

N₂; 1978

N_2
 CO
 C_2H_2
 HCN

энергия
возбужд.

(+3) $\square$

X, 1978, N 12

12 Б16. Валентное возбуждение линейных молекул:
1. Возбуждение и УФ-спектры N_2 , CO , ацетилена и HCN . Asbrink L., Fridh C., Lindholm E. Valence excitation of linear molecules. I. Excitation and UV spectra of N_2 , CO , acetylene and HCN . «Chem. Phys.», 1978, 27, № 2, 159—168 (англ.)

Предложенным ранее новым полуэмпирич. методом HAM/3 (см. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 52, 63, 69, 72) рассчитаны вертикальные энергии возбуждения линейных молекул N_2 , CO , C_2H_2 и HCN . Для получения энергии возбуждения при этом требуется знать энергии ионизации соотв-щих молекул. В работе использованы эксперим. значения энергий ионизации. Полученные усредненные величины для энергий $\pi\pi^*$ -переходов пересчитаны на синглетные и триплетные компоненты по усовершенствованным ф-лам Реснагеля. Вычисл. энергии переходов для всех рассмотренных молекул сопоставлены с результатами прежних расчетов в рамках полуэмпирич. схем и со спектроскопич. данными. Отмечено, что в данном подходе удовлетворительное согласие с эксперим. результатами достигается одновременно для нескольких типов электронных переходов: $\pi\pi^*$, $\pi\pi^*$ и $\sigma\pi^*$. Метод хорошо описывает интенсивные ${}^1\Sigma^+$ переходы из V-состояний, тогда как обычные теор. подходы плохо предсказывают энергии V-состояний. А. В. Н.

1978

36507
OM

N₂

Commenc 8415 1-1978

Asundi R. K., et al.

Alpp.

Opus. not.

Enig. Secor

-pymet

Indian J. Pure
and Appl. Phys.

1978, 16, 135-141

1978

N₂

89: 14355u Laboratory and auroral studies of molecular nitrogen. Beiting, Edward Joseph, III (Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). 1978. 192 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. 7806235. From *Diss. Abstr. Int. B* 1978, 38(11), 5452.

Cnucip

C.A., 1978, 29, N2

ammul 6150

1948

N₂

M, N -

88: 161006p Energy levels of low lying triplet states of molecular nitrogen from infrared emission studies. Beiting, E. J., III. Jones, C. C.; Boesch, W. (Dep. Phys., Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(1), 108-23 (Eng). A theor. model used to describe the $B^3\Sigma_u^-$ and $B^3\pi_g$ states of N₂ is presented. Using recently acquired high resolu. spectra of the $B^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\pi_g$ (0-0) band, rotational energy levels of the $v = 0$ vibrational levels of these states are generated with this model. These levels are in excellent agreement with those obtained using a combination differences technique. The precision of the model generated levels is 0.01 cm⁻¹. The previously unpublished rotational levels of G. H. Dieke and D. F. Heath for the $A^3\Sigma_u^+$, $B^3\pi_g$ and $C^3\pi_u$ states are referenced to the N₂X¹ Σ_g^+ ($v = 0, J = 0$) ground level and tabulated here. Ests. of the precision of their work are made.

XIII - 3462

C.A. 1948, 88, 1322

23 Б153. Уровни энергии низколежащих триплетных состояний N_2 по данным инфракрасных спектров испускания. Beiting III E. J., Jones C. C., Benesch W. Energy levels of low lying triplet states of N_2 from infrared emission studies. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 1, 108—123 (англ.)

Для интерпретации измеренного ранее с высоким разрешением спектра испускания азота (полоса 0—0-перехода $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$) использована теор. модель с базисным набором волновых функций, соотв-щих α -типу связи по Гунду. Рассчитанные с точностью $0,001 \text{ см}^{-1}$ уровни вращательной энергии $N_2(B^3\Pi_g (v=0), I \leq 30, B'^3\Sigma_u^- (v=0), N \leq 31)$ согласуются со значениями, полученными методом комбинац. разностей, а разности энергий соотв-щих пар уровней с отклонением $\leq 0,012 \text{ см}^{-1}$ совпадают с положением 482 идентифицированных в спектре переходов. Приведены данные по уровням вращательной энергии N_2 в состояниях $A^3\Sigma_u^- (v=0, N \leq 21; v=1-9, N \leq 14); B^3\Pi_g (v=0, I \leq 15; v=1, I \leq 12; v=2, 3, I \leq 22; v=4, I \leq 24; v=5, I \leq 14; v=6, I \leq 13; v=7, I \leq 15; v=8-12, I \leq 14), C^3\Pi_u (v=0, 1, I \leq 16; v=2, 3, I \leq 12; v=4, I \leq 14)$ (относительно уровня $v=0, I=0$ основного состояния, $X'^\Sigma_g^+$).
В. М. Ковба

х. 1978, N 23

1978

6150
сентябрь

№ 2

сттисс 6150

1978

Определ.
энергетич.
уровней

12 Д404. Определение энергетических уровней низлежащих триплетных состояний N_2 по результатам исследования ИК-излучения. Beiting E. J. III, Jones C. C., Benesch W. Energy levels of low lying triplet states of N_2 from infrared emission studies. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 1, 108—123 (англ.)
Рассмотрена квантовомеханич. модель, описывающая энергии колебательно-вращательных уровней молекулы азота в состояниях $B'^3\Sigma_u^-$ и $B^3\Pi_g$. Для определения параметров модели использованы полученные ранее авторами спектры высокого разрешения полосы $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g(0-0)$. Рассчитанные в рамках предложенной модели энергии вращательных уровней согласуются с точностью не хуже $0,01 \text{ см}^{-1}$ со значениями, полученными методом комбинационных разностей. Приведены таблицы энергий уровней. Библ. 11.

Ю. М. Л.

фр. 1978, N12

XIII-3462

N2

1978

Draft
CheckC. A. 1978
89 n 6

89: 50812z High-resolution electronic emission spectrum of molecular nitrogen at 15 300 Å. Benesch, W.; Jones, C. C.; Beiting, E. J., III; Feldman, P. D. (Inst. Mol. Phys., Univ. Maryland, College Park, Md.). *J. Opt. Soc. Am.* 1978, 68(4), 432-7 (Eng). A 5 m Jarrell-Ash Czerny-Turner spectrograph was adapted to spectrometric operation in the 1-2 μm wavelength region. A Pb-screw assembly with a stepping motor drive was installed to translate an exit slit that is focused onto a cooled intrinsic Ge detector. The exceptional sensitivity of this detection system has produced good signal-to-noise ratios in the 3rd order of a 300 line/mm echelle grating which yields a reciprocal dispersion of 1.44 Å/mm at the exit slit. The resolu. achieved was energy limited at 0.046 cm^{-1} and the precision of frequency measurement was 0.007 cm^{-1} . The 0-0 band of the $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ system of mol. N was the subject of the investigation. Although this system is known as the IR afterglow system, the band emits strongly in a d.c. glow discharge and it has been possible to resolve nearly 1000 lines in the band. The preponderance of the lines in the region are from the 0-0 $B' \rightarrow B$ transition, with only a small 1 PG emission toward the red end of the band.

1078

№ 2

Электронный
спектр

12 Д403. Электронный спектр испускания молекулярного азота в области 15 300 Å с высоким разрешением. Benesch W., Jones C. C., Beiting E. J., Feldman P. D. High-resolution electronic emission

spectrum of molecular nitrogen at 15 300 Å. «J. Opt. Soc. Amer.», 1978, 68, № 4, 432—437 (англ.)

С разрешением $0,046 \text{ см}^{-1}$ получен спектр испускания молекулярного азота в области 15 300 Å. Показано, что полоса, расположенная в этой области спектра, в основном обусловлена переходом $B'^3E_u, v'=0 \rightarrow B^3\Pi_g, v''=0$. Разрешено около 1000 линий этой полосы. Результаты детального анализа структуры будут опубликованы позднее. Отмечено, что система $B'-B$ хорошо известная в ИК-послесвечения азота, достаточно интенсивна и в тлеющем разряде. (Интенсивность полосы $0-0 \text{ } B'-B$ сравнима с интенсивностью наиболее сильной соседней полосы $0 \rightarrow 2$ перехода $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$). Подробно описаны аппаратные особенности эксперимента.

В. С. Иванов

Ф. 1978, № 12

1978

12 Д563. Измерения характеристик пламени методом комбинационного рассеяния света. Boiarski A. A., Barnes R. H., Kircher J. F. Flame measurements utilizing Raman scattering. «Combust. and flame», 1978, 32, № 2, 111—114 (англ.)

Изучены спектры комб. рас. газообразных N_2 и CO_2 в воздушном пламени метана при давл. 0,1 атм и возбуждении импульсами 2-й гармоники Nd-лазера с частотой 60 гц, длительностью 100 нсек и средней энергией импульса 0,3 мдж. Определены значения т-р в локальных зонах пламени, которые равны 1800 и 1250°С на расстояниях 0,2 и 0,04 см от горелки соответственно. Отмечено удовлетворительное согласие характеристик пламени, полученных по данным спектров комб. рас., термпарных измерений и масс-спектрометрич. анализа продуктов горения.

И. В. А.

р. 1978, N 12

N2

Измерения
ионизации
(7)

ф. 1949, N1

1 Д117. Теоретическое исследование энергетических вкладов релаксации отдельных орбиталей, сопровождающей ионизацию остова N_2 . Clark David T., Cromarty Benjamin J., Sgamellotti Antonio. A theoretical investigation of single orbital relaxation energy contributions accompanying core ionization of N_2 . «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1978, 14, № 1, 49—58 (англ.)

На основе неэмпирич. расчетов изучены вклады в энергию ионизации молекулы N_2 , связанные с релаксацией отдельных валентных МО. Расчеты для основного состояния N_2 и различных состояний N_2^+ с варьированием межъядерного расстояния производились в приближении ССП в гауссовом базисе, по качеству, близкому к двухэкспонентному, с включением поляризующих ф-ций. Изучалось также влияние электр. поля, моделируемого точечными зарядами, расположенными на оси молекулы, на потенциалы ионизации и энергии релаксации (ЭР) и профиль полос фотоэлектронного спектра. Вклад орбиталей в ЭР уменьшается в ряду: $1\pi > 4\sigma > 3\sigma > 5\sigma$, причем полная ЭР и отдельные вклады в ЭР являются ф-циями длины связи.

В. И. Барановский

N₂

М. П.

1978

3 Б29. Теоретическое исследование отдельных орбитальных вкладов в энергию релаксации, сопровождающей ионизацию остова молекулы N₂. Clark D. T., Cromarty B. J., Sgamellotti A. A theoretical investigation of single orbital relaxation energy contributions accompanying core ionization of N₂. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1978, 14, № 1, 49—58 (англ.)



№ 1979, N3

Проведен анализ вкладов отдельных орбиталей в энергию релаксации, сопровождающей ионизацию основания молекулы N_2 . Расчеты выполнены эмпирич. методом ССП МО ЛКАО для ряда межъядерных расстояний при наличии внешнего электрич. поля, создаваемого точечными зарядами. Результаты анализа сопоставлены с данными, полученными для изоэлектронной молекулы CO. Исследовано влияние электрич. поля на колебат. спектр молекулы азота в основном и ионизированном состояниях.

По резюме

N₂ ^{omitted 7222} Chong R.P., Langhoff S.R. 1978.

Chem. Phys. Lett., 1978, 59, n3,
397 - 402.

(7)



(see. H₂O) III

1978

N₂

CO₂

2 Д453. Измерение наведенного столкновениями поглощения в N₂ и CO₂ вблизи 4,6 см⁻¹ с использованием микроволнового резонатора. Dag g I. R., Rees o r G. E., W o n g M. A microwave cavity measurement of collision-induced absorption in N₂ and CO₂ at 4,6 cm⁻¹. «Can. J. Phys.», 1978, 56, № 8, 1037—1045 (англ.; рез. франц.)

м. в.
спектр

Построен новый микроволн. резонатор для измерения микроволн. поглощения на частоте 140 Ггц. Измерено поглощение, наведенное давлением, в N₂ и CO₂ при плотностях 20—200 амага. Полученное значение отношения коэф. поглощения α_2 к квадрату частоты ν^2 укладывается на кривую зависимости α_2/ν^2 от ν , построенную на основании эксперим. данных для области частот от 2 до 100 см⁻¹. М. Р. Алиев

(41) ☒

Р. 1979. 2

N₂

4179-XIII

1978

10 Д106. Определение сродства к протону молекул N₂ из данных по ионизации транс-диимида. Foner S. N., Hudson R. L. Determination of the proton affinity of N₂ from ionization data on trans-diimide. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 7, 3169—3171 (англ.)

Результаты масс-спектрометрич. измерений теплоты образования транс-диимида N₂H₂ и потенциала появления иона N₂H⁺ из молекулы N₂H₂, полученные в предшествующей работе авторов (Foner S. N. et al., «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 6, 2987), использованы для определения величины сродства к протону (СП) молекулы N₂. Полученное значение СП, равное $4,93 \pm \pm 0,11$ эв, хорошо согласуется с рассчитанным и полученным из эксперимента, в котором применялся метод проточного послесвечения в CO₂ и по известной разности СП для CO₂ и N₂. Обсуждаются причины расхождения измеренной величины СП с данными других эксперим. работ. Библ. 19.

И. Флаке

AH⁺

сп. 1978, N10

N₂

4149-XIII

1978

88: 198111v Determination of the proton affinity of nitrogen from ionization data on trans-diimide. Foner, S. N.; Hudson, R. L. (Appl. Phys. Lab., Johns Hopkins Univ., Laurel, Md.), J. Chem. Phys. 1978, 68(7), 3169-71 (Eng). The proton

(A.P.)
affinity of N₂ was detd. by mass spectrometry by measuring the appearance potential of the N₂H⁺ from N₂H₂ and combining this with the heat of formation of diimide. The value for the proton affinity obtained in this study, P.A.(N₂) = 4.93 ± 0.11 eV; is in good agreement with a theor. calcn. and with values derived from recent expts. on P.A.(CO₂) using known differences in the proton affinity ladder to link them together. Since the P.A.(N₂) measurement by this method gives a lower energy bound, the good agreement implies that the very little excess kinetic energy is involved in the relevant ionization processes. Other exptl. measurements that bear on the proton affinity of N₂ are discussed.

C.A., 1978, 88, N26

1978

N₂

NO: 63776m Self-localization of 'high-frequency' triplet excitations in crystalline nitrogen. Fugol, I. Ya.; Portoratskii, Yu. B.; Rybalko, Yu. I. (Fiz.-Tekh. Inst. Nizk. Temp., Kharkov, USSR). *Fiz. Nizk. Temp. (Kiev)* 1978, 4(8), 1048-52 (Russ). The transition between 2 triplet states of high energy, $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$ was detected at 29,660 cm⁻¹ (0-0 transition) of pure crystals of N₂, when the crystal (at 5 K) was irradiated by an electron beam of 400 eV energy. The excited mols. rotate freely in the crystal; the electronic and vibronic states involved in this transition are the same for both gaseous and cryst. states. The $C^3\Pi_u$ and $B^3\Pi_g$ states are quasi-free and there is no coupling between the excited mols. and the lattice up to a vibrational level of $v' = 3$. Hence this transition is located in sep. mols., and the lack of coupling between mol. and crystal states is attributed to the weak mixing between the singlet and triplet systems.

G. S. Nikolov

 $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$

C.A. 1979, 90, 18

No. 6708 1978

Gallas J. A. C.; et al
J. Chem. Phys., 1978, 69 (2)
612-614

Band strength factors
with ...

№2

спектр
радиаци.
рекомбинац.

17 Б165. Спектры радиационной рекомбинации атомов азота в газовой фазе при гелиевых температурах. Gordon E. B., Mezhev-Deglin L. P., Pugachev O. F., Khmelenko V. V. Gas-phase spectra of the radiative recombination of nitrogen atoms at helium temperatures. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 54, № 2, 282—285 (англ.)

Изучено послесвечение, связанное с рекомбинацией атомов азота, образующихся в высокочастотном разряде через смесь гелия и азота ($N_2/He \approx 1/20—1/1000$). Излучение наблюдали в потоке, направленном в гелиевый криостат через малое отверстие. Обнаружено, что понижение т-ры от 300 К до 10 К вызывает существенные изменения в спектральном составе рекомбинац. послесвечения. Свечение, связанное с переходом $B^3\Pi_g—A^3\Sigma_u+$ с $v'=12—9$ ($\lambda \approx 580$ нм и $\lambda \approx 540$ нм) исчезает, в то время как появляется излучение с уровней $v'=8—5$ ($\lambda \approx 560$ нм). Наблюдаемый эффект объяснен на основе модели рекомбинац. люминесценции Кэмпбелла и Траша (излучающее состояние $B^3\Pi_g$ заселяется путем безызлучательных переходов с нижнего $A^3\Sigma_u+$ состояния молекулы N_2).

С. Б. Осин

№ 1978, № 17

№2

фото-
ионизация

1978
9 Б1068. Вероятности переходов в области порога фотоионизации молекулярного азота. Gotchev B., Gürtler P., Koch E. E., Peatman Wm. B., Saile V. Transition probabilities at threshold for the photoionization of molecular nitrogen. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 5, 2089—2095 (англ.)

Методом пороговой фотоэлектронной спектроскопии высокого разрешения (лучше чем 0,003 эв) с использованием синхротронного излучения в области энергий фотонов 15,5—19,2 эв измерены сечения фотоионизации (ФИ) N_2 с образованием различных колебательных состояний $X^2\Sigma_g^+$, $A^2\Pi_u$ и $B^2\Sigma_u^+$ иона N_2^+ . Относит. выходы этих электронных состояний и заселенности их колебательных уровней сопоставлены с известными излит-ры обычными фотоэлектронными спектрами N_2 , выходами фотоионов и спектром поглощения N_2 . Показано, что на величины сечений сильное влияние оказывает взаимодействие ионизирующегося ридберговского состояния, лежащего вблизи порога образования соотв-щего ионного состояния, с континуумом, так что.

Х-1979,15

разделение процессов ФИ на прямую ионизацию и авто-
ионизацию в значительной мере теряет смысл. Эти фид-
берговские состояния не обязательно обнаруживаются
по спектру поглощения или фотонному спектру N_2 .
Такое взаимодействие приводит к появлению враща-
тельнообразной структуры в наблюдаемых колебатель-
ных переходах $N_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ и к плавному, но не
франк-кондоновскому распределению колебательных
интенсивностей для $N_2^+(A^2\Pi_u)$. Наблюдаемые спектры
сильно отличаются от обычных фотоэлектронных спект-
ров по форме пиков, их интенсивностям и длине коле-
бательных последовательностей. В то же время наблю-
дается хорошее согласие относит. интегральных ин-
тенсивностей полос X-, A- и B-состояний в спектрах
обоих типов.

В. Е. Скурат



N₂

Amma 6735

1978

Bready J. E., et al.

Chem. Phys., 1978,

31, 467-83.

M, M.
packet
now pay.

Meo of SEF

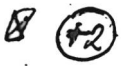
1978

N₂

M.N.

1 90:76:13w Generalized-molecular-orbital theory: simple multiconfiguration self-consistent-field method. Hall, Michael B. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, Tex.). *Int. J. Quantum Chem.* 1978, 14(5), 613-21 (Eng). A multiconfiguration MC-SCF computational method was developed which yields one Fock-like operator for all the filled orbitals (high occupation nos.) and a 2nd Fock-like operator for all the virtual orbitals (low occupation nos.). Since there are only 2 matrixes to build, this method is considerably faster than other MC-SCF approaches. Because of these similarities to std. MO calcs. this approach is termed generalized-mol.-orbital (GMO) theory. However, the virtual orbitals, unlike those of std. MO theory, are optimized to correlate the filled ones and can be used in a subsequent CI calcn. Results are presented for the correlation energy of H₂O, the spectroscopic const. of N₂, the singlet-triplet energy sepn. in CH₂, and the nature of the chromium-chromium quadrupole bond. Although these results are at a very low level of CI, the GMO approach appears to correct for the gross deficiencies of the single-determinant SCF procedure.

C.A. 1979, 90, N16



CH₂ (T₂g_g - ¹A_{1g})
Cr-Cr (e_g - e_g)

commun E898 1978

Mase M.-L., et al

N₂

Theor. chim. acta, 1978,

(3)

48, n1, 47-57

(Cis H₂O; III)

Физ 552



Страница 6247

1978

№2

22 Б148. Измерения относительных вероятностей переходов и изменение электронного момента перехода для второй положительной системы $C^3P_u - B^3P_g N_2$. Hartmann G., Johnson P. C. Measurements of relative transition probabilities and the variation of the electronic transition moment for $N_2 C^3P_u - B^3P_g$ second positive system. «J. Phys.», 1978, В11, № 9, 1597—1612 (англ.)

взята
фрагмент

С помощью многоканального анализатора измерена система полос $C^3P_u (v' = 0-4) - B^3P_g (v'' = 0-9) N_2$ (периодич. импульсный разряд). Первая положит. система в спектре не наблюдается. Поэтому поправка на самопоглощение в состоянии B^3P_g при анализе интенсивностей полос не вводилась. По интенсивностям линий R-ветви полосы 0—2 оценена вращательная т-ра молекул N_2 , $T_{вр.} = 450 \pm 20$ К. Приведены точные значения относит. вероятностей перехода $A_{v'v''}$ полос с указанием вкладов поправок на аппаратную функцию, хроматичность, счет фотонов. Найденные значения $A_{v'v''}$ сопоставляются с лит. данными,

2-1978, 122

По измеренным $A_{v'v'}$ рассчитана величина электронного момента перехода R_e . Зависимость R_e от r аппроксимирована полиномиальным рядом $R_e = b_0(1 + a_1 r + a_2 r^2)$. Приведены значения b_0 , a_1 и a_2 для полос с $v' = 0-4$, средние значения коэф. по всем полосам $-9,538$, $-1,336$, $0,487$ соотв. Отмечается, что в отличие от всех предыдущих работ полученный коэф. a_2 положителен.

В. М. Ковба



оттиски 6247 1978

№2

11 Д262. Измерения относительных вероятностей перехода и изменения электронного момента перехода для ~~второй~~ положительной системы $N_2C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$. Hartmann G., Johnson P. C. Measurements of relative transition probabilities and the variation of the

зависимости

electronic transition moment for $N_2C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$ second positive system. «J. Phys.», 1978, B11, № 9, 1597—1612 (англ.)

Результаты

Измерены относит. вероятности перехода $A_{v',v''}$ для 41 полосы во второй положит. системе (ВПС) $N_2C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$. Молекулы N_2 в основном состоянии возбуждались на верхний уровень $C^3\Pi_u$ ВПС N_2 под действием потока электронов в лавине периодического импульсного разряда в воздухе со средней энергией 12—16 эв. Подробно описана методика определения числа фотонов $N_{v',v''}$, излучаемых при переходе $v' - v''$, определяющих величину $A_{v',v''}$ как отношение $A_{v',v''} = N_{v',v''} / \left(\sum_{v''} N_{v',v''} \right)$, в котором сумма

ф. 1978 №11

$\sum_{v''} N_{v'v''}$ содержит в дополнение к измеренным поло-
 сам вклады более слабых неизмеряемых полос. Изме-
 ренные величины $A_{v'v''}$ табулированы и сравнены
 с ранее опубликованными данными других авторов.
 По измеренным величинам $A_{v'v''}$ с использованием
 усредненного метода наименьших квадратов опреде-
 лены электронные моменты перехода $\text{Re}(r)$. Показано,
 что зависимость $\text{Re}(r)$ от межъядерного расстояния r
 выражается полиномом второй степени ($1 - 1,366r +$
 $+ 0,487r^2$). Библ. 23.

И. Флакс



1978

N₂

кв. мех.
расчет;
(у)

8 Д153. Анализ вкладов третьего порядка в ионизационные потенциалы в методах уравнений движения и функции Грина. Применение к N₂. Herman Michael F., Yeager Danny L., Freed Karl F. Analysis of third order contributions to equations of motion-Green's function ionization potentials: application to N₂. «Chem. Phys.», 1978, 29, № 1—2, 77—96 (англ.)

На примере расчета потенциалов ионизации основного состояния молекулы N₂ исследуются погрешности, вызванные приближенным решением ур-ний в методах ф-ции Грина и ур-ний движения. Как правило при решении этих ур-ний учитывается лишь часть вкладов 3-го порядка. Для N₂ в базисе Саймонса и более широком базисе Несбета полностью учтены вклады 3-го порядка при расчете потенциалов ионизации. Сравнение полученных результатов с результатами применения обыч-

ср. 1978, N 8

ной методики показывает, что часть вкладов 3-го порядка имеет большую величину, так что отбрасывание их неправомерно. Эти вклады содержат виртуальную πg -орбиталь, что ведет к нарушению сходимости традиционных рядов теории возмущений. Предлагается матричный метод отбора наиболее существенных вкладов в ряд теории возмущений с последующим их включением в нулевой порядок. Этот метод по своей идее аналогичен использованию волн. ф-ции нулевого порядка, полученной в ограниченном методе конфигурац. взаимодействия или в многоконфигурационном методе ССП.

А. Дементьев



19 Б102. Пространственное распределение возбужденных молекул, образующихся при прохождении протонного пучка через газообразный азот. Itoh Akio, Asari Masatoshi, Fukuzawa Fumio. Spatial distribution of excited molecules induced by proton beam in nitrogen gas. «J. Phys. Soc. Jap.», 1978, 44, № 5, 1672—1677 (англ.)

Измерены пространственные распределения интенсивностей излучения различных полос газообразного N_2 , возбуждаемого протонным ударом с энергией 100 и 150 кэВ, в направлении, перпендикулярном оси пучка протонов при давл. N_2 $P=0,003-0,05$ мм. Для полос второй положит. системы N_2 [$C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$, $\lambda=3371$ Å для (0,0)], распределения значительно шире протонного пучка, тогда как для первой отрицат. системы N_2^+ [$B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$, $\lambda=3914$ Å для (0,0)] ширина распределения совпадает с шириной пучка. Установлено, что зависимость от P относит. сечений возбуждения полос может быть выражена как P^α . Для $\lambda=3914$ Å $\alpha=0$ в области лучка и $\alpha \approx 0,23-0,29$ вне этой области, а для $\lambda=3371$ Å $\alpha=1$ всюду. На основании полученных результатов сделан вывод, что возбуждение $C^3\Pi_u$ -состояний осуществляется вторичными электронами, выбиваемыми с Пв камеры столкновений. Этот вывод подтвержден модельными расчетами. Е. Николаев

возбужд.
в протонном
пучке

α-1978, N19

оттиски 6149

1978

№2

21 Б131. Анализ полосы 0—0-системы $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ в спектре испускания молекулярного азота. Jones C. C., Benesch W., Beiting J. E. J. Analysis of the $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ (0,0) emission band of molecular nitrogen. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 1, 95—107 (англ.)

М.М.

С высоким разрешением ($0,046 \text{ см}^{-1}$) измерена вращательная структура спектра испускания молек. азота в области полосы 0—0 системы $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ ($1,53 \text{ мкм}$). Из почти семисот измеренных линий большая часть отнесена к 27 ветвям полосы 0—0-перехода $B' \rightarrow B$ (около пятисот линий), а основная часть остальных — к линиям вращательной структуры полосы 3—6 первой положит. системы азота. Табулированы положение линий, их отнесение и интенсивность. Получены след. значения молек. постоянных N_2 (см^{-1}): состояние $B^3\Pi_g$ ($v=0$) — $A=42$, $B \pm 1,62877$, $D = (6,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-4}$, $\epsilon = 0,055$, $\gamma = 0,0037$, $C_0 = 2,314$, $C_1 = -0,0091$, $C_2 = 9 \cdot 10^{-5}$; состояние $B'^3\Sigma_u^-$ ($v=0$) — $B = 1,46482$, $D = 5,6 \cdot 10^{-6}$, $\lambda = 0,650$, $\gamma = -0,0025$; $\Delta T = 6545,311 \text{ см}^{-1}$. В. М. Ковба

2.1978, №21

Оттиск 6149 1978

N₂

1) 11 Д532. Анализ полосы $B' {}^3\Sigma_u^- \rightarrow B {}^3\Pi_g$ (0,0) в спектре испускания молекулярного азота. Jones C. C., Benesch W., Beiting E. J., III. Analysis of the $B' {}^3\Sigma_u^- \rightarrow B {}^3\Pi_g$ (0,0) emission band of molecular nitrogen. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 1, 95—107 (англ.)

М. П.

Полоса (0,0) системы $B' {}^3\Sigma_u^- \rightarrow B {}^3\Pi_g$ в спектре испускания молекулярного азота исследована с разрешением $0,046 \text{ см}^{-1}$. Положение линий в спектре определено с точностью $\sim 0,007 \text{ см}^{-1}$. Идентифицировано 632 линии, расположенные в области 1,53 мк. Из них 482 линии принадлежат 27 ветвям перехода $B' \rightarrow B$, а остальные 150 — полосе (3,6) первой положит. системы N₂. Определены молекулярные постоянные для колебательных уровней $v=0$ состояний N₂($B' {}^3\Sigma_u^-$ и N₂($B {}^3\Pi_g$). Библ. 15. В. С. Иванов

Ф. 1978 N 11

Quinn 6149

1978

N₂

88:161005n Analysis of the $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ (0,0) emission band of molecular nitrogen. Jones, C. C.; Benesch, W.; Beiting, E. J., III (Inst. Mol. Phys., Univ. Maryland, College Park, Md.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(1), 95-107 (Eng). The (0,0) band of the $B'^3\Sigma_u^- \rightarrow B^3\Pi_g$ emission (IR afterglow) system of N₂ was recorded with a resolu. of 0.046 cm⁻¹ and a line position accuracy of 0.007 cm⁻¹. 672 Lines are tabulated into a line list for the 1.53 μ m (low-resolu.) emission feature. Of these, 482 are assigned as members of the 27 branches of the $B' \rightarrow B$ transition, while 150 are identified with the 1PG (3,6) band. Mol. consts. for the $v = 0$ levels of the $B'^3\Sigma_u^-$ and $B^3\Pi_g$ states were computed and tabulated.

M.N.

C.A., 1978, 22, 102

No

Commun 71651

1978

Kendrick J.

(Kl. iux.
pacer)

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1978, 11
(20), L 601 - L 603.

N₂

1978

Kollman Peter A.

J. Am. Chem. Soc. 1978,
100(10), 2974-84

transfuges.
34 page

cm. HF-III

№ 2

1978

7 Д771. Обусловленная столкновениями диффузная фиолетовая полоса N_2 . Korystyńska A., Kowal

Luntz A. C. Molecular beam-laser induced fluorescence studies on the chemical reactions $H+NO_2 \rightarrow OH+NO$ and $H+ClO_2 \rightarrow OH+ClO$. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 12, 5411—5418 (англ.)

В УФ-области ($\sim 310,0$ нм) получены спектры возбуждения флуоресценции радикалов OH, образующихся в реакциях: $H+NO_2 \rightarrow OH+NO$ (I) и $H+ClO_2 \rightarrow OH+ClO$ (II). Исследовано распределение радикалов OH по колебательно-вращательным состояниям, а для реакции (I) — соотношение между трансляционной энергией и

спектр
флуоресценции

РНСРАУ, 1979, № 7

№2

1978

14 Б37. О функции возбуждения состояния $C^3P_u N_2$ электронным ударом. Косоручкина А. Д., Трехов Е. С. «Оптика и спектроскопия», 1978, 44, № 3, 615—617

функции
возбужд.
состояния

а К.
3p),

2. 1978, N14

Предложена аппроксимация для эксперим. ф-ции возбуждения электронным ударом колебательных уровней состояния C^3P_u с колебательных уровней основного состояния $X^1\Sigma_g^+$ молекулы азота. Для удобства расчета аппроксимация дана как ф-ция разности между энергией возбуждающих электронов и энергией, соотв-щей максимуму ф-ции возбуждения. При этом принято, что область энергии от максим. значения до порового составляет 2 эв. Проведено сравнение экспериментально определенной ф-ции возбуждения с ее аппроксимацией по предложенным ф-лам и установлено, что в интервале энергии возбуждающих электронов от 12,2 до 10^3 эв согласие удовлетворительное. Указано, что полученные ф-лы позволяют получить аналитич. выражение для усредненного сечения возбуждения электронным ударом, а также значительно облегчают расчеты процессов возбуждения электронным ударом состояния $C^3P_uN_2$ с колебательных уровней основного состояния. Отмечено, что метод определения колебательной т-ры состояния $X^1\Sigma_g^+$ по относительной заселенности уровней состояния C^3P_u справедлив лишь в условиях, когда возбуждение производится электронами, средн. энергия к-рых не ниже 2 эв.

А. С. Махнев

1978

Kovács Y.

N₂

центр.
исследования.

J. Mol. Struct., 1978;
46, 49-66



(Cu Mg H; III)

BX-1369

138 1978

au. 8441

Li_2 , Be_2 , Ba , Ca , Na , O_2 , F_2 ,
 P_2 , Cl_2 (re, kv. mex. pacim)

Mehandrie S.P., Ray N.K.,
Indian J. Chem., Sect. A 1978, 16A(3),
247-9.

Use of a Gaussian potential an based model po-
within FSDO formalism.

C.A. 1978, 89, N4, 31146u

10



N₂

Number 8302 / 1978

Mohammad S. Noor

Memorandum,
Republic
Pakistan

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1978, 16,
461-65

N₂

Commue 8317 | 1978

Mohammad Noor S.
Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1978, 16, 752-760
On the Generalization of
the Linnet Potential

N₂

оттиск 7516

1978

14 Б17. Упрощенная модель остоного псевдопотенциала для использования в молекулярных расчетах методом ССП с учетом валентных электронов. Nagy-Felsobuki E., Peel S. B. A simplified core pseudopotential model for use in valence-electron molecular SCF calculations. «Austral. J. Chem.», 1978, 31, № 12, стр. 2571—2579 (англ.)

Предложен атомный модельный псевдопотенциал V_p простого аналитического вида для молек. расчетов методом МО ЛКАО ССП с явным учетом лишь валентных электронов. Локальная часть V_p аппроксимирована простой экспоненциально — степенной функцией с одним параметром, а нелокальная — взвешенным проектором на остоные состояния. Вес проектора $W_c(\Phi_c)$ на остоное состояние $\Phi_c W(\Phi_c) = \beta_A (\epsilon_v^A - \epsilon_c^A)$, где ϵ_c^A — собственное значение Φ_c , ϵ_v^A — низшее собственное значение валентной АО остоного состояния атома, β_A — эмпирич. параметр. Проведен расчет электронного строения N₂, PN, P₂ с использованием V_p . Параметры V_p подобраны так, чтобы воспроизвести энергии АО основ-

расчет
электронн.
структур.

(72) 8

ж. 1979, N 14

ного состояния Р и N, полученные методом МО ЛКАО ССП с учетом всех электронов. Приведены рассчитанные энергии МО, равновесные расстояния, дипольные моменты и данные малликеновского анализа заселенностей. Отмечено удовлетворительное согласие с результатами расчётов с учетом всех электронов и с эксперим. данными.

О. Гриценко



N₂

PN

P₂

кв. лещ,
раскв.

(+2) ⊗

РЖРЦ,

1979

N⁴

7 Д128. Упрощенная псевдопотенциальная модель остова для использования в расчетах молекул методом ССП в валентном приближении. Nagy-Felsobuki Ellak, Peel J. Barrie. A simplified core pseudopotential model for use in valence-Electron molecular SCF calculations. «Austral. J. Chem.», 1978, 31, № 12, 2571—2579 (англ.)

Предложен остоновый псевдопотенциал для использования в расчетах неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО. В предложенном подходе проникновение описывается выражением
$$\sum_A N^A < \mu | \{ 1 - \exp(\alpha_A r_A) \} / r_A | \nu >, \quad \text{где}$$

N^A — число остоновых электронов атома A , α_A — атомный эмпирич. параметр, а псевдопотенциал имеет вид

$$\sum_A \sum_C < \mu | \Phi_c^A > \Delta \epsilon_c^A < \Phi_c^A | \nu >, \quad \text{где}$$

$\Delta \epsilon_c^A = \beta_A (\epsilon_l^A - \epsilon_c^A)$, где ϵ_l^A и ϵ_c^A — низшее и c -тое собств. значения для валентной оболочки атома A и β_A — эмпирич. параметр. Параметры α_A и β_A калибруются по расчетам атомов. По этой схеме в базах ОСТ-3ГФ и ОСТ-6ГФ рассчитаны N₂, PN и P₂. Приведены энергетич. характеристики равновесные для

1978

45-16

Омичи

ны связей, распределения электронной плотности, дипольные моменты. Обнаружено, что результаты расчетов близки к данным полных неэмпирич. расчетов проведенных в том же базисе (максим. различие в длинах связей 0,04 Å для P_2).

В. Л. Лебедев



N₂

Ammonia 7516

1978.

Nagy-Felsobarni E. et al.

Kb. ill.
facszer
Gy. egyet.

Aust. J. Chem., 1978,
31, 2541-49

N₂ Nitsch W., Kiefer W. 1978

J. mol. Struct., 1978, 45, 343-8.

спектр К. Р.



(см. O₂) III

1978

N₂

CO

фото-
эмиссия

(+1) A

Х. 1978, № 20

20 Б136. Исследование фотоэмиссии конденсированных пленок азота и монооксида углерода с высоким разрешением. Norton P. R., Tapping R. L., Broi-da H. P., Gadzuk J. W., Wacławski B. J. High-resolution photoemission study of condensed layers of nitrogen and carbon monoxide. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 53, № 3, 465—470 (англ.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии, с высоким разрешением (0,09 эВ) исследованы сконденсированные на медной поверхности пленки азота и монооксида углерода. Полученные спектры сопоставлены со спектрами газообразных N₂ и CO, измеренных при таком же разрешении. Колебательная структура в спектрах конденсированных N₂ и CO не наблюдалась. Значения вертикальных потенциалов ионизации N₂ (газ), энергии связи N₂ (конд.) и полуширины полос в ФЭС N₂ (конд.) (толщина пленки азота 2,4 нм) равны, соотв., (эВ), X²Σ_g⁺ — 11,40; 11,1; 0,7; A²Π_u — 126,5, 12,5; B²Π_u — 14,60; 14,3; 0,5. Значения вертикальных потенциалов ионизации (эВ) CO (газ) — 9,86 (X²Σ⁺), 12,56 (A²Π),

15.51 ($B^2\Sigma$). Энергии связи и полуширина полос в ФЭС СО (конд.), соотв-щие указанным состояниям, равны 8,7; 11,6; 14,5 эв и 1,0; 1,2; 0,8 эв — толщина слоя $\leq 0,5$ нм; 8,8; 11,7; 14,5 эв и 0,9; 1,1; 0,7 эв — толщина слоя 2,1 нм. Обсуждена природа наблюдаемого уширения полос. Впервые обнаружена фотоэмиссия из состояния, к-рое предположительно является возбужденным нейтр. состоянием $a^3\Pi$ СО. В. М. Ковба

1978

N₂

89: 155049j Nonequilibrium rotational level distribution of nitrogen ($C^3\Pi$) molecules in a gas discharge. Ochkin, V. N.; Savinov, S. Yu.; Sobolev, N. N. (Fiz. Inst. im. Lebedeva, Moscow, USSR). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 1978, 75(2), 463-72 (Russ). The intensity distribution in the rotational structure of the bands of the N_2 2nd pos. system was investigated for a d.c. discharge and high-current pulsed discharge. The causes of the appearance of a hot group of N_2 mols. ($C^3\Pi_u$) with a high level of rotational excitation are discussed. The group is produced as the result of impact deexcitation of the N_2 mols. ($E^3s_g^+$). The alternation of intensities in the emission spectrum of the hot group is considered. It is ascribed to the existence of selection rules on transfer of electronic excitation in collisions between the heavy particles.

представ.
 имене.
 во впац.
 ст/группе

C.A., 1978, 89, N18

N₂

osmuc 7308

1978

from,

Peatman Wm. B.,
etal

gaseous-
gases

J. Chem. Phys., 1978,
69 (5), 2089-95.

1948

N₂

4 Д329. Спектроскопический анализ УФ-лазерной полосы $N_2(C^3\Pi_u, v=0 \rightarrow B^3\Pi_g, v=0)$, возбуждаемой в поперечном разряде при комнатной температуре. Petit Alain, Launay Françoise, Rostas Joëlle. Spectroscopic analysis of the transverse excited $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$ (0—0) uv laser band of N_2 at room temperature. «Appl. Opt.», 1978, 17, № 19, 3081—3087 (англ.)

М.Н.

Лазерная полоса $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$ (0—0), $\lambda = 3371$ Å, молекулы N_2 , возбуждаемая в импульсном поперечном разряде, сфотографирована с разрешением 0,005 Å. Исследованы воспроизводимость спектра от импульса к импульсу и влияние на спектр напряжения разряда и давления газа. Выполнен детальный вращательный анализ полосы. Исправлены ошибки в отнесении ряда линий, предложенном ранее (Dieke G. H., Heath D. F. Johns Hopkins Spectroscopic Rept, 17, Baltimore, 1959). Показано, что модель Пателя (Patel C. K. N. «Phys. Rev.», 1966, 141, 71) хорошо описывает оптич. усиление в различных вращательных ветвях полосы N_2 ($C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$, 0—0). Библ. 23.

В. С. Иванов

Ф. 1948/14

N₂

Summa 6791

1978

Ramakrishna Li.
et al.

Li. n.

(вино-сы)

Григор.

Chem. Phys. Lett.
1978, 57, (4),

● 557-60

(cur. H₂; III)

№2

расчет
энергии
перех.

15 B24. Расчет вертикального электронного спектра молекулы азота методом конфигурационного взаимодействия с исходной многоконфигурационной функцией и учетом всех одно- и двукратно возбужденных конфигураций относительно этой функции (МКД-КВ). Shih Shing-Kuo, Butscher Werner, Buenker Robert J., Peyerimhoff S. D. Calculation of the vertical electronic spectrum of the nitrogen molecule using the MRD-CI method. «Chem. Phys.», 1978, 29, № 1—2, 241—252 (англ.) 1978

Рассчитаны энергии электронных переходов из основного состояния молекулы азота. Использовано приближение конфигурац. взаимодействия с выделением для каждого электронного состояния нескольких основных конфигураций и построением всех одно- и двукратно возбужденных конфигураций по отношению к выбранным основным. Кроме того, применены процедуры окончательного отбора конфигураций и экстраполяции энергии. Основная часть вычислений проведена при равновесном межъядерном расстоянии основного состояния с двумя базисными наборами гауссовых функций. В первом из них к стандартному двухэкспонентному набору добавлены связевые s - и p -функции и центрированные на ядрах поляризац. s и p -функции; во втором — к пе-

2, 1978, N15

речисленным функциям добавлены d -орбитали, а также p -функции ридбергова типа. На примере основного состояния показано, что метод МКД-КВ позволяет практически полностью учесть эффекты электронной корреляции. Проанализированы состояния, возникающие при возбуждениях с МО $3\sigma_g$, $1\pi_u$, $2\sigma_u$. Включение в базис d -орбиталей позволяет улучшить согласие рассчитываемых значений энергий переходов и сил осцилляторов с эксперим. данными. Погрешность при вычислении энергий возбуждения оценивается величиной 0,1—0,3 эв, при вычислении потенциалов ионизации 0,5—0,7 эв. Для нек-рых состояний расчеты проведены также при межъядерном расстоянии, примерно в полтора раза большем равновесного с целью проследить изменение характера состояния от ридбергова к валентному. Рассмотрена проблема взаимного возмущения возбужденных состояний одинаковой симметрии, вследствие близости их энергий. Из полученных результатов отмечена проверка правильности отнесения $a^2\Sigma_u^+ - x\Sigma_g^+$ -перехода, предсказание пересечения потенциальных кривых состояний b и $o^1\pi_u$ при равновесном расстоянии основного состояния и предсказание близости энергий переходов в ридбергово состояние $3s^1\Sigma_u^+$ (с орбитали $2\sigma_u$) и в валентное состояние $b^1\Sigma_u^+$.

А. В. Немухин

1978

N₂Kb. acc.
p. 225
(Te)

88: 177572f Calculation of the vertical electronic spectrum of the nitrogen molecule using the MRD-CI method. Shih, Shing-Kuo; Butscher, Werner; Buenker, Robert J.; Peyerimhoff, Sigrid D. (Inst. Phys. Chem., Univ. Bonn, Bonn, Ger.). *Chem. Phys.* 1978, 29(1-2), 241-52 (Eng). A series of multi-ref. double excitation CI calcns. employing configuration selection and energy extrapolation is reported for the N mol. at its ground state equil. geometry to investigate the vertical electron spectrum of this system. The calcns. are carried out in the main with an AO basis of double-zeta quality augmented with *s*- and *p*-type bond functions, but some tests are also made with larger basis sets contg. atom-centered *d* species in order to better gage the influence of polarization effects on the calcd. results. The mol. excitation energies thereby obtained agree with exptl. values $\pm 0.1-0.3$ eV when the std. basis is employed, and the error limits are obsd. to be slightly reduced upon the inclusion of *d* functions in the AO basis set; ionization potentials are underestd. by $\cdot 0.5-0.7$ eV in the std. treatment but use of *d* functions improves the accuracy significantly in this case. In addn. some sample

calcns. indicate that the same level of accuracy can be obtained at larger internuclear distances as well, so that the prospects of constructing accurate potential curves for this and other diat. systems with such calcns. seem quite good.

C.A. 1978, 81, N 24

1978

№2

8 Д154. Расчет вертикального электронного спектра молекулы азота с использованием метода МСФ — KB. Shih Shing-Kuo, Butscher Werner, Bunker Robert J., Peyerimhoff Sigrid D. Calculation of the vertical electronic spectrum of the ni-

расчет
вертикального
электр. спектра



9, 1978, №8

trogen molecule using the MRD-CI method. «Chem. Phys.», 1978, 28, № 1—2, 241—252 (англ.)

Выполнены расчеты электронной структуры основного и ряда возбужденных состояний молекулы N_2 и иона N_2^+ . Расчеты проводились методом конфигурац. взаимодействия с многодетерминантной ссылочной ф-цией (МСФ — КВ) в двухэкспонентном гауссовом базисе, расширенном за счет включения поляризационных ф-ций в области связи (базис А) и d -ф-ций (базис Б), а также диффузных (ридберговских) ф-ций, при $R = 1,94$ А; несколько расчетов выполнено для $R = 1,614$ А. В базис КВ включались все конфигурации, соответствующие одно- и двухкратным возбуждениям исходных конфигураций, дающих наибольший вклад в волн. ф-цию соответствующего состояния. Расчеты в базисе А дают хорошее согласие теоретич. энергий возбуждения с экспериментом (ошибки не превышают 0,3 эв); точность лишь слегка увеличивается при расчете с базисом Б. В то же время введение в базис d -ф-ций заметно улучшает рассчитанные значения ПИ. Подробно проанализирована электронная структура возбужденных и ионных состояний; рассмотрены возможности применения использованного метода для расчета потенц. кривых этих состояний.

В. И. Барановский

N₂

CO

OH

C₂

CN

определ.
газа по
вращат.
структуре.

3 Г4. Определение температуры газа по вращатель-1978
ной структуре молекулярных спектров в плазмохимиче-
ском разряде. Тарасов Ю. В. «Тр. Моск. физ.-техн.
ин-та. Сер. Общ. и молекуляр. физ.», 1978, № 10,
154—158

Рассмотрены некоторые случаи несоответствия между
т-рой, определяемой по вращательной структуре элек-
тронно-колебательных полос излучения молекул, и
т-рой газа в плазме неравновесных разрядов низкого
давления, используемых в плазмохимии. В качестве
основной причины выдвигается вероятность неравно-
весного возбуждения молекул в результате химич. реак-
ций. Для экспрессной оценки $T_{\text{вращ}}$ предложено срав-
нить измеренный профиль полосы с рассчитанным
при различных т-рах. Расчет проведен для профилей
полос N₂ (337,1 нм), CO (519,8 нм), OH (306,4 нм),
C₂ (516,5 нм) и CN (388,3 нм) в диапазоне 300—
9000° К. Предложенный метод определения т-ры газа
применялся при изучении процессов, сопровождаю-
щих диссоциацию CO₂ в импульсном СВЧ-разряде с
магн. полем.

В. А.

ф. 1979, № 3

(4)

№ 2

СМИСК 7772 1978

15 Б101. Резонансное возбуждение электронным ударом нового валентного состояния N_2 . Vichon D., Gresteau F., Hueta A., Mazeau J. Resonant excitation of a new valence state in N_2 by electron impact. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 73, № 3, 405—414 (англ.)

Измерены спектры энергетич. потерь электронов в N_2 с разрешением 0.035 эв в области энергетич. потерь $\Delta E = 10,5 - 12,3$ эв при различ. энергиях первич. электронов. Обнаружена серия эквидистантных пиков в области $\Delta E = 11,3 - 12,1$ эв. На основании анализа зависимостей интенсивностей этих пиков от энергии первич. электронов при различ. углах измерения спектров энергетич. потерь установлено, что серию порождает неизвестное до сих пор валентное состояние N_2 , лежащее ниже его первого ридберговского состояния.

Е. Николаев

Сканирование
энергетич.
потерь

2. 1979, N15

1978

№ 2

2 Б14. К вопросу об отношении между орбитальными энергиями и полной энергией молекул, рассчитанных полуэмпирическим методом. Whitehead M. A. A remark on the relation between the orbital energies and the total energy in molecules calculated by a semiempirical method. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 497—498 (англ.)

расчет
полной
энергии

Методом ППДП/БУ проведен расчет полной энергии трихлорвинилизоцианата (I) и изовинилцианата (II) при различных валентных углах CNC, а также продуктов присоединения метилового спирта к I и II. Расстояние между винильным атомом C и азотом R_{NC} оптимизировали. Найдено, что коэф. пропорциональности K между суммой произведений орбитальных энергий занятых валентных МО на их заселенности и полной энергией максимален для наиболее стабильной конформации

х. 1979 № 2    CF_2CFMe

и изменение K с изменением R_{NC} минимальны волизи
равновесного $\angle CNC$. В рамках метода ППДП/БУ про-
веден также расчет N_2 и найдено, что коэф. пропор-
циональности G между суммой произведений энергий
всех МО на их заселенности (энергии остовных орби-
талей взяты из неэмпирич. расчетов) и полной энергией
равен 1,56 в соответствии с предсказанием Руденберга,
в то время как для I $G=1,09$, а для II $G=1,1$. Отме-
чено, что анализ изменения K может бь полезен при
оптимизации геометрии молекул.

О. Грищенко

1978

№2

расчет

6 Д185. Диаграммная форма теории возмущений: вычисление энергетических членов четвертого порядка, включающих квадрупольно возбужденные состояния, для систем с замкнутыми оболочками. Wilson Stephen, Silver David M. Diagrammatic perturbation theory: evaluation of fourth-order energy terms involving quadruply-excited states for closer-shell systems. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 5, 1539—1548 (англ.)

Проведен расчет вклада в энергию молекулы N_2 от членов четвертого порядка теории возмущений Рэлея — Шрёдингера (ЧЧП), включающих четырехчастичные возбуждения из хартри-фоковского детерминанта. Установлено: 1) компонента вклада из ЧЧП, соответствующая вкладам от нефизических несвязанных диаграмм и в конечном счете сокращающаяся с соответствующими членами 4-го порядка ряда теории возмущений, доминирует над компонентой вклада от ЧЧП, соответствующей связанным диаграммам, 2) в результате взаимного сокращения сумма вкладов от связанных диаграмм по абс. величине много меньше индивидуального вклада

ф. 1979, №6

от каждой диаграммы, 3) вклад от несвязанных диаграмм четвертого порядка может быть довольно значительным и зависит от межъядерного расстояния. Т. обр. расчет потенциальной кривой по методу конфигурационного взаимодействия с учетом лишь однократно и двукратно возбужденных конфигураций может привести к определенным ошибкам, поскольку в этом методе автоматически учитываются вклады от нефизических несвязанных диаграмм.

А. Обухов

очаю
на