. A.; Heaven, Michael C. (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, Engl., E1 4NS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1981, 77(8), 1375-86 (Eng). Metastable $\text{CO } a^3\Pi(v=0)$ mols., at concns. near 10^8 - $10^9/\text{cm}^3$, were produced by the reaction $\text{Ar}(^3P_{2,0}) + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}(a^3\Pi) + \text{O} + \text{Ar}$, and narrow-band excitation with a dye laser was used to form the $d^3\Delta$ state of CO, which was obsd. through fluorescence of the d - a transition. Rotationally resolved d - a laser excitation spectra were detd. Lifetime measurements of the $d^3\Delta$ state were made from fluorescence decays, following initial excitation of the $v=5$ and $v=4$ vibrational levels. The zero-pressure lifetime of $\text{CO } d^3\Delta(v=4)$ is $5.75 \mu\text{s}$. Vibrational relaxation of $\text{CO } d^3\Delta(v=4)$ in collisions with Ar is efficient, with a probability of $\sim 10^{-2}$. Relaxation is explained in terms of collisional curve crossing, probably to the $e^3\Sigma$ -state, rather than by vibrational-translational transfer. Lifetime measurements on $d^3\Delta(v=5)$ support the existence of a strong, rotationally dependent perturbation in the $J=1$ component of this state.

C.A. 1981, 95, ~20

CO

Оттиск 12088 1981

2 Б217. Изучение триплетного CO методом лазерного возбуждения. Clyne Michael A. A., Heaven Michael C. Laser—excitation study of triplet CO. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1981, Part 2, 77, № 8, 1375—1386 (англ.)

Используя узкополосный импульсный перестраиваемый лазер на красителе измерены спектры возбуждения и флуоресценции молекулы CO, связанные с переходом $d^3\Delta - a^3\Pi$. Молекулы CO ($a^3\Pi$, $v=0$) получали

(в конц-иях $10^8 - 10^9$ см $^{-3}$) при взаимодействии следовых кол-в CO $_2$ с потоком атомов Ag($^3P_{2,0}$) (разряд низкой мощности в полом катоде). При регистрации спектров возбуждения измеряли общую интенсивность флуоресценции, связанной с переходом $d-a$. Приведены некоторые детали эксперимента касающиеся получения CO($a^3\Pi$) и лазерной системы возбуждения спектров. В спектрах возбуждения разрешена вращательная структура перехода. Исследована кинетика флуоресцентного распада на линиях R $_2$ (5), Q $_1$ (9), P $_{31}$ (10) полосы 4—0 и начального возбуждения полосы 5—0. Най-

Vi, м.п.

X, 1982, 1945,
№2.

денные времена жизни для $\bar{v}=4$ при предельном нулевом давлении составляют $5,75 \pm 0,70$ мксек. Изучено влияние давл. аргона на колебательную релаксацию молекул СО. Предполагается, что при столкновениях происходит не $V-T$ -перенос энергии, а имеет место безызлучательный переход между состояниями $d^3\Delta$ и $e^3\Sigma^-$, потенциальные кривые которых пересекаются. Данные по времени жизни СО($d^3\Delta$, $v=5$) подтверждают существование сильного возмущения в случае компоненты $\Omega=1$ состояния d . В. М. Ковба

CO

1981

Eade R. H. A., et al.

parcours

Chem. Phys. Lett., 1981,
83, N2, 362-368.



(cell. N₂ ; III).

CO

1981

95: 105788c Temperature-compensated, high-resolution infrared absorption spectroscopy: application to carbon monoxide. Fisher, Charles J.; Dixon, W. Paul (AEDC Div., Sverdrup/ARO Inc., Arnold Air Force Station, TN 37389 USA).

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 1981, 26(3), 281-4 (Eng). The analytic basis is presented for an optical absorptance technique on CO suitable for a single line-of-sight detn. of a gaseous species no. d. in the presence of concn., pressure and temp. gradients and of particulate loading. The technique depends on the use of high-resoln. IR (tunable diode laser) spectroscopy. The method requires the construction of functions of mol. line strengths that are nearly temp. independent. A method for constructing these functions is described.

спектр.
высокого
разрешения

C. A. 1981, 95, N 12.

CO

Lammuck 12732 | 1981.

Fliszar S., et al.

Кв. мех.
фрагмент

Canad. J. Chem., 1981,
59, 1074-82

CO

Оттиск 11721 1981

1 Б451. Исследование сверхтонкой структуры $C^{17}O$.
Frerking Margaret A., Langer William D.
A measurement of the hyperfine structure of $C^{17}O$.
«J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6990—6991 (англ.)

Выполнены радиоастрономич. исследования СТС вращательного перехода $J=1-0$ молекулы $C^{17}O$. Определены интенсивности и частоты линий СТС. Из этих данных вычислены константы электр. квадрупольного и магнитного дипольного взаимодействий, равные $4337 \pm \pm 56$ и $-30,4 \pm 1,2$ кГц. Л. А. Корытко

лл-п.

X.1982, 19AB, N1.

CO

1981

колебам.
структ. в
основном и
возв. ж. состоянии

(кв. мех. расч.)

№ 95: 176176n Quantum-mechanical analysis of physico-chemical properties of vibrationally excited molecules in external electric fields. I, Electrostatic interaction of a charged active center with a carbon monoxide molecule in ground ($X^1\Sigma^+$) and excited ($d^3\Delta, a^3\Sigma^+$) electron states. Gagarin, S. G.; Chuvylkin, N. D. (Inst. Org. Khim., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1981, 55(9), 2336-41 (Russ). The vibrational structure of CO in ground ($X^1\Sigma^+$) and electronically-excited ($d^3\Delta, a^3\Sigma^+$) states was calcd. quantum mech. by taking into consideration the interaction of the mol. dipole moment with a point charge (e.g., an active center on a catalyst surface). The probabilities of spontaneous vibrational transitions for CO longitudinally coordinated by a point charge are presented. The elec. field of a Coulomb center appreciably affects the vibrational characteristics of CO.

C.A. 1981, 95, n20.

CO

(Dmmuck 14465) 1981
Gaspar R., et al.

Acta Phys. Acad. Sci.

High. 1981, 50 (4),
359-365.

( air. N₂ ; III)

CO

1981

George Philip Tracht
man Mendel., et al.

Кб. длк.
раери.

J. Comput. Chem., 1981,
2, N3, 334-346.

●
(сир. MF; III)

CD

[Ummuck 18408]

1981

Kb. mex.
Fraser

Gollisch H.,

Z. Phys. B: Atom and
Mol. Phys., 1981, 14, N23,
4457-4467.

(see Bez: III)

CO

1981

Фурье-
спектроскопия

95:32951p Differential Fourier spectroscopy with simultaneous interferograms: application to extensive accurate pressure-shift measurements. Guelachvili, G. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris XI, F-91405 Orsay, Fr.). *Appl. Opt.* 1981, 20(12), 2121-32 (Eng). A new method is described, allowing cancellation of systematic effects in the comparison between different spectra recorded with a general purpose high-information Fourier spectrometer. Preliminary tests on pressure-shift measurements of the 1-0 vibration-rotation band of CO at 5 μm demonstrate improvement in the sensitivity and the precision of 2 orders of magnitude. With a Signal-noise ratio of ~ 200 , no evidence of systematic shifts due to the method itself exists over 10^{-6} cm^{-1} (30 KHz). (This corresponds, for example, to an astronomical radial velocity of 0.15 ms^{-1}). Wave no. pressure shifts due to 5 torr of CO are easily detectable. The 50 analyzed lines of the CO band belong to 300,000 spectral elements recorded in spectra covering 1000 cm^{-1} . This clearly indicates that accurate pressure-shift measurements of very extensive spectra become possible. The method has also all the known advantages of differential spectroscopy performed here for the 1st time with Doppler-limited resolu.

C.A. 1981.95N4

CO

ommica 12009 1981.

Haack W.; Langel W.

спектр
люминесц.,
фотолиз,
с образцов.
(C₂)

Chem. Phys. Lett;
1981, 81(3), 387-390.



CO

Оттиск 11947 1981

2 Б219. Индуцированная лазером флуоресценция из состояния $A^1\Pi$ CO. Hancock G., Zacharias H. Laser — induced fluorescence from CO($A^1\Pi$). «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 3, 402—404 (англ.)

Исследована ВУФ флуоресценция CO, возбуждаемая с высоколежащих колебательных уровней ($v=11, 12, 14, 15$) основного электронного состояния. Молекулы CO($X^1\Sigma^+, v''$) получали при взаимодействии атомарного кислорода (МВ-разряд) с $CS_2(O_2 \rightarrow 2O, O + CS_2 \rightarrow CS + SO, O + CS \rightarrow CO(X, v'') + S, Ag/O_2/CS_2 = 1000:10:1, p \sim 1 \text{ мм})$. Использован след. комбинированный источник УФ-возбуждения (213—230 нм). Удвоенное по частоте излучение импульсного перестраиваемого лазера, накачиваемого второй гармоникой неодимового лазера (278—295 нм), пропускали через оптич. ячейку со сжатым водородом и далее излучения, связанные со вторым и третьим антистоксовыми КР переходами, использовали для возбуждения CO(X, v''). Спектры возбуждения флуоресценции измерены для полос 3—11, 4—12, 5—14 и 6—15 перехода $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$. В. М. Ковба

М.П.

X. 1982, 1945, № 2.

CO

Оттиск 11947

1981

2 Д948. Возбуждаемая лазером флуоресценция $\text{CO}(A^1\Pi)$. Laser-induced fluorescence from $\text{CO}(A^1\Pi)$. Hancock G., Zacharias. H. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 3, 402—404 (англ.).

спектр
флуоресц.

При возбуждении с высоких колебательных уровней молекул $\text{CO}(X^1\Sigma^+)$, образующихся в результате реакции $\text{O} + \text{CS}$, лазерным УФ-излучением, зарегистрирована ВУФ-флуоресценция из состояния $\text{CO}(A^1\Pi)$. Отмечено, что реализованная схема возбуждения и связанное с ней преобразование УФ-излучения в ВУФ излучение могут быть использованы для создания лазера на переходе $\text{CO}(A-X)$. В. С. Иванов

ф. 1982, 18, №2.

CO

Отмеч 11947

1981

/ 95: 159229q Laser-induced fluorescence from carbon monoxide($A^1\Pi$). Hancock, G.; Zacharias, H. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl. OX1 3Q2). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 82(3), 402-4 (Eng). Vacuum UV fluorescence was obsd. from $CO(A^1\Pi)$ following UV laser excitation of high vibrational levels of the ground ($X^1\Sigma^+$) state formed in the reaction between O atoms and CS radicals. This scheme of up-conversion of UV to vacuum-UV radiation has potential applications in the operation of a $CO(A-X)$ electronic laser.

спектр
лазерной
флуоресц.

C.A. 1981, 35, N18.

CO

1981

Morjou N., et al.

Chem. Phys. 1981,
57 (3), 475-485.

(Г. кв. мех.
расчет)

Cur. N2 ; III).

CO

1981.

Huffaker J. N.
J. Chem. Phys., 1981,
74, 1214.

Diatomic molecules as perturbed
Morse oscillators, vi. High-
precision

● eigenfunctions.

Uofuam

CO

1980

Murk N.S.

100. mex.
pacific

mol. Phys. and Quantum
Chem. into '80's. Workshop
Wollongong, Febr., 1980. S.E.
S.A., 1/7. 1-1/7. 22. Discuss;
1/7. 23-1/7. 24.

(see. LiM; III)

CO

1981

10 Б198. Колебательные постоянные электронного перехода $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}^+$. Vibrational constants of the electronic transition $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$ of molecule $^{12}\text{C}^{18}\text{O}^+$. Janjić J., Conkić Lj. «Зб. рад. прир. мат. фак. Ун-т Новом Саду. Сер. физ.», 1981, 11, 47—52 (англ.)

Измерен спектр испускания молекулы $^{12}\text{C}^{18}\text{O}^+$ (переход $B^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Sigma^+$, 200—315 нм), возбуждаемый в разрядной трубке с графитовым цилиндрич. катодом. Выполнен анализ колебательной структуры. Абс. колебательная нумерация полос определена по изотопным сдвигам. Приведена таблица Деландера для кантов полос ($v'=0-3 - v''=0-5$) и распределение относит. интенсивности кантов полос в системе. Значения полученных молек. постоянных $^{12}\text{C}^{18}\text{O}^+$ (см^{-1}): $T_e=45902,59$, $\omega_e'=1681,80$, $\omega_e'x_e'=24,13$, $\omega_e''=2159,91$, $\omega_e''x_e''=14,72$.
В. М. Ковба

М.П.

ж. 1983, 19, N 10

CO

1981

 $E^1\Pi - A^1\Pi$

(u.n.)

196: 112689v The analysis of the $E^1\Pi - A^1\Pi$ transition in carbon monoxide ($^{14}\text{C}^{16}\text{O}$) molecule. Kępa, R.;¹ Rzeszut, Z. (At. Mol. Phys. Lab., Pedagogical Coll., Rzeszow, Pol.). *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.* 1981, 50(3), 259-67 (Eng). The earlier investigations of the $E^1\Pi$ state in the CO mol. by measurements of lines $E^1\Pi - A^1\Pi$ band system were extended to the rare isotopic $^{14}\text{C}^{16}\text{O}$ mol. The 0-1 and 0-2 emission bands of the $E^1\Pi - A^1\Pi$ system in this isotope were obtained at high resoln. A complete rotational anal. of these bands was performed and the following consts. were detd. for the $E^1\Pi$ state: $B_{0(e)} = (1.80389 \pm 0.00015)$, $B_{0(f)} = (1.79347 \pm 0.00024)$, $D_{0(e)} = (6.50 \pm 0.36) \times 10^{-6}$, and $D_{0(f)} = (4.99 \pm 0.57) \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. For the $A^1\Pi$ state: $B_1 = (1.45268 \pm 0.00026)$, $B_2 = (1.43336 \pm 0.00030)$, $D_1 = (6.87 \pm 0.62) \times 10^{-6}$, $D_2 = (8.64 \pm 0.61) \times 10^{-6}$, $Y_{01} = (1.48166 \pm 0.00065)$, and $Y_{11} = -(0.01932 \pm 0.00040) \text{ cm}^{-1}$. For the $E^1\Pi - A^1\Pi$ transition: $C_{01} = (26747.748 \pm 0.024)$ and $C_{02} = (25359.007 \pm 0.022) \text{ cm}^{-1}$. The A-doubling of the $E^1\Pi$ state was considered in detail and the parameters of the splitting in $v = 0$ vibrational level were calcd. The expressions for their isotopic mass dependence are also presented.

C. A. 1982, 96, N14.

CO

Оптик 13670

1981

9 Д452. Анализ перехода $E^1\Pi-A^1\Pi$ молекулы $^{14}\text{C}^{16}\text{O}$. The analysis of the $E^1\Pi-A^1\Pi$ transition in $^{14}\text{C}^{16}\text{O}$ molecule. Кера R., Rzeszut Z. «Acta phys. Acad. sci. hung.», 1981, 50, № 3, 237—245 (англ.)

С высоким разрешением получен спектр испускания молекулы $^{14}\text{C}^{16}\text{O}$ ($E^1\Pi-A^1\Pi$). Выполнен вращательный анализ полос 0—1 и 0—2 этой системы и определены значения спектроскопич. постоянных: B_0 , D_0 для обеих компонент Λ -дублета в состоянии $E^1\Pi$, B_1 , B_2 , D_1 , D_2 , Y_{01} , Y_{11} для состояния $A^1\Pi$ и C_{01} и C_{02} для перехода $E^1\Pi-A^1\Pi$. Детально проанализировано Λ -удвоение в состоянии $E^1\Pi$ и определено значение параметра Λ -расщепления уровня $E^1\Pi$, $v=0$. В. С. Иванов

М.П.

ф. 1982, 18, 49

CO

1981

10 Д61. Постоянные центробежного искажения двухатомных молекул: усовершенствованный метод расчета. Centrifugal distortion constants for diatomic molecules: an improved computational method. Hutson Jeremy M. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 5, 851—857 (англ.)

постоянн.
центроб.
расчетен.

Предложен метод расчета постоянных центробежного искажения D_v , H_v , L_v и M_v (коэф. при J^4 , J^6 , J^8 и J^{10} , соответственно, в выражении вращательной энергии) двухатомных молекул, основанный на интегрировании ур-ний теории возмущений без привлечения сумм по промеж. состояниям. Метод допускает применение потенц. ф-ции произвольной формы и учитывает вклад непрерывного спектра. В качестве иллюстрации метода выполнен расчет постоянных D_v , H_v и L_v для основного электронного состояния молекулы CO с использованием потенц. ф-ции РКР.

М. Р. Алиев

Ф. № 10. 1981

1981

CO

CO₂

спектр,

кол.-вращ.
переходы

① ☒

от 1981. № 7

7 Д494. Изучение ИК-излучения колебательно-возбужденных молекул CO в области полосы 4,7 мк и молекул CO₂ в области полос 4,3 и 2,7 мк. A study of infrared radiation of vibrationally excited CO in the 4.7 μm band and CO₂ in the 4.3 μm and 2.7 μm bands. Kudryavtsev N. N., Novikov S. S. «Rev. phys. appl.», 1981, 16, № 2, 49—66 (англ.; рез. франц.)

В рамках теории радиационного переноса в неравновесных молекулярных газах проведен расчет спектральных и усредненных по набору колебательно-вращательных переходов характеристик излучения и поглощения в 2-атомных и линейных 3-атомных молекулах в отсутствие термодинамич. равновесия между колебательными и трансляционными степенями свободы. Отмечено, что спектральные характеристики излучения в полосах 4,3 и 2,7 мк молекул CO₂ и полосы 4,7 мк молекул CO зависят от давления газа, длины оптич.

пути и колебательной т-ры системы, причем интенсивность излучения в колебательно-неравновесном молекулярном газе определяется в значительной мере колебательной температурой системы. Показано, что одновременное определение интенсивности ИК-полос 4,3 и 2,7 мк молекул CO_2 позволяет оценить т-ру асимметричного колебания и составных колебаний этих молекул. Библ. 51. И. В. А.

CO

1981

Langhoff P. W., et al.

Chem. Phys., 1981, 58,
N 1, 71 - 91.

(кв. мкл. расчёт,
сечение
фотоиониза-
ции).

● (сее. N_2 ; III).

CO

Оттиск / 2605 1981

9 Б151. Количественные исследования поглощения и флуоресценции CO в области от 1060 до 1550 Å. Lee L. C., Guest J. A. Quantitative absorption and fluorescence studies of CO from 1060 to 1550 Å. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 18, 3415—3421 (англ.)

вероятность
перехода

С использованием в кач-ве источника синхронного излучения в проточной системе измерены усредненные сечения фотопоглощения CO при низком давл. в области 1060—1550 Å. Из полученных значений рассчитаны силы осцилляторов для переходов из состояния $X'\Sigma^+$ CO на различные возбужденные состояния. С. Б. Осин

X. 1982, 19, № 9.

CO

Ommuck 12805 1981

96: 60314x Quantitative absorption and fluorescence studies of carbon monoxide from 1060 to 1550 Å. Lee, L. C.; Guest, J. A. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Phys. B* 1981, 14(18), 3415-21 (Eng). The photoabsorption cross section of CO was measured in the 1060-1550 Å region using synchrotron radiation. The oscillator strengths for the transitions from $\text{CO}(X^1\Sigma^+)$ to various excited states were obtained from these results. Fluorescence from excited CO was obsd. in the 1150-3000 and 3000-8000 Å regions. The quantum yields for the prodn. of fluorescence from the $A^1\Pi$ and $B^1\Sigma^+$ states are unity because their excitation energies are below the dissocn. limit. The $C^1\Sigma^+$, $v = 0$ level has significant fluorescence quantum yields both in the UV and visible regions, but the yields for the $E^1\Pi$, $v = 0$, and $C^1\Sigma^+$, $v = 1$ levels are very small. The $C^1\Sigma^+$, $v = 1$ level is presumably predissocd. The cross sections for the prodn. of fluorescence from the $a^3\Sigma^+$, $d^3\Delta_i$, $e^3\Sigma^- \rightarrow a^3\Pi$, and $B^1\Sigma^+$, $C^1\Sigma^+ \rightarrow A^1\Pi$ transitions upon excitation from the $X^1\Sigma^+$ were also measured,

спектр
поглощ.
и флуор.

C.A. 1982, 96, ~ 8

CO

[Dammek 18085]

1981

Levin Y., Breulet Y.,
et al.

Do;

Theor. chim. acta, 1981,
60, N 4, 339 - 353.

(see H2; III)

CO

(number 12805) 1981,

Linn S. H., et al.

(Do)

J. Chem. Phys., 1981,
74 (6), 3392 - 47

¹⁴CO

Оттиск 11684

1981

10 Д382. Полоса 1—0 и колебательно-вращательные постоянные для ¹⁴CO. The 1—0 band and rotational-vibrational constants of ¹⁴C-labeled carbon monoxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 258—261 (англ.)

Со средним разрешением исследован ИК-спектр молекулы ¹⁴CO. Выполнен анализ полосы 1—0. Определены колебательно-вращательные постоянные (в см⁻¹): $\nu_0 = 2054,87 \pm 0,019$, $B' = 1,749 \pm 0,008$, $B'' = 1,765 \pm 0,008$, $D' = 0,0000048 \pm 0,000014$, $D'' = 0,0000048 \pm 0,000010$. Описана процедура синтеза молекул ¹⁴CO.

М.И.

Р.10.1981

CO

оттиск 11684 1981

18 Б181. Полоса 1—0 и колебательно-вращательные постоянные монооксида углерода, меченного ^{14}C Mink J., Ayoub A., Kemény G., Kling F. The 1—0 band and rotational-vibrational constants of ^{14}C -labeled carbon monoxide «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 258—261 (англ.)

М.П.

Измерен колебательно-вращательный спектр молекулы ^{14}CO (полоса 1—0, $I=0-32$). Изотопозамещ. моноокись углерода получена в результате двухступенчатого синтеза:

H_2SO_4 $^{385^\circ}$
 теза: $\text{Ba}^{14}\text{CO}_3 \rightarrow ^{14}\text{CO}_2$, $^{14}\text{CO}_2 + \text{Zn} \rightarrow ^{14}\text{CO} + \text{ZnO}$. Спектр измерялся с помощью цифрового спектрометра фурье-преобразования (разрешение $0,5 \text{ см}^{-1}$). Значения полученных молек. постоянных $^{14}\text{C}^{16}\text{O}$ (в см^{-1}): $\nu_0 = 2054,87 \pm \pm 0,019$, $B' = 1,749 \pm 0,008$, $B'' = 1,765 \pm 0,008$, $D' = D'' = 4,8 \times 10^{-6}$.

В. М. Ковба

Ж 1981 N 18

CO

Lommueu 11541 | 1981.

Кв. мех.
парер

Mulder F; et al.

Mol. Phys., 1981, 42
(3), 629-53

CO

[Ommuck 13202]

1981

Nakatsuji M., et al.

реол.,
сінукі.

J. Amer. Chem. Soc.,
1981, 103, N25, 7426 -
- 7432.

CO

ошибка 12513 1981

Ogilvie J. F., et al.

(потенс.)
(эмерсия)

Proc. Roy. Soc. London,
1981, A 378, 287-300.

Co

1981
Perovozchikov V. Y.
et al.

Кв. мех.
расчёты
М (гип. м.м.).

Zh. Prikl. Spektrosk
1981, 34(4); 743-744

● (ам. FeH; III).

CO

1981

5 Д239. Расчет одноэлектронных свойств с использованием техники ограниченного конфигурационного взаимодействия. Calculation of one-electron properties using limited configuration interaction techniques. Raghavachari Krishnan, Pople John A. «Int. J. Quantum Chem.», 1981, 20, № 5, 1067—1071 (англ.)

выполн.
момент

Одноэлектронные свойства рассчитываются в методе конфигурац. взаимодействия с использованием аналитич. дифференцирования полной энергии по параметру внешнего возмущения. Этим методом вычислены дипольные моменты для CO и H₂CO. Обсуждаются отличия этого метода от прямого получения среднего значения.

А. Ермошкин

(4) 

ф. 1982, 18, №5

CO

Ommuck 12915

1981

Do;

Ramant K., Ghodgaonkar A.N.

J. Chem. Educ. 1981, 58(8),
609 - 610.



CO

Оттиск 13722

1981

расчет геом.
структур

15 B55. Натуральные гибридные орбитали. Результаты неэмпирических расчетов в приближениях ССП и КВ для CO и NiCO. Rives A. B., Weinhold F. Natural hybrid orbitals: ab initio SCF and CI results for CO and NiCO. «Int. J. Quantum. Chem.», 1981, Quantum. Chem. Symp. № 15, 555 (англ.)

Сообщается о том, что в программе, использованной ранее (см. «J. Am. Chem. Soc.», 1980, 102, 7211) для расчета молекул CO и NiCO, была допущена ошибка. Исправленные результаты для электронной плотности указывают на то, что фрагмент CO в комплексе Ni CO имеет большее сходство с изолированной молекулой CO, чем получено ранее. А. В. Немухин

X
(4)

X. 1982, 19, N 15.

CO

Оттиск 13722

1981

теорет.
расчет

✓ Д102. Исправление к статье «Натуральные гибридные орбитали: неэмпирические ССП и КВ расчеты для CO и NiCO». Natural hybrid orbitals: Ab initio SCF and CI results for CO and NiCO. Erratum. Rives A. B., Weinhold F. «Int. J. Quantum. Chem.», 1981, Quantum. Chem. Symp. № 15, 555 (англ.)
См. Foster J. P., Weinhold F. «J. Amer. Chem. Soc.», 1980, 102, 7211.

⊠
⑦

ф. 1982, 18, № 7.

Dumick 12632

1981

CO

Saki Y.,

Do,
M.N.,
geom. temp.

J. Chem. Phys. 1981, 75(3),
1303-1308

1981

CO
HCl
OHОшар, Терра
ХХ ат. мей
инженеры.

(и.к. спектр)

(43)

ж 1981/11/19

19 Б82. Интенсивности полос инфракрасного спектра: сравнительное изучение матричных элементов моментов перехода для основных частот и обертонов. Часть II. Применение к CO, HCl и OH. Singh Surjit, Luck Werner A. P. Infrared band intensities: a comparative study of the transition moment matrix elements for the fundamental and overtones. Part II. Application to CO, HCl and OH. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 1, 65—73 (англ.)

С помощью соотношений, представленных в сообщ. I (см. пред. реф.), рассчитаны матричные элементы моментов перехода для основной полосы и двух первых обертонов окиси углерода (CO). Коэф. a_{vj} в выражении $R_{v0} = \sum_j a_{vj} p_j'$, где R_{v0} — матричный элемент момента колебательного перехода $0 \leftarrow v$, а p_j' — пр-ные дипольного момента $\partial^j \mu / \partial \xi^j$, $\xi = (r - r_e) / r_e$, определены для $v, j = 1, 2, 3$. Найдено, что эти коэф. меняются в пределах не более чем 25% для всех рассмотренных

24 ат. мей. инж. Терра
ам. инж. Терра

соотношений сообщ. I. По полученным численным данным проведен анализ влияния мех. и электрич. ангармоничностей при расчетах R_{v0} . Отмечено, что для R_{10} вклад от члена, содержащего p_1' , примерно в 100 раз больше, чем от члена, содержащего p_2' (электрич. ангармоничность). В то же время для R_{20} и R_{30} эти вклады выравниваются по величине (будучи разными по знаку). Влияние изменения молек. постоянных при переходе от одной молекулы к другой на величины a_v и их отношения продемонстрировано на примере молекул CO , HCl и OH . Кратко обсуждено влияние образования Н-связи на интенсивности колебательных полос.

Н. Ф. Степанов

CO.

[Cinnaca 12713] 1981

Sun J. N.-P., et al.

Di

координат.
самостоятель.
спектр. анализ
взаимосвязи
и т.д.

Appl. Optics, 1981,
20 (9), 1691-95.

CO

1981

Swanson Basil J.,
et al.

UK-чекір J. Mol. Spectrosc.,
1981, 89, N2, 566-568.

●
(сер. SF₆ ; III)

Co

1981

Tarr S. M., et al.

J. Chem. Phys., 1981,
74, N 5, 2869-2878.

высокие
ригбери.
состояния

●
(сел. H₂; III).

CO

15 Б154. Простая численная обработка потенциальных интегралов в методе РКР и ее применение к $^{12}\text{C}^{16}\text{O}(\text{X}^1\Sigma^+)$. Telle H., Telle U. A simple numerical treatment of the RKR potential integrals and its application to $^{12}\text{C}^{16}\text{O}(\text{X}^1\Sigma^+)$. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 1, 248—252 (англ.)

В известном методе РКР расчета поворотных точек потенциальных кривых предложен способ снятия особенностей интегралов

$$f(v) = s \int_{-1/2-\Delta}^v [G(v) - G(u)]^{-1/2} du$$

$$\text{и } g(v) = 1/s \int_{-1/2-\Delta}^v B(u) [G(v) - G(u)]^{-1/2} du, \quad \text{где } s =$$

$= (h/8\pi^2\mu c)^{1/2}$, $\Delta = Y_{00}/\omega_e$, путем замены переменных $v + 1/2 = \lambda$, $u + 1/2 = \mu$ и $(\lambda - \mu) = \tau^2$. Окончательный вид преобразованных выражений:

М.М.

расчет



2-1984. N15

$$f = s \int_{-\Delta}^{\lambda} \left[\sum_{k=0}^m c_{vk} (\lambda^{k+1} - \mu^{k+1}) \right]^{-1/2} d\mu,$$

$$g = 2/s \int_0^{\sqrt{\lambda+\Delta}} \left[\sum_{k=0}^n c_{vk} (\lambda - \tau^2)^k \right] \times \\ \times \left[\sum_{k=0}^m A_k (\lambda - \tau^2)^k \right]^{-1/2} d\tau,$$

где $A_k = \sum_{i=k}^m c_{vi} \lambda^{i-k}$, а c_{vk} представляют собой коэф.

разложения $G(v) = \sum_{k=0}^m c_{vk} (v + 1/2)^{k+1}$. Суммирование

может быть выполнено по схеме Горнера. Для проверки метода выбрано основное электронное состояние молекулы СО, для к-рого имеются очень точные эксперим. данные. Рассчитаны и приведены значения $Y_{\infty} + G(v)$, B_v , $R_{\min.}$, $R_{\max.}$ для уровней В. М. Ковба

CO

ommuck 11256

1981

94:55033j A simple numerical treatment of the RKR potential integrals and its application to carbon monoxide ($X^1\Sigma^+$). Telle, H.; Telle, U. (I. Phys. Inst., Univ. Koeln, D-5000 Cologne, 41 Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 85(1), 248-52 (Eng). In the calcn. of Rydberg-Klein-Rees (RKR) potential integrals of diat. mols., the singularity in the integrand at the upper level of integration can be removed by a simple transformation of variables. This results in a very fast and accurate scheme to evaluate RKR potential curves without the need of complex integration procedure for handling singularities. With the method the $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ($1\Sigma^+$) potential curves were calcd. up to $v = 37$ with good results.

numerical.
p-1548

C.A. 1981:94, N8

CO

Отпуск 12792

1981

3 Д586. Измерение обусловленной столкновениями ширины колебательных линий молекул CO в горячей газовой смеси с использованием перестраиваемых по частоте диодных лазеров. Collision width measurements of CO in combustion gases using a tunable diode laser. Varghese P. L., Hanson R. K. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 26, № 4, 339—347 (англ.)

спектр

Исследованы ИК-полосы колебательно-вращательных переходов молекул CO (I) в метано-воздушном пламени при атмосферном давлении в пучке перестраиваемого по частоте излучения диодных лазеров. Проведено сопоставление колебательно-вращательных спектров I при t -рах 1850 и 300 К. Изложены элементы теории распределения интенсивности по вращательным подуровням колебательной полосы I и выполнена оценка полуширины полос в ИК-спектрах I. Идентифицированы 26 полос в спектрах I, соответствующих переходам $1 \leftarrow 0$, $2 \leftarrow 1$ и $3 \leftarrow 2$ молекул I при t -ре 1850 К и 19 полос, отнесенных к переходам $1 \leftarrow 0$ I

ср. 1982, 18, №3.

при $t \approx 300$ К. Определены значения ширины ИК-полос I, обусловленные соударениями молекул в зоне горения. Наблюдаемое аномальное уширение ИК-полос I в пламени приписано влиянию соударений между молекулами I и H_2O . Показано, что определение типа молекул, участвующих в процессах столкновений с молекулами I в пламени, возможно путем сопоставления значений ширины вращательных компонент колебательной ИК-полосы I при различных значениях числа J . Библ. 12. И. В. А.



CO

1981

5 Б325. Измерение уширения линий CO вследствие столкновений с H_2O при комнатной температуре. Varghese P. L., Hanson R. K. Room temperature measurements of collision widths of CO lines broadened by H_2O . «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 88, № 11, 234—235 (англ.)

Методом лазерной спектроскопии с использованием перестраиваемого диодного лазера измерено уширение линий колебательно-вращательных переходов основной полосы CO вследствие столкновений с H_2O . Измерения выполнены при давл. около 20 Торр в диапазоне т-р 294—298 К для 9 переходов от $P(27)$ до $R(2)$, $v=1 \leftarrow 0$ CO в области частот 2028—2155 cm^{-1} с разрешением 0,0001 cm^{-1} . Неопределенность в измерении столкновительных ширин линий не превышала 5%. При обработке эксперим. данных форму линий моделировали профилем Фойгта; учитывали доплеровское уширение, вносили поправки на самоуширение линий и данные приводили к условиям т-ры 300° К. Для линий

лазерн.
спектроскоп.

х. 1982, 19, №5.

$R(2)$, $P(1)$, $P(7)$, $P(10)$, $P(12)$, $P(17)$, $P(19)$, $P(22)$ и $P(27)$, соотв., параметры уширения при t -ре 300 К равны 0,245; 0,240; 0,231; 0,241; 0,234; 0,217; 0,215; 0,223 и 0,208 $\text{см}^{-1} \text{ атм}^{-1}$. Зависимость от вращательного квантового числа M , где $M=J$ для P -ветви и $M=J+1$ для R -ветви, определенная по методу наименьших квадратов, имеет вид $2\gamma(\text{CO}-\text{H}_2\text{O})=0,246-1,34 \cdot 10^{-3} M$.

С. Н. Мурзин



CO

1981

' 96: 57961a MCSCF calculation of the dipole moment function of carbon monoxide. Werner, Hans Joachim (Inst. Phys. Chem., Univ. Frankfurt/M., D-6000 Frankfurt/M., Fed. Rep. Ger.). *Mol. Phys.* 1981, 44(1), 111-23 (Eng). Potential energy and dipole moment functions for the ground state of CO were calcd. using MC-SCF wave functions. Some difficulties with the MC-SCF method at large distances, which are due to the near degeneracy of the 2 asymptotic states, are discussed. From the theor. dipole moment function and the Rydberg-Klein-Rees potential function, vibrational dipole matrix elements were evaluated. For the fundamental and 1st overtone sequences, the theor. values are in excellent agreement with exptl. data. For transitions involving large vibrational quantum nos. ($v'' > 25$) the calcd. matrix elements are expected to be the most reliable ones presently available.

р-ил
гипонет.
момента,
р-ил
момента.
гиперм

C.A. 1982, 96, 148

CO

1981

9 Б21. Расчет функции дипольного момента молекулы CO методом МКССП. Werner Hans-Joachim. MCSCF calculation of the dipole moment function of CO. «Mol. Phys.», 1981, 44, № 1, 111—123 (англ.)

расчет

Многоконфигурационный вариант метода ССП (МКССП) использован для построения зависимости дипольного момента молекулы CO в основном состоянии от межъядерного расстояния. В области больших расстояний происходит резкая смена системы основных конфигураций в волновой ф-ции. Сделаны оценки дипольных моментов 35 колебательных состояний.

В. И. Пупышев

Х. 1982, 49, № 9.

CO

1981

Wilson S., et al.

pacrim

Astr. Phys., 1981, 43,
N6, 1331-1345.

( all. N₂ ; 111).

CO

Common 12131 | 1981.

Wilson S., et al.

факт

(E.)

взбунт.

свободные

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1981, 14,
1709-14

(see H.F.; III)

CO

1981

Woods R.C.

Faraday Discuss.

198-1981. Chem. Soc., 1981, N 41,
57-62.

(see CN ; III)

CO

[Оммуек 13718]

1982

Amos R.D.;

спектр.
мультимолн.
ломерет .

Chem. Phys. Lett.;
1982, 87, N 1, 23-26.

CO

NeHe

потенц.
кривые,
расчет,
м.л.

(41)

X. 1982, 19, № 4

1981

4 Б22. Применение приближенного метода связанных кластеров с двукратными замещениями (ПСКД) к потенциальным кривым CO и NeHe. Корреляционные эффекты высших порядков в химически связанных и слабо связанных молекулах. Bachrach Steven M., Chiles Richard A., Dykstra Clifford E. Application of an approximate double substitution coupled cluster (ACCD) method to the potential curves of CO and NeHe: higher order correlation effects in chemically and weakly bonded molecules. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 5, 2270—2275 (англ.)

Приближенным вариантом метода связанных кластеров с двойными замещениями (ПСКД, см. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, 69), рассчитаны потенциальные кривые основных состояний молекул CO и NeHe в окрестности минимумов. Отмечено, что метод ПСКД сохраняет инвариантные св-ва подхода СКД, позволяя с одинаковой точностью вычислять энергию молекулы и составляющих ее атомов, является значительно менее

трудоемким. Расчет СО произведен с использованием трехэкспоненциального базиса орбиталей гауссова типа с добавлением поляризац. d -орбиталей. Сопоставлены между собой результаты для спектроскопич. постоянных R_e , ω_e , $\omega_e X_e$, найденные методами ССП, самосогласованных электронных пар, точным и приближенным вариантами СКД, а также эксперим. данные. Расчеты NeNe проведены с целью оценки глубины ямы и ее положения. Использованы несколько базисных наборов на основе трехэкспоненциального базиса. Продемонстрирована большая чувствительность глубины ямы к выбору базиса.

А. В. Немухин

