

CH

DM. 22956

1985

5 Л1290. Многофотонная спектроскопия и анализ $E^2\Pi \leftarrow X^2\Pi$, полосы CH. Multiphoton spectroscopy and analysis of the $E^2\Pi \leftarrow X^2\Pi$, band of CH. Chen Peter, Chupka William A., Colson Steven D. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 121, № 4—5, 405—407 (англ.)

Методом 3-фотонной ионизации через промежуточное 2-фотонное резонансное состояние исследован спектр поглощения CH-радикалом лазерного излучения ($E = 1$ мДж, $\tau \approx 8$ нс, $\Delta\nu = 1$ см $^{-1}$, $\lambda = 310—315$ нм). Радикалы получались в процессе многофотонной диссоциации органич. молекул в сверхзвуковом потоке. Заселялись первые 12 уровней основного состояния CH, что соответствовало вращательной $T_{\text{ре}} \sim 300$ К. Проведен анализ вращательной структуры спектра, давший возможность отождествить обнаруженное ранее состояние $E^2\Pi$ с уровнем ($v=2$) состояния $D^2\Pi_i$. Определен ряд молекулярных констант возбужденного состояния CH.

М. Ю. Н.

(Ei, Bv)

ср. 1986, 18, N.5

CH

Am. 22956

1985

7 Б1194. Многофотонная спектроскопия и анализ полосы $E^2\Pi \leftarrow X^2\Pi$, CH. Multiphoton spectroscopy and analysis of the $E^2\Pi \leftarrow X^2\Pi$, band of CH. Chen Peter, Chupka William A., Colson Steven D. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 121, № 4—5, 405—407 (англ.)

Выполнен анализ вращат. структуры полосы 2—0. перехода $D^2\Pi_i \leftarrow X^2\Pi$, в (2+1) спектре многофотонной ионизации радикала CH в сверхзвуковой струе. Радикалы CH получали в результате фотофрагментации орг. соединений. Приведено положение линий Q_{11} , P_{11} , Q_{22} и P_{22} ветвей ($N=6-12$). В линиях Q-ветвей наблюдалось Λ -удвоение (величина расщепления 3—6 см^{-1}). Молек. постоянные CH ($D^2\Pi_i$, $v=2$) (в см^{-1}): $\nu_0(2-0) = 64209,4$, $B_2 = 12,7$, $D_2 = 1,58 \cdot 10^{-3}$, $A = -26,6$.

В. М. Ковба

M.N.

X. 1986, 19, N 7.

Chl

[Om. 22956]

1985

103: 223832u Multiphoton spectroscopy and analysis of the $E^2\Pi \leftarrow X^2\Pi$ band of methylidyne. Chen, Peter; Chupka, William A.; Colson, Steven D. (Sterling Chem. Lab., Yale Univ., New Haven, CT 06511 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 121(4-5), 405-7 (Eng). Rotational anal. of a 2-photon resonant 3-photon ionization spectrum of the CH radical, produced by UV multiphoton dissocn. in a supersonic expansion, allows assignment of the E state to the $v = 2$ level of the $D^2\Pi$ state. Population was obsd. in rotational levels up to $N = 12$.

$(E^2\Pi \leftarrow X^2\Pi)$

C.A. 1985, 103, N26

СН

1985

3 Л180. Миллиметровая спектроскопия неустойчивых молекул в радиочастотных разрядах и разрядах постоянного тока. Millimeter wave spectroscopy of transient species in RF and DC discharges. Destombes J. L. «Mol. Astrophys.: State Art and Future Dir. Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Bad Windsheim, 8—14 July, 1984». Dordrecht, e. a., 1985, 621—623 (англ.)

Исследованы вращательные спектры в мм-диапазоне радикалов CH, CN и ионов CO⁺, H₂D⁺ и HCO₂⁺ образуемых в ВЧ-разряде или в разряде постоянного тока. Приведены предварительные результаты анализа. В частности, линия, наблюдаемая при 372421,34 МГц, предсказанная ранее на основе изучения ИК-спектра, отнесена к вращательному переходу $1_{11}—1_{10}$ иона H₂D⁺.

М. Р. Алиев

М.П.

(74) 



Ф. 1986, 18, к 3.

СН

1985

10 Л165. Спектр обертонов валентных колебаний СН пропилена. Анализ молекулярных орбиталей в модели локальных мод. C—H stretching overtone spectrum of propylene. Molecular-orbital analysis in the local-mode model. Fang Howard L., Swofford Robert L., McDevitt Michael, Anderson Alfred B. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 2, 225—229 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазерного спектрометра на красителях получен спектр поглощения газообразного пропилена при комнатной т-ре и давл. 100 мм рт. ст. В рамках модели локальных мод представлен анализ ряда обертоновых полос вал. кол. СН в области 10 300—19 900 см^{-1} и дана их интерпретация. На основании расчета молекулярных орбиталей показано, что за появление в каждом обертоне двух полос вал. кол. СН-связей метильной группы ответственна делокализа-

спектр,
C-H.

ср. 1985, 18, № 10

ция π -орбитали, равно, как σ -скелетные орбитали ответственны за присутствие расщепленных полос вал. кол. концевых олефиновых СН-связей. Отмечено, что рассчитанные кривые потенц. энергии для С—Н-связей пропилена находятся в соответствии с 5 максимумами полос поглощения каждого обертона и не зависят от характера внутреннего вращения метильной группы.

Библ. 34.

В. К.

CH

Om. 22175

1985

1 J1236. Измерения относительных вероятностей переходов в системах $A-X$ и $B-X$ радикала CH. Relative transition probability measurements in the $A-X$ and $B-X$ systems of CH. Garland Nancy L., Crosley David R. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1985, 33, № 6, 591—595 (англ.)

Измерены относит. значения коэф. Эйнштейна для переходов с уровнями $v'=0$ и 1 в системах $A^2\Delta-X^2\Pi$ и $B^2\Sigma-X^2\Pi$ радикала CH. Измерения выполнены в метано-воздушном пламени при атмосферном давлении. Результаты сопоставлены с данными теоретич. расчетов.
В. С. Иванов

спектр,
вероятность
переходов

ср. 1986, 18, №1

CH

OM 22175

1985

24 B1200. Измерения относительных вероятностей перехода в системах $A-X$ и $B-X$ CH. Relative transition probability measurements in the $A-X$ and $B-X$ systems of CH. Garland N. L., Crosley D. R. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. transfer», 1985, 33, № 6, 591—595 (англ.)

Измерены относит. коэф. испускания Эйнштейна ($A_{v'v'}$) для переходов с уровней $v'=0$ и 1 состояний $A^2\Delta$ и $B^2\Sigma$ -молекулы CH в воздушно-метановом пламени при атмосферном давл. (полосы 0—0, 0—1, 1—0, 1—1, 1—2 переходов $A^2\Delta-X^2\Pi$, $B^2\Sigma-X^2\Pi$). Возбуждение указанных уровней осуществлялось перестраиваемым лазером на красителе с накачкой от эксимерного лазера. Приведены значения $A_{v'v'}$ и силы полос, параметры зависимости электронного момента перехода от R .

В. М. Ковба

М.П., Керол-
Ност переход.

X. 1985, 19, N 24

CH

[Om. 22175]

1985

103: 61916v Relative transition probability measurements in the A-X and B-X systems of methylidyne. Garland, Nancy L.; Crosley, David R. (Mol. Phys. Dep., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1985, 33(6), 591-5 (Eng). Relative Einstein emission coeffs. were measured for transitions from the $v' = 0$ and 1 levels in the $A^2\Delta-X^2\Pi$ and $B^2\Sigma-X^2\Pi$ systems of the CH radical. The measurements were made in an atm. pressure CH₄-air flame, and the results were compared with theor. calcs.

A-X, B-X

$|Re|/2$

C. A. 1985, 103, N 8

CH

1985

Kryachko Eugene S.

ell.n.

Chem. Phys. Lett., 1985,
116, N5, 411-414.

( cer. Zn H; III)

CH

1985

104: 215510t Compute simulated and experimental intensity distributions in the electronic bands of methylidyne emitted by pulse discharge in methane. Lange, H.; Sobczynski, R. (Dep. Chem., Univ. Warsaw, 02093 Warsaw, Pol.). *Symp. Proc. - Int. Symp. Plasma Chem.*, 7th 1985, 2, 611-16 (Eng). Edited by Timmermans, C. J. Eindhoven Univ. Technol.: Eindhoven, Neth. The intensity distribution in the rotational structure of the $C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$ electronic band was studied. The computed spectra for various optical densities are compared with the exptl. ones. The rotational temp. of CH radicals and their concn. were estd.

($C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$)

C.A. 1986, 104, N24

СН

1985

3 Л232. Вращательное распределение в одновременно возбужденных электронных состояниях СН. Rotational distribution in simultaneously excited electronic states of CH. Math N. N., Savadatti M. I. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1985, 34, № 1, 75—80 (англ.)

Состояния $A^2\Delta$, $B^2\Sigma^-$ и $C^2\Sigma^+$ радикала СН возбуждали в разрядах C_2H_2 и C_2H_4 и в пламени C_2H_2 . По результатам измерений интегр. интенсивностей вращательных линий в полосах $A^2\Delta-X^2\Pi$, $B^2\Sigma^--X^2\Pi$ и $C^2\Sigma^+-X^2\Pi$ определены вращательные распределения в этих состояниях. В отличие от состояний $B^2\Sigma^-$ и $C^2\Sigma^+$ в состоянии $A^2\Delta$ наблюдалось немаксвелловское распределение. Обсуждены причины различия распределений в указанных состояниях радикала, несмотря на одновременное их возбуждение. В. С. И.

(Ei, Bv)

ф. 1986, 18, № 3.

CH

1985

103: 95384k Rotational distribution in simultaneously excited electronic states of methylidyne. Math, N. N.; Savadatti, M. I. (Dep. Phys., Karnatak Univ., Dharwad, 580 003 India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1985, 34(1), 75-80 (Eng). $A^2\Delta$, $B^2\Sigma^-$ And $C^2\Sigma^+$ states of CH were excited in discharges through flowing C_2H_2 and C_2H_4 and in flames of C_2H_2 . The rotational distributions in these states were detd. from the measured integrated intensities of rotational lines for bands of $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$, $B^2\Sigma^- \rightarrow X^2\Pi$ and $C^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi$. The $A^2\Delta$ state exhibits a non-Maxwellian distribution while the $B^2\Sigma^-$ and $C^2\Sigma^+$ states show Maxwellian distributions. The non-Maxwellian distribution of the $A^2\Delta$ state and the different rotational distributions in the 3 states are discussed.

M. Chakraborty
 N. N. Math
 P. I. Savadatti
 & C_2H_2
 & C_2H_4 flames
 Max

C. A. 1985, 103, N 12

CH

1985

Maroulis G., Sana M.,
et al.

J. Mol. Struct., 1985,
122, N 3-4, Suppl.:

Theochem, 23, N 3-4,
● 269-280.

(cu. BH; III)

CH

1985

7 Д87. Расчет эффектов спин-орбитального взаимодействия в линейных молекулах с основным регулярным $^2\Pi$ -термом. Молекулы CH, SiF. Минаев Б. Ф. «Оптика и спектроскопия», 1985, 58, № 3, 541—545

Приведена схема расчета эффектов спин-орбитального взаимодействия (COB) в линейных молекулах, имеющих основное состояние с π -оболочкой, занятой менее чем наполовину. Расчеты основаны на методе ЧПДП с учетом конфигурац. взаимодействия. Вычислены константы COB для $^2\Pi$ -состояний, константы спин-вращательного взаимодействия для $^2\Sigma^+$ -состояний, параметры спин-ового расщепления для кватретов $^4\Sigma^-$ -типа и интенсивности дублеткватретных переходов. Резюме

М.П.

(H) X

ср. 1985, 18, N 7

SiF

СН

1985

15 Б1022. Расчет эффектов спин-орбитального взаимодействия в линейных молекулах с основным регулярным $^2\Pi$ -термом. Молекулы СН, SiF. Минаев Б. Ф. «Оптика и спектроскопия», 1985, 58, № 3, 541—545

Приведена схема расчета эффектов спин-орбитального взаимодействия (COB) в линейных молекулах, имеющих основное состояние с π -оболочкой, занятой менее, чем наполовину. Расчеты основаны на методе ЧПДП в приближении «половинок электронов» с учетом конфигурац. взаимодействия. Возможности расчетной схемы проиллюстрированы вычислениями констант COB для $^2\Pi$ -состояний, констант спин-вращательного взаимодействия для $^2\Sigma^+$ -состояний, параметров спинового расщепления для кватретов типа $^4\Sigma^-$ и интенсивностей дублет-кватретных переходов в молекулах СН и SiF. Получено удовлетворит. согласие с экспериментом.

Автореферат

М. П.

(11) 17
X. 1985, 19, N 15

CH

1985

Okabe Hideo, Cody R.J.;
Allen J.E., Jr.

chemp

Chem. Phys., 1985, 92,
N1, 67-73.

($\bullet$ C_2 ; III)

СН

1985

2 Б1010. Химическая связь и электронная корреляция в двухатомных молекулах, описываемая в рамках моделей ПОРП (полного оптимизированного реакционного пространства) и ПОРП—ВАКП (с учетом внутриатомной корреляционной поправки). Chemical binding and electron correlation in diatomic molecules as described by the FORS model and the FORS-IACC model. Schmidt M. W., Lam M. T. B., Elbert S. T., Ruedenberg K. «Theor. chim. acta», 1985, 68, № 1, 69—86 (англ.)

Вариант метода ПОРП (см. пред. реф.) применен к расчету молек. св-в (прежде всего — энергии диссоциации) двухатомных молекул. Для построения орбиталей использованы базисы гауссовых ф-ций типа трехэкспонентных наборов с учетом поляризац. АО. Показано, что несмотря на существенное улучшение значений энергии диссоциации по сравнению с методом ССП, для применяемого варианта ПОРП характерна погрешность от 5 до 30 ккал/моль. Показано, что для основ-

М.А., Дб

(47)

X. 1986, 19, N 2

ных состояний молекул ВН, СН, NH, ОН, FN, N₂, O₂, F₂ метод ПОРП—ВАКП позволяет предсказывать энергии диссоциации с погрешностью ≤ 5 ккал/моль. Методом ПОРП—ВАКП рассчитаны полные кривые потенциальной энергии для 5 низших состояний молекулы СН, вычислены соотв. спектроскопич. постоянные. Проведен анализ волновых ф-ций этих состояний, представленных разложениями по композиц. функциям (произведениям функций состояний изолированных атомов или ионов). На основании этого анализа обсуждено изменение знака дипольного момента при возбуждении молекулы.

А. В. Немухин



12 CH

[Om. 22458]

1985

13 CH

Steinle T.C., Woodward D.R.
et al.,

сверхтонк.
стрект.
1-уровн.,
и другие
желуди
в алл. ам.
уровн., и.п.

Astrophys. J., 1985,
294, N 1, Pt 2, 59-62.

CH

[om. 22892]

1985

Viscuso P. J., Stacey G. J.,
et al.,

Astrophys. J., 1985, 296,
N1, 142-148.

Судан-
денетр.
Снектр.

CH

1986

Челюков Е. И., Керим-
лова Е. Н.

и. п.

Изв. вузов. Физ.: 1986,
N 7, 65-69.

(сер. СИИ; III)

CH

(DM-23756)

1986

Frenking G., Koch W.,

Ac, meop.
pccrem.

J. Chem. Phys., 1986,
84, N 6, 3224-3229.

CH

[Dm. 23679]

1986

Kalcher F., Janoschek R.,

Chem. Phys., 1986, 104,

Ac;

N 2, 251-263.

CH

1986

12 Д145. Расчеты констант сверхтонкой структуры для двухатомных молекул в многочастичном приближении. II. Гидриды второго ряда. Many-body calculations of hyperfine constants in diatomic molecules. II. First-row hydrides. Kristiansen P., Veseth L. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 11, 6336—6344 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

М.П. Параметры магн. сверхтонкой структуры (параметры Фроша и Фолея) вычислены для двухатомных гидридов 2-го ряда с использованием многочастичной теории возмущений. Расчеты выполнены до третьего порядка в разложении многочастичного приближения. Коррекции на поляризацию остова включены через члены 2-го и 3-го порядков, а корреляционные эффекты — поправки 3-го порядка. Представлены результаты расчета для основного состояния, а также для трех возбужденных состояний $A^2\Delta$, $A^3\Pi$ и $A^3\Sigma$ в CH, NH и OH соответственно. Представлены частотные зависимости сверхтон-

⊗ (+2)

ср. 1986, 18, N 12

ких параметров, а также константа сверхтонкого взаимодействия с центробежным искажением для СН, которые находятся в согласии с экспериментом. Хорошее совпадение экспериментальных и расчетных параметров получено для основного состояния, где расхождение составляет несколько процентов. Ч. I см. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, 2711. Л. Л. Б.

CH

1986

13 Б4355. Индуцированная электронным ударом флуоресценция фрагментов — продуктов диссоциации охлажденного в газовой струе метана, метанола и этанола. Electron impact induced fluorescence of dissociating fragments from jet-cooled methane, methanol and ethanol. Kindvall G., Larsson M., Olsson B. J., Sigra P. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1986, 36, № 6, 515—520 (англ.)

спектр

При разрешении 0,09 Å методом высокочастотного отклонения зарегистрированы вращательно-разрешенные спектры Фл CH в переходах $A^2\Delta - X^2\Pi$ и $B^2\Sigma - X^2\Pi$ и CH^+ в переходе $A^1\Pi - X^1\Sigma^+$, возбужденные при бомбардировке электронами с энергией 20 кэВ молекул метана, метанола и этанола в сверхзвуковых газовых струях, истекающих в вакуум. Вращат. распределения интенсивностей в переходах (0,0) соответствуют ур-нию Больцмана с т-рами ~ 4000 К для системы $\text{CH}(A-X)$, 2000 К для системы $\text{CH}(B-X)$ и 1650 К для $\text{CH}^+(A-X)$. Одинаковые вращат. т-ры А-состояния CH , полученного из различных предшественников, могут показывать, что CH образуется в процессах ступенча-

CH^+

2.1987, 19, N 13

той диссоциации с одинаковыми конечными стадиями,
в к-рых могут участвовать, напр., вращательно горячие
радикалы CH_2 или ионы CH_2^+ . В. Е. Скурат

CH

1986

Klino Viliam,
Tiňo Jozef.

u. n. Collect. Czechosl. Chem.
Commun., 1986, 51, N4,
731-737.

(ser. CH₄; III)

СМ

1986

21 Б1039. Многочастичные расчеты констант сверхтонкого взаимодействия для двухатомных молекул. II. Гидриды элементов второго периода. Many-body calculations of hyperfine constants in diatomic molecules. II. First-row hydrides. Kristiansen P., Veseth L. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 11, 6336—6344 (англ.)

Для гидридов элементов второго периода методом многочастичной теории возмущений 3-го порядка рассчитаны константы, входящие в гамильтониан магн. сверхтонкого взаимодействия Фроша—Фоули. Используются базисные наборы ОСТ Кейда и Хуо. Приведены результаты для основных состояний молекул CH , NH и OH , а также для состояния $A^2\Delta$ молекулы CH , состояния $A^2\Sigma$ молекулы OH и состояния $A^3\Pi$ молекулы NH . Изучена зависимость полученных констант от колебат. квантового числа. Отмечено, что для основных состояний постоянные магн. сверхтонкого взаимодействия в рамках использованного подхода м. б. вычислены с точностью до нескольких процентов. Указаны возможные причины расхождений с экспериментом.

В. Б. Павлов-Вереvкин

(X)
(12)

X. 1986, 19, N 21

CH

1986

пост. сверх-
тонкого расщепл.

в $A^2\Delta$, ~~$A^2\Pi$~~
 $A^2\Sigma$ состоят.

(42) $\otimes$

С.А. 1986, 105, N2

105: 14381y Many-body calculations of hyperfine constants in diatomic molecules. II. First-row hydrides. Kristiansen, P.; Veseth, L. (Inst. Phys., Univ. Oslo, 0316 Oslo, Norway). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(11), 6336-44 (Eng). Magnetic hyperfine parameters (Frosch, R. A., Foley, H. M., 1952) were computed for 1st-row diatomic hydrides by use of many-body perturbation theory. The computations are complete to 3rd order in the many-body expansion, which means that core polarization corrections are included through 2nd and 3rd order, and correlation effects by their leading 3rd-order corrections. Computed results are presented for the ground states, and in addn. for the 3 excited states $A^2\Delta$, $A^2\Pi$, and $A^2\Sigma$ in CH, NH, and OH, resp. The vibrational dependencies of the hyperfine parameters were also predicted, and even a hyperfine centrifugal distortion const. obsd. for CH was computed, in agreement with expt. Agreements between computed and exptl. parameters were obtained, in particular for the ground states, where the errors in the computed values are a few percent max.



NH, OH

CH

1986

Novoa Juan J., Mota
Fernando.

He;

Chem. Phys. Lett., 1986,
123, N 5, 399-401.

( Cer. OH; III)

CH

(om. 22990)

1986

(27)

Novoa J. J., Mota F.,

Chem. Phys. Lett., 1986,
123, N5, 399-401.

Ac;

CH

1986

/ 104: 215683b Photoelectron spectroscopy of the excited states of the methyldyne (CH) radical. Pallix, Joan B.; Chen, Peter; Chupka, William A.; Colson, Steven D. (Sterling Chem. Lab., Yale Univ., New Haven, CT 06511 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(9), 5208-9 (Eng). The photoelectron spectrum of CH was obtained through a $2 + 1$ multiphoton ionization process subsequent to photodissocn. of ketene. The relative integrated intensities of the photoelectron peaks indicate that this is not a simple Franck-Condon progression resulting from overlap of the resonant intermediate state wave function with those of the ion. The spectra show that in some cases the ion is formed with one quantum vibrational energy and 2 quanta in others.

помогн-
чекмр

C. A. 1986, 104, ~24

СЖ

ОМ. 25967 1986

5 Б1236. Спектр лямбда-удвоения радикала ^{13}CH , исследованный методом микроволнового оптического двойного резонанса. The lambda-doubling spectrum of ^{13}CH , studied by microwave optical double resonance. Steimle T. C., Woodward D. R., Brown J. M. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 3, 1276—1282 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

(м.п.)

Исследованы переходы между компонентами лямбда-удвоения в основном состоянии $X^2\Pi$ ($v=0$) радикала ^{13}CH методом микроволнового оптич. двойного резонанса. Радикалы получали в р-ции атомов фтора с метаном. Определены параметры лямбда-удвоения: $p = -998,44$; $p_D = -0,298$; $q = 1146,308$; $q_D = -0,4777$ (МГц), а также параметры СТВ на ядрах ^{13}C и ^1H . Последние сравнены с результатами недавних неэмпирич. расчетов. Отмечено хорошее согласие теории и эксперимента.

Б. Ф. Минаев

X. 1987, 19, N.5

CH

1986

2 Б4596. Возбуждаемая лазером флуоресценция $\text{CH}(A \leftarrow X)$ в ионмолекулярных реакциях $\text{C}^+(^2P)$ с углеводородами при тепловых энергиях. Laser-induced fluorescence of $\text{CH}(A \leftarrow X)$ from ion-molecule reactions of $\text{C}^+(^2P)$ with hydrocarbons at thermal energy. Tsuji Masaharu, Nagano Ichiro, Nishiyama Nobuaki, Obase Hiroshi, Sekiya Hiroshi, Nishimura Yukio. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 14, 3106—3109 (англ.)

спектр

Методом Фл, индуцированной лазером, (ФИЛ) изучено колебат. распределение радикалов $\text{CH}(X^2\Pi)$, образующихся в р-циях $\text{C}^+(^2P)$ с C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_6 и C_3H_8 . Эксперим. проводили в быстропроточном реакторе (расход He 10 000 л/мин, диам. тракта 60 мм). $\text{C}^+(^2P)$ получали в р-циях $\text{He}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{C}^+(^2P) + \text{O}(^3P) +$

X. 1987, 19, № 2.

$+2,23$ эВ или $\text{He}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{C}^+(^2P) + \text{O}(^1D) + 0,26$ эВ,
 ионы He^+ создавали в СВЧ-разряде. Парц. давл. He
 $0,5\text{--}1,2$ Торр, CO и $\text{Yb} \sim 10$ мТорр. По спектрам ФИЛ
 $\text{CH}(A \leftarrow X, \Delta v = 0)$ установлено, что имеется вращат.
 равновесие с т-рой 300 К. Отношение населенностей низ-
 ших колебат. уровней $\text{CH}(X)$ $N_1/N_0 = 0,54\text{--}0,60$ во всех
 исследованных р-циях. Это отношение для C_2H_4 и C_2H_6
 соответствует статистич. распределению (СР) в модели
 трех бесструктурных частиц (C^+ , H , C_2H_3^+ (C_2H_5^+))
 с учетом вращения многоатомного иона. Дано качеств.
 объяснение отклонений от СР в р-циях C_3H_6 и C_3H_8 .
 Л. Ю. Мельников

CH

1986

лазерно-
флуорес.

105: 32218e Laser-induced fluorescence of methylidyne(A + X) from ion-molecule reactions of carbon monopositive ion(2P) with hydrocarbons at thermal energy. Tsuji, Masaharu; Nagano, Ichiro; Nishiyama, Nobuaki; Obase, Hiroshi; Sekiya, Hiroshi; Mahimura, Yukio (Grad. Sch. Eng. Sci., Kyushu Univ., Fukuoka, Japan 816). *J. Phys. Chem.* 1986, 90(14), 3106-9 (Eng). Vibrational distributions of CH($X^2\Pi$) radicals produced from ion-mol. reactions between C(2P) ions and C₂H₄, EtH, C₃H₆, and H₂ were studied in a flowing afterglow by a laser-induced fluorescence. The initial vibrational population ratios of CH($X:v'' = 0$) were similar (0.54-0.60) for all reactions. They were compared with statistical prior distributions for the 3-body model in which polyat. product ions were treated as at. ions.

C.A. 1986, 105, N4

CH

1986

104: 158659x Hyperfine structure and lifetime of the $C^2\Sigma^+$, $v = 0$ state of methylidyne. Ubachs, Wim; Meyer, Gerard; Ter Meulen, J. J.; Dymanus, A. (Fys. Lab., Katholieke Univ. Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(6), 3032-41 (Eng). From a laser-induced fluorescence expt. on a mol. beam of CH, the b and c hyperfine consts., the γ and γ_D spin-rotation consts., and the rotational consts. B , D , and H were obtained for the $C^2\Sigma^+$, $\delta = 0$ state. From measurement of the linewidths, that are partially caused by predissocn., and by comparing relative line intensities, different lifetimes were detd. for upper (F_1) and lower (F_2) ρ -doublet states of the $C^2\Sigma^+$ state. For the F_1 states there is a const. lifetime of 3.7 ± 1.0 ns, that is independent of N , while for the F_2 states there is an increase in lifetime for higher N up to 8.0 ± 1.5 ns for $N = 11$.

($C^2\Sigma^+$)
сверх тонк.
структура

C. A. 1986, 104, N 18.

СН

1986

17 Б4365. Сверхтонкая структура и время жизни СН в состоянии $C^2\Sigma^+$, $v=0$. Hyperfine structure and lifetime of the $C^2\Sigma^+$, $v=0$ state of CH. Ubachs Wim, Meyer Gerard, Meulen J. J. ter, Dymanus A. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 6, 3032—3041 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом лазерно-индуцированной Фл с использованием перестраиваемого лазера на красителе с удвоением частоты зарегистрированы 27 линий перехода СН ($C^2\Sigma^+$, $v=0 \leftarrow X^2\Pi$) при 314 нм, возбуждаемых в молек. пучке. Радикалы СН получали по р-ции с ацетиленом

М.П.

Х. 1986, 19, N 17

атомов Н и О, получаемых путем пропускания смеси H_2O и O_2 через зону СВЧ разряда. На основании анализа спектров определены молек. константы $\text{CH}(C^2\Sigma^+, v=0)$: $\nu_{00}=31791,6456\pm0,0005 \text{ см}^{-1}$; $B_\Sigma=427382,3\pm1,1 \text{ МГц}$; $D_\Sigma=47,852\pm0,028 \text{ МГц}$; $H_\Sigma=0,00247\pm0,00018 \text{ МГц}$; $\gamma=1190,7\pm3,3 \text{ МГц}$; $\gamma_D=0,667\pm0,042 \text{ МГц}$; $b=600,6\pm1,5 \text{ МГц}$; $c=56,6\pm\pm10,2 \text{ МГц}$. На основании измерений ширины линий, частично уширенных из-за преддиссоциации, и сравнения относит. интенсивностей линий найдено, что верхняя (F_1) и нижняя (F_2) компоненты ρ -дублета состояния $C^2\Sigma^+$ имеют различные времена жизни. Для F_1 -компоненты величина $\tau=3,7\pm1,0 \text{ нс}$ и не зависит от квант. числа N , тогда как для F_2 -компоненты наблюдается рост τ с увеличением N , так что при $N=11$ достигается $\tau=8,0\pm1,5 \text{ нс}$.

В. Е. Скурат

СН

1986

9 Л451. Сверхтонкая структура и время жизни состояния $C^2\Sigma^+$, $v=0$ радикала СН. Hyperfine structure and lifetime of the $C^2\Sigma^+$, $v=0$ state of CH. Ubachs W., Meyer G., ter Meulen J. J., Dymanus A. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 6, 3032—3041 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С помощью перестраиваемого импульсного лазера получен с высоким разрешением спектр возбуждения флуоресценции радикала СН в молекулярном пучке. Радикалы СН получали из разряда в смеси $C_2H_2/O_2/H_2O$. На основании анализа тонкой (ТС) и сверхтонкой (СТС) структуры перехода $C^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi$ в области 314 нм получены постоянные ТС и СТС радикала СН в состоянии $C^2\Sigma^+$, $v=0$. Измерены времена жизни отдельных компонент СТС линий излучения СН. Показано, что время жизни компоненты F_1 не зависит от вращательного квантового числа N , а компоненты F_2 растет с увеличением N . Библ. 30. Е. Н. Т.

(М.А.)

ср. 1986, 18, n 9

СН

от. 24871

1986

24 Б1242. Сверхтонкая структура и Λ -удвоение в $A^2\Delta$ состоянии СН; наблюдение внутренних сверхтонких возмущений. Hyperfine structure and Λ doubling in the $A^2\Delta$ state of CH: Observation of an internal hyperfine perturbation. Ubachs Wim, van Herpen W. M., ter Meulen J. J., Dymanus A. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 12, 6575—6580 (англ.)

Для молекулы СН экспериментально исследована СТС электронного состояния $A^2\Delta$ до значений вращат. квантового числа $N \leq 14$. Установка, использованная для проведения эксперимента с молек. пучками, описана в пред. работе авторов («J. Chem. Phys.», 1986, 84, 3032). По полученным данным определены постоянные сверхтонкого взаимодействия в состоянии $A^2\Delta$. Показано, что при $N=10$ происходит резонанс между сверхтонкими компонентами вращат. состояний, отвечающих подуровням $\Delta_{5/2}$ и $\Delta_{3/2}$. Предложена оценка величины Λ -удвоения исследованных состояний, к-рое вследствие его малости экспериментально не удается измерить.

Б. И. Жилинский

(М.А.)

X. 1986, 19, № 24

CH

от. 24871

1986

§ 12 Д144. Сверхтонкая структура и Λ -удвоение в $A^2\Delta$ -состоянии CH: наблюдаемое и внутреннее сверхтонкое возмущение. Hyperfine structure and Λ doubling in the $A^2\Delta$ state of CH: observation of an internal hyperfine perturbation. Ubachs Wim, Van Herpen W. M., ter Meulen J. J., Dymanus A. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 12, 6575—6580 (англ.)

Измерена экспериментально и рассчитана теоретически сверхтонкая структура возбужденного $A^2\Delta$ состояния свободного радикала CH при $N=10$. Показано, что сверхтонкие расщепления обусловлены пересечением спин-дублетных вращательных совокупностей состояний. Путем измерений Λ дублетных расщеплений оценен верхний предел для Λ -удвоения в состоянии $A^2\Delta$.

В. В. Росихин

М.П.

ср. 1986, 18, N 12

CH

(24719)

(Om. 24871)

1986

105: 51351j Hyperfine structure and Λ doubling in the $A^2\Delta$ state of methylidyne: observation of an internal hyperfine perturbation. Ubachs, Wim; Van Herpen, W. M.; Ter Meulen, J. J.; Dymanus, A. (Fys. Lab., Katholieke Univ., Nijmegen, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(12), 6575-80 (Eng). The observation is reported of a resonance between hyperfine states, due to the crossing of rotational ladders at $N = 10$ of $\Delta_{5/2}$ and $\Delta_{3/2}$ spin-doublet states in the excited $A^2\Delta$ state of CH. Accurate values for the hyperfine consts. a , b , and c in the $A^2\Delta$ state were obtained. From measurements of the Λ -doublet splittings, an upper limit was estd. to the Λ doubling in the $A^2\Delta$ state.

всмысле.

 Λ -расщепл. $A^2\Delta$ состояние.С.А. 1986, 105, N 6

СН

1987

№ 1 Б1094. Колебательно-вращательный спектр испускания СН ($X^2\Pi$). The vibration-rotation emission spectrum of CH($X^2\Pi$). Bernath P. F. «J. Chem. phys.», 1987, 86, № 9, 4838—4842 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра высокого разрешения ($0,02 \text{ см}^{-1}$) измерена вращат. структура полос 1—0, 2—1 и 3—3 в спектре испускания молекул СН ($X^2\Pi$) возбуждаемом при пропускании смеси гелия и метана и паров белого фосфора через микроволновый безэлектродный разряд. Спектр испускания получен также с использованием исходной газовой смеси аргон—аллен. Приведены положения и отнесение линий; значения T_v , B_v , D_v , H_v , A_v , γ_v , γ_D , q_v , q_{Dv} , q_{Hv} , p_v , p_{Dv} , p_{Hv} для отдельных колебат. уровней. Значения равновесных молек. постоянных ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e G_e$, B_e , α_e , γ_e (в см^{-1}) и R_e (в Å): 2860, 4118; 64,1082; 2,2406; 14,45862; 0,53416; 0,00198; 1,11983. Рассчитаны: потенциальная кривая РКР СН ($X^2\Pi$, $v=0-4$) (приведены значения E_v , $R_{\text{мин}}$, $R_{\text{макс}}$); исходя из нее — значения B_v , D_v , H_v , L_v , ($v=0-4$); положения термов колебательно-вращат. энергии ($v=0-3$, $J \leq 12,5$). В. М. Ковба

М.А.

Х. 1988, 19, N 1

СН

[от. 27459]

1987

12 Л125. Колебательно-вращательный эмиссионный спектр $\text{CH}(X^2\Pi)$. The vibration — rotation emission spectrum of $\text{CH}(X^2\Pi)$. Bernath P. F. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 9, 4838—4842 (англ.)

С применением высокоразрешающего фурье-спектрометра исследован колебательно-вращательный эмиссионный спектр радикала СН в состоянии $X^2\Pi$. Полосы 1—0, 2—1 и 3—2 зарегистрированы в возбуждаемом микроволновым полем разряде паров аллена в аргоне и метана в гелии. Для калибровки спектра СН использовались линии примеси молекул СО. Ширина линий составляла $\sim 0,036 \text{ см}^{-1}$, а положение пиков определялось с точностью $0,002 \text{ см}^{-1}$. По полученным данным определены спектроскопич. постоянные для состояний с $v=0, 1, 2$ и 3. Приводятся значения $\omega_e=2860,4118(98) \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e=64,1082(46) \text{ см}^{-1}$, $B_e=14,45862(48) \text{ см}^{-1}$, $\alpha_e=0,53416(58) \text{ см}^{-1}$ и $r_e=1,11983(2) \text{ \AA}$. Рассчитана кривая потенциала Ридберга — Клейна — Риса для состояния $^2\Pi$. В. А. Морозов

(М.Н.)

ср. 1987, 18, № 12

CH

DM 27459

1987

106: 223336x The vibration-rotation emission spectrum of methylidyne($X^2\Pi$). Bernath, P. F. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(9), 4838-42 (Eng). The vibration-rotation emission spectrum of the $X^2\Pi$ state of CH was obsd. with the McMath Fourier transform spectrometer at Kitt Peak. The 1-0, 2-1, and 3-2 bands were detected in a microwave discharge of allene in Ar and CH₄ in He. A simultaneous fit of all of the line positions provided spectroscopic consts. for $v = 0, 1, 2$, and 3. Equil. mol. consts. (in cm⁻¹) include $\omega_e = 2860.4118(98)$, $\omega_e x_e = 64.1082(46)$, $\omega_e y_e = 0.2406(10)$, $B_e = 14.458\ 62(48)$, $\alpha_e v\ 0.534\ 16(58)$, $\gamma_e = 0.001\ 98(15)$, $r_e = 1.119\ 83(2)$ Å. An RKR potential curve was calcd. from the equil. consts.

конд.-вращ
спектр
 $X^2\Pi$, М.П.

C.A. 1987, 106, N26

CH

(DM. 26329)

1987

106: 58199v Resonant multiphoton ionization spectrum and electronic structure of methylidyne (CH) radical. New states and assignments above 50,000 cm^{-1} . Chen, Peter; Pallix, Joan B.; Chupka, William A.; Colson, Steven D. (Sterling Chem. Lab., Yale Univ., New Haven, CT 06511 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(2), 516-20 (Eng). Resonant multiphoton ionization spectra, with mass and photoelectron anal., of photolytically produced CH radical yields previously unobserved bands arising from 2-photon transitions to Rydberg and highly excited valence states. Rotational anal. of the spectrum for $m/e = 13$, coupled with vibrational labeling of the resonant state by photoelectron kinetic energy anal., identifies a new state, designated $E'^2\Sigma^+$. Breaking off of rotational structure near $N' = 11$ in the $v = 2$ level of the $D^2\Pi_i$ state is attributed to predissocn. by a doubly excited potential curve calcd. to lie in this energy region. Comparison is made with earlier absorption spectra taken following flash photolysis.

(E'25+)

C.A. 1987, 106, N8

CH

1987

Hudgens J. W.,
Dulcey C. S., et al.

et al.
J. Chem. Phys., 1987,
87, N 8, 4546-4558.

(corr. CH_2F ; III)

СН

1987

9 Д277. Процессы фотодиссоциации молекулы СН. Photodissociation processes in the CH molecule. Van Dishoeck Ewine F. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 1, 196—214 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП КВ в широком базисе рассчитаны потенц. кривые ряда состояний радикала СН, диссоциирующих на 4 нижние состояния разъединенных атомов, а также кривые нескольких состояний Ридбергова. Вычислены дипольные моменты переходов и сечения возбуждения для процессов прямой диссоциации $X^2\Pi (v''=0) \rightarrow B^2\Sigma^+, 2^2\Sigma^+$ и процессов преддиссоциации через связанные состояния $A^2\Delta, C^2\Sigma^-, 2,3,4^2\Pi$. Подробно обсуждены типы неадиабатич. связи преддиссоционных состояний и рассчитаны матричные элементы соответствующих операторов: радиальной кинетич. энергии ядер и спин-орбитального взаимодействия. Библ. 48. Е. П. Смирнов

М.А.

фр. 1987, 18, n 9

CH (2) (Dm. 26918) 1987

Dixon R.N., Newton D.P.,
et al.,

U.N.
y. Chem - Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2, 83,
N 4, 675 - 682.

CH.

(M. 29079)

1987

Hudgens J.W., Duleey C.S.,
et al.

crekmp

J. Chem. Phys., 1987,
87, N 8, 4346-4558.

CH

1987

2 Л162. Вероятности перехода в системе $C^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ радикалов CH. Transition probabilities in the $C^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ system of CH. Jeffries Jay B., Copeland Richard A., Crosley David R. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1987, 37, № 5, 419—423 (англ.)

Исследованы спектры люминесценции при лазерном возбуждении пламени, образующегося при горении метана в кислороде. В области 290—350 нм наблюдались полосы, обусловленные переходами между электронными состояниями $C^2\Sigma^+$ и $X^2\Pi$ радикалов CH. Измерение относит. интенсивности полос позволило определить отношение коэф. Эйнштейна для соответствующих переходов. Полученные данные находятся в хорошем согласии с результатами теоретич. расчета, выполненного из первых принципов с использованием волн. ф-ций для потенциала Морзе. К. Э. М.

 $C^2\Sigma^+ - X^2\Pi$,вероятн.
перехода

Ф. 1988, 18, №2.

CH

Om. 27 318

1987

107: 48675d Transition probabilities in the $C^2\Sigma^+-X^2\Pi$ system of methylidyne. Jeffries, Jay B.; Copeland, Richard A.; Crosley, David R. (Mol. Phys. Dep., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1987, 37(5), 419-23 (Engl). Relative Einstein emission coeffs. were measured for several bands of the $C^2\Sigma^+-X^2\Pi$ system of the CH radical, using laser-induced fluorescence in an atm. pressure flame. The results were compared with theor. calcs.; a previously calcd. ab initio electronic transition moment, together with Morse wave functions, formed a good representation of the exptl. results.

($C^2\Sigma^+-X^2\Pi$)
(rep. repex.)

C.A. 1987, 107, 46

CH

(DM 28285)

1987

Jenč F., Brandt B.A.,

помениц.
сп-лис
осн.
состо-
януз

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

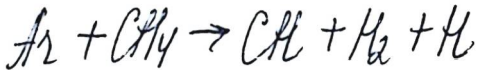
CH⁺

1987

108: 121312k New electronic transitions in the methyliumylidene (CH⁺) molecule. Sarre, P. J.; Whitham, C. J. (Dep. Chem., Univ. Nottingham, Nottingham, UK NG7 2RD). *Mol. Phys.* 1987, 62(6), 1505-8 (Eng). The identification of new electronic transitions in CH⁺ is described. Laser photofragment spectra previously recorded at ~540 nm arose from electronic transitions between triplet energy levels which lie just below the C⁺(²P) + H(²S) dissociation limit and a weakly-bound long-range triplet state which correlates to the C(³P) + H⁺ dissociation asymptote. At least part of the reported CH⁺ photofragment spectrum at ~350 nm is probably due to transitions between analogous near-threshold singlet levels and weakly-bound long-range singlet states which correlate to C(¹D) + H⁺. A bound-bound-free mechanism was invoked to explain the observations in which laser excitation is followed by radiative decay to the continuum just above the lowest dissociation asymptote. This results in the formation of C⁺ which is detected.

новый
н. переход

с. А. 1988, 108, № 14



1987

CH

1 Л236. Детектирование методом возбуждаемой лазером флуоресценции радикалов $\text{CH}(\text{X}^2\Pi)$, образующихся в реакции с $\text{Ar}({}^3\text{P}_{2,0})$ при тепловой энергии. Laser-induced fluorescence detection of $\text{CH}(\text{X}^2\Pi)$ produced from the reaction of $\text{Ar}({}^3\text{P}_{2,0})$ at thermal energy. Sekiya Hiroshi, Hirayama Toshiyuki, Nishimura Yukio. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 6, 597—600 (англ.)

спектр флуор-
Методом возбуждаемой лазером флуоресценции зарегистрированы радикалы $\text{CH}(\text{X}^2\Pi)$, образующихся в реакции $\text{Ar}({}^3\text{P}_{2,0}) + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}(\text{X}) + \text{H}_2 + \text{H}$. Определено колебательное распределение радикалов. Установлено, что на колебательное возбуждение расходуется только 3,5% от величины избыточной энергии реакции. В. А. Е.

ср. 1988, 18, №1

CH

1987

Singh Markandey,
Chaturvedi Jai Prakash.

Earth, Moon Planets

Chakrap

1987, 38(3), 253-61.

●
(cer. C₂; III)

СН

О.М. 26311

1987

Б15 Б1029. Процессы фотодиссоциации в молекуле СН. Photodissociation processes in the CH molecule. Van Dishoeck Ewine F. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 1, 196—214 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны энергии и электронные волновые ф-ции состояний молекулы СН, коррелирующих с четырьмя низшими диссоциац. пределами, а также моменты дипольных переходов и сечения фотодиссоциации молекулы. Использован общий набор МО состояния $a^4\Sigma^-$, построенных с базисом Данинга сгруппированных гауссовых орбиталей, к к-рому добавлены поляризац. и диффузные ф-ции. Заключено, что фотодиссоциация из основного состояния может проходить по ряду каналов, включающих непосредственное возбуждение в несвязанные состояния (напр., $B^2\Sigma^-$, $2^2\Sigma^+$) или возбуждение в состояния (напр., $C^2\Sigma^+$, $3^2\Sigma^+$, 2π), связанные с отталкиват. состояниями спин-орбитальной или вращат. связью. А. В. Немухин.

М.М.

Х. 1987, 19, N 15

CH

OM. 26311 1987

106: 93463y Photodissociation processes in the methylidyne (CH) molecule. Van Dishoeck, Ewine F. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(1), 196-214 (Eng). The photodissocn. processes in the CH mol. were investigated using ab initio self-consistent-field with configuration-interaction (CI) methods. Potential energy curves of all states which dissociate into the lowest four atomic limits were calculated, as well as those of several higher-lying states with Rydberg character. Transition dipole moments connecting the excited states with the lowest states were obtained. Direct photodissociation of CH may occur by absorption into the continua of the $B^2\Sigma^-$ and $2^2\Sigma^+$ states, and cross sections for absorption from the $X^2\Pi$ $v'' = 0$ state into these states are reported. Indirect photodissociation of CH may take place by absorption into bound states, which are subsequently dissociated through interactions with continuum states. The $A^2\Delta$ vibrational levels couple with the continuum of the $X^2\Pi$ state through the nuclear rotational operator. The nuclear rotational coupling elements were obtained from the CI wave functions, and predissociation rates are presented. The $C^2\Sigma^+$ $v' = 0$ state predissociates efficiently by spin-orbit coupling with the $B^2\Sigma^-$ state. The 2, 3, and 4 $^2\Pi$ states of CH interact strongly through the radial nuclear kinetic

ab initio
расчет
потенциальных
энергий
электрон-
состояния.

C.A. 1987, 106, N12

energy operator. The nuclear radial coupling elements between these states were computed by numerical differentiation of the CI wave functions. The calcd. cross section for absorption into the coupled states consists of a series of resonances with asym. Beutler-Fano profiles superimposed on a strong continuous background. The $3(F)^2\Sigma^+$ state, as well as the higher-lying (Rydberg) states, may interact with the $^2\Pi$ states through rotational coupling or with the $2^4\Sigma^-$ state through spin-orbit coupling. The photodissocn. rate of CH by the unattenuated interstellar radiation field was computed. The total rate is $9.5 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$. The $2^2\Sigma^+$ and coupled $^2\Pi$ channels are most effective in the photodissocn. of interstellar CH.



МС

1987

9 Б4325. Видимая хемилюминесценция в реакции F с CH_3F . Zhou Shi-Kang, Qiu Yuan-Wu, Shi Ji-Liang, Li Fang-Lin, Hu Yi-Hua. «Хуасюэ сюэбао, Acta chim. sin.», 1987, 45, № 10, 955—958 (кит.; рез. англ.)

Исследована видимая Хл в р-ции $F + CH_3F$ в проточном реакторе при перемешивании потоков CH_3F и CF_4/Ar , пропускаемого через СВЧ-разряд. Общее давл. 0,05—0,2 мбар. Зарегистрировано семь вибронных полос $HC \ E(A^1A'' - X^1A')$ ($v', v'' = (4,0), (3,0), (2,0), (1,0), (0,0), (1,1)$ и $(0,1)$ (450—750 нм) и четыре колебат. обертона HF в основном состоянии ($v', v'' = (4,0), (5,1), (6,2)$ и $(3,0)$ (650—900 нм). Найдены колебат. распределение HF ($v' = 4, 5, 6$) $N_4 : N_5 : N_6 = 1 : 0,2 : 0,04$ и вращат. т-ра HF ($v' = 3$) (310 К). Возбуждение высоких уровней HF и два типа спектров испускания обусловлены втор. р-цией F с CH_2F .
Л. Ю. Мельников

(71) ☒



HF

Х. 1988, 19, № 9

2e (C-H)

1988

109: 99160f Reply to "Comment on 'Accuracy of ab initio carbon-hydrogen (C-H) bond length differences and their correlation with isolated C-H stretching frequencies'". Aljibury, A. L.; Snyder, R. G.; Strauss, Herbert L.; Raghavachari, Krishnan (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem.*

Phys. 1988, 88(11), 7257 (Eng). A polemic in reply to comments of L. Schafer and K. Siam (*ibid*, 1988(88) 7255-6).

(meop. faciem)

C.A. 1988, 109, N 12.

CH

22. 2940

1988

21 Б1032. Расчеты В и СН релятивистским методом ССП с учетом всех электронов. All-electron relativistic SCF calculations for B and CH. Баеск К. К., Lee Y. S. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 147, № 4, 367—372 (англ.)

Для систем с одной открытой оболочкой разработан релятивистский метод ССП, являющийся аналогом ограниченного метода Хартри—Фока. Метод использует молек. 4-компонентные спиноры и базис из орбиталей слейтеровского типа. Он применен для расчета атома В и молекулы СН. Показано, что даже при небольших базисах получаются удовлетворительные оценки релятивистских эффектов. Спин-орбитальное расщепление для основных состояний В и СН составило 20 и 37 см^{-1} соотв. (эксперим. величины 16 и 28 см^{-1}). Отмечено, что метод дает возможность оценить точность многочисленных приближенных подходов к учету релятивистских поправок.

А. А. Сафонов

М.П.

Х. 1988, 19, N 21

CH

cm. 30913

1988

109: 216360j MC-SCF study of potential curves of small radicals. Biskupic, Stanislav; Klein, Rudolf (Dep. Phys. Chem., Slovak Tech. Univ., 812 37 Bratislava, Czech.). *THEOCHEM* 1988, 27-31 (Eng). A series of calcns. of the ground state potential energy curves of some diat. hydride radicals (CH , BH^+ , NH and AlH^+) has been carried out in the framework of the MC-SCF method. Although the configuration space and basis sets used are not very large, the calcd. spectroscopic consts. are in relatively good agreement with expl. data.

номери.

книжки

ошибка.

состав.

(43)  BH^+ , NH , AlH C.A. 1988, 109, N24

СН

30913

1988

4 Б1034. Исследование потенциальных кривых малых радикалов методом МКССП. MC SCF study of potential curves of small radicals / Biskupič S., Klein R. // J. Mol. Struct. Theo — Chem. — 1988. — 170. — С. 27—31. — Англ.

Рассчитаны потенциальные кривые основных электронных состояний ряда нейтр. и положительно заряженных молекул (СН, ВН⁺, NH и АН⁺, состояния ¹Π, ²Σ⁺, ²Σ⁻ и ²Σ⁺ соотв.). Расчет проведен многоконфигурац. методом ССП (МКССП) в двухэкспонентном базисе сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненном поляризац. ф-циями. Полученные точки аппроксимированы комбинированными полиномиально-экспоненциальными аналитич. выражениями. Определены спектроскопич. постоянные, к-рые удовлетворительно согласуются с эксперим. данными и с результатами предшествовавших расчетов.

А. А. Сафонов

М.П.

X
(+3)

X. 1989, N 4

СМ

30913

1988

2 Д42. Исследование потенциальных кривых небольших радикалов методом МК ССП. MC SCF study of potential curves of small radicals / Biskupič Stanislav, Klein Rudolf // J. Mol. Struct. Theochem.— 1988.— 170.— С. 27—31.— Англ.

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля (МК ССП) рассчитаны потенц. кривые основных электронных состояний радикалов и ионов CH, NH, BH⁺ и AlH⁺. Использован стандартный двухэкспонентный набор сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненный поляризационными орбиталями. Размерность пространства конфигураций составляла 12 для CH(¹Π), BH(²Σ⁺), AH(²Σ⁺) и 16 для NH(³Σ⁻). Полученные точки на потенциальных кривых аппроксимировались разложениями по степеням $\xi = (R - R_e)/R$ методом наименьших квадратов. Сравнение рассчитанных спектроскопич. параметров с экспериментальными указывает, что использованные сравнительно небольшие размерности пространств АО и конфигураций позволяют получать достаточно точные с практич. точки зрения результаты.

А. И. Дементьев

М.А.

(43) ~~2~~

ср. 1989, № 2

CH

(Olm 31383)

1988

110: 45260r The hyperfine coupling constants of the five lowest states of methylidyne: an ab initio MRD-CI study. Engels, B.; Peyerimhoff, S. D.; Karna, S. P.; Grein, F. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 152(4-5), 397-401 (Eng). The isotropic (α_{iso}) and the anisotropic (α_{aniso}) hyperfine coupling consts. of the 5 lowest states of the CH mol., $X^2\Pi$, $a^4\Sigma^-$, $A^2\Delta$, $B^2\Sigma^-$ and $C^2\Sigma^+$ have been calcd. The agreement with exptl. data is excellent for α_{aniso} and within $\sim 8\%$ for α_{iso} . Differences in the values for the various states are discussed at the RHF and CI levels. For $X^2\Pi$ and $A^2\Delta$, the effects of the doubly occupied shells are studied. It turns out that in these states the contributions of the 1σ and 2σ shells to α_{iso} are opposite in sign.

сверхтонкие
расщепления
в 5-ми
низших
состояниях

С.А. 1989, 110, N 6

СН

[от 31383]

1988

7 Б1020. Константы сверхтонкого взаимодействия для пяти низших состояний СН; неэмпирический расчет методом КВ НИК. The hyperfine coupling constants of the five lowest states of CH: an ab initio MRDCI study / Engels B., Peyerimhoff S. D., Karina S. P., Grein F. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 152, № 4—5.— С. 397—401.— Англ.

М.Н.
Рассчитаны изотропные и анизотропные константы сверхтонкого взаимодействия (КСВ) для пяти низших электронных состояний ($X^2\Pi$, $a^4\Sigma^-$, $A^2\Delta$, $B^2\Sigma^-$ и $C^2\Sigma^+$) молекулы СН. Волновые ф-ции получены методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям (КВ НИК). Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций $(13s8p2d1f)/8s5p2d1f$ на С и $(8s2p)/5s2p$ на Н. Все расчеты проведены при эксперим. равновесном расстоянии соотв. состояния. КСВ, полученные методом КВ НИК и ограниченным

X.1989, № 7

методом ССП, сопоставлены с имеющимися эксперим. данными. Отмечена малая величина корреляц. поправки для всех состояний. Рассчитанные значения анизотропной КСВ очень хорошо согласуются с эксперим. данными; для изотропной КСВ отклонение составило около 8%. Проанализированы орбитальные вклады в КСВ.

А. А. Сафонов

СМ

1988

11 Л435. Вращательные эффекты в тушении электронно-возбужденных радикалов CH . Rotational effects on the quenching of electronically excited CH . Montzopoulos E., Vlahoyannis Y. P., Fotakis C. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 147, № 4, 321—325 (англ.)

Исследовано затухание флуоресценции электронно-возбужденных радикалов CH (A), образующихся при многофотонной диссоциации ацетона под действием излучения 248 нм. Проанализирована зависимость электронного тушения CH ($A^2\Delta$) молекулами ацетона от вращательного квантового числа N' . Установлено, что с ростом N' эффективность электронного тушения падает. Такое поведение согласуется с наблюдавшимся экспериментально для OH^* и NH^* и с результатами теоретич. предсказаний. Библ. 20. В. С. Иванов

М-П.

ф. 1988, N 11.

CH

(OM 31363)

1988

Laaksonen L.,
Müller-Plathe F., et al.,

(X²Tr)

Chem. Phys. 1988, 89, n8,
4903-4908.

CH

Ст. 29234

1988

1 Л278. Лазерная спектроскопия с частотной модуляцией поглощения $\text{CH}(X^2\Pi \rightarrow A^2\Delta)$. Frequency-modulated laser absorption spectroscopy of $\text{CH}(X^2\Pi \rightarrow A^2\Delta)$. Lynds Lahmer, Woody Bernard A. // Appl. Opt.— 1988.— 27, № 7.— С. 1225—1227.— Англ.

Продemonстрирована чувствительность лазерной спектроскопии с частотной модуляцией в области длин волн, меньших 500 нм, с применением ADP электрооптич. модулятора на исследовании переходов CH около 431 нм. Приведена производная спектра поглощения $^{12}\text{CH}(X^2\Pi, V''=0 \rightarrow A^2\Delta, V'=0)$ в области R_{15} перехода с разрешением $0,0002 \text{ см}^{-1}$. Определено положение центра линии $23\,356,71 \text{ см}^{-1}$, восстановлена ширина доплеровского контура $3,25 \text{ ГГц}$, или $550 \pm 30 \text{ К}$. Оценка чувствительности по эксперим. отношению сигнал/шум дает величину 9×10^{-5} . Используемая методика позволяет по сравнению с традиционной увеличить чувствительность примерно в 3000 раз. И. Г.

М.А.

ф. 1989, № 1

CH

(Dm. 29237)

1988

108: 212923b Frequency-modulated laser absorption spectroscopy of methylidyne ($X^2\Pi \rightarrow A^2\Delta$). Lynds, Lahmer; Woody, Bernard A. (United Technol. Res. Cent., East Hartford, CT 06108 USA). *Appl. Opt.* 1988, 27(7), 1225-7 (Eng). The sensitivity of frequency-modulated laser adsorption spectroscopy was extended below 600 nm using an $NH_4H_2PO_4$ electro-optic modulator. The spectrum of $CH(X^2\Pi, v' = 0 \rightarrow A^2\Delta, v' = 0)$ radical was measured at 431 nm with estd. relative sensitivity enhancement, vs. traditional technique, of 3×10^3 . With improved electrooptic modulator efficiencies equiv. to $LiTaO_3$, an improvement factor of 3×10^5 should be attainable.

($X^2\Pi \rightarrow A^2\Delta$)

C.A. 1988, 108, N 24

CH

1988

7. 9 Л154. Спектроскопическое наблюдение радикала CH в состоянии $a^4\Sigma^-$. The spectroscopic observation of the CH radical in its $a^4\Sigma^-$ state. Nelis T., Brown J. M., Evenson K. M. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 3, 2087—2088 (англ.)

Методом лазерного магн. резонанса получен со сверхвысоким разрешением спектр радикала CH, состоящий из чисто вращательных переходов в далекой ИК-области. Радикалы CH получали в проточной разрядной системе реакцией атомов F с CH₄ или атомов O с C₂H₂. Из анализа вращательной структуры вычислены постоянные тонкой и сверхтонкой структуры радикала CH в состоянии $a^4\Sigma^-$, которые хорошо согласуются с данными теоретич. расчетов. Е. Н. Т.

М.Н.

ср. 1988, 18, № 9

СН

1988

7 15 Б1307. Спектроскопическое наблюдение радикала СН в состоянии $a^4\Sigma^-$. The spectroscopic observation of the CH radical in its $a^4\Sigma^-$ state. Neils Th., Brown J. M., Evenson K. M. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 3, 2074—2088 (англ.)

М.П.

Сообщается о наблюдении радикала СН в состоянии $a^4\Sigma^-$ в спектре лазерного магн. резонанса. Предв. параметры этого состояния найдены равными (в МГц): $B=451138,78$ (70); $\lambda=2783,99$ (80); $b_F=106,6$ (18); $D=44,53$ (10); $\gamma=-21,8$ (62); $c=62,3$ (69).

М.Ч.

Б. В. Рассадин

Х. 1988, 19, N 15

CH

1988

(Om. 29418)

109: 15321u The spectroscopic observation of the methyldidyne radical in its $a^4\Sigma^-$ state. Nelis, Thomas; Brown, John M.; Evenson, Kenneth M. (Phys. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(3), 2037-8 (Eng). The far-IR laser magnetic resonance spectra are given for CH in its $a^4\Sigma^-$ state. Sixty-seven lines in the spectrum were fitted with an effective Hamiltonian for the $a^4\Sigma^-$ state.

($a^4\Sigma^-$)

C. A. 1988, 109, N2.

СМ

1988

Петуховский С. А.,
Шуркун А. А. и др.

Иркутск. гос. пед. им-т.

Иркутск. 1988. 21 с.: ил. Биб-

лиогр.: 15 назв. Рус. Дек. 6

ЛитНИИТИ 09.12.88, № 2254-
ЛН88.

(сер. ЛиН; III)

М. П.

CH

1988

109: 179589t Time-resolved methylidyne ($A^2\Delta$ and $B^2\Sigma^-$) laser-induced fluorescence in low pressure hydrocarbon flames. Rensberger, Karen J.; Dyer, Mark J.; Copeland, Richard A. (Mol. Phys. Dep., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *Appl. Opt.* 1988, 27(17), 3679-89 (Eng). Total collisional removal rate consts. for the CH $A^2\Delta$ and $B^2\Sigma^-$ electronic states were obtained in low pressure (<20 torr) hydrocarbon flames. The B state is consistently removed ~70% faster than the A state. Variations of $\pm 50\%$ were obsd. for different rotational levels and positions in the flame. For these flames, A state emission following excitation of the B state indicated a rapid electronic-to-electronic energy transfer pathway that is insensitive to collision environment. Upper limits to the collider specific cross sections were obtained for H_2O , N_2 , and CO_2 . The CH concn. and temp. profiles were measured and parametrized using a unique method.

($A^2\Delta$, $B^2\Sigma^-$)

C.A. 1988, 109, N20

1988

2e. (C-H)

109: 99159n Comment on "Accuracy of ab initio carbon-hydrogen (C-H) bond length differences and their correlation with isolated C-H stretching frequencies". Schafer, Lothar; Siam, Khamis (Dep. Chem. Biochem., Univ. Arkansas, Fayetteville, AR 72701 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(11), 7255-6 (Eng). A polemic statements made by R. G. Synder et al. (*ibid*, 1984, 81, 5352 and 1986, 84, 6872) regarding the title subject are in error.

(neop. facit)

C.A. 1988, 109, N12.

CH

1988

109: 156405r Molecular properties by ab initio quasidegenerate many-body perturbation theory effective Hamiltonian method. dipole and transition moments of methylidyne and methylenemylidene (CH and CH^+). Sun, Hosung; Freed, Karl F. (James Franck Inst., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(4), 2659-65 (Eng). The ab-initio, effective-valence-state-Hamiltonian method, based on quasi-degenerate MBPT, was generalized to calc. mol. properties and valence-state energies, which have previously been detd. for atoms and small mols. The approach is applicable to both expectation values and transition moments of any mol. property within and between the valence states, resp. The procedure requires the evaluation of effective operators for each mol. property. Effective operators are perturbatively expanded in powers of correlation, and contain contributions from excitations outside of the large multireference valence space. Expectation values and transition moments are the diagonal and off-diagonal matrix elements, resp., of the effective property operators between the eigenfunctions of the correlated effective Hamiltonian. Calcns. for dipole moments of, and transition moments between several low lying states of CH and CH^+ to first order in the correlation corrections were compared with large CI calcns. to show that the present methods provide a useful ab-initio formalism for dipole moments.

molecul.

param

generaliz. moments

(H) 18

C.A. 1988, 109, N18. CH

CH

1988

18 Б1036. Расчет молекулярных свойств неэмпирическим методом эффективного гамильтониана в квазивырожденной многочастичной теории возмущений. Дипольные моменты и моменты перехода молекул CH и CH⁺. Molecular properties by *ab initio* quasidegenerate many-body perturbation theory effective Hamiltonian method: Dipole and transition moments of CH and CH⁺. Sun H., Freed K. F. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2659—2665 (англ.)

Рассмотрена задача расчета св-в молекул в рамках теории возмущений для квазивырожденного уровня. Показано, что в методе эффективных валентных гамильтонианов расчет матричных элементов одночастичных операторов требует модификации формы оператора в выделенном модельном пространстве. Приведены ф-лы, описывающие соотв. многочастичные составляющие эффективных операторов. Предложенный подход

M.A.

(H) X

X-1988, 19, N 18

CH⁺

применен для неэмпирич. расчета дипольных моментов, моментов и энергий переходов молекул CN и CN^+ при фиксированных межъядерных расстояниях для ряда низколежащих электронных состояний. Сопоставлены результаты применения различных неэмпирич. методик.

В. И. Пупышев



CH

1988

8 Д97. Определение молекулярных свойств с помощью неэмпирического метода эффективного гамильтониана, основывающегося на квазивыврожденной многочастичной теории возмущений: дипольные моменты и моменты перехода для CH и CH⁺. Molecular properties by ab initio quasidegenerate many-body perturbation theory effective Hamiltonian method. Dipole and transition moments of CH and CH⁺. Sun Hosung, Freed Karl F. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2659—2665 (англ.)

М и
моменты
перехода

• Метод эффективного гамильтониана (МЭГ), основывающийся на квазивыврожденной многочастичной теории возмущений, обобщен на случай расчетов молекулярных свойств (МС). Для этого в рассмотрение введены эффективные операторы молекулярных свойств (ЭОМС). Математич. ожидания и моменты переходов для МС являются соответственно диагональными и недиагональными матричными элементами ЭОМС между собств.

(11) 

сб. 1988, 18, № 8

CH⁺

ф-циями эффективного гамильтониана. С использованием развитого подхода выполнены расчеты дипольных моментов и дипольных моментов перехода для CH и CH^+ . Отмечено, что полученные результаты сравнимы по точности с результатами, получаемыми с использованием конфигурац. взаимодействия (КВ) большой размерности. При этом с вычислительной точки зрения МЭГ является значительно более экономным методом по сравнению с КВ. А. И. К.

1988

CH
 15 B1272. Детектирование методом многофотонной ионизации CH, атомов углерода и O₂ в предварительно смешанных углеводородных пламенах. Multiphoton ionization detection of CH, carbon atoms, and O₂ in premixed hydrocarbon flames. Tjossem P. J. H., Smyth K. C. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 144, № 1, 51—57 (англ.)

М.П.
 В области 280—315 нм измерены спектры многофотонной (2+1) ионизации (МФИ) молекул CH, O₂ и атомов углерода в пламенах CH₄—воздух и C₂H₄—воздух при атмосферном давлении. В кач-ве источника при двухфотонном возбуждении использовался импульсный перестраиваемый лазер на красителе с удвоением частоты излучения. Идентифицированы двухфотонные переходы $D^2\Pi_i \leftarrow X^2\Pi_r$ (полоса 2—0, 312 нм) и $E'^2\Sigma \leftarrow X^2\Pi_r$ (290 нм) молекулы CH, переход $(3\sigma) ^3\Pi_g \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ (285—288 нм) молекулы O₂ и переходы $^3D_J \leftarrow ^3P_J$ (обл. 287 нм) и $S_0 \leftarrow ^1D_2$ (313 нм) атомов уг-

(42) X. 1988, 19, N 15

O₂, C

лерода. Наблюдались также однофотонные ($\bar{I}+1$) переходы $C^2\Sigma^+ - X^2\Pi, CH$ (полосы $0-0$ и $1-0$). Отмечено необычное распределение интенсивности во вращат. структуре полос CH . Показано, что оно не связано с неравновесной заселенностью вращат. уровней основного состояния, а является следствием почти резонансного вырождения линий Q -ветви спектра МФИ и линий R -ветви перехода в промежут. состояние $C^2\Sigma^+$. Сильная зависимость от т-ры и состава исходной газовой смеси сигнала МФИ в случае O_2 указывает на эффективное тушение возбужденного ридберговского состояния $(3s\sigma) \ ^3\Pi_x$ молекулы.

В. М. Ковба



СН

1989

11 Л340. Новые измерения изотопического по ^{13}C сдвига линий 0—0-полосы в системе СН ($A \leftarrow X$). New measurements of ^{13}C isotopic line shifts for the 0—0 band of the СН ($A \leftarrow X$) system / Anderson S., M., McCurdy K. E. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 157, № 6.— С. 531—534.— Англ.

С помощью перестраиваемого лазера на красителях с высоким разрешением исследованы спектры возбуждения люминесценции радикалов СН в области 0—0-полосы системы ($A \leftarrow X$) (433 нм). Для четырех наиболее интенсивных вращательных переходов P - и R -ветвей наблюдалась структура, связанная с наличием изотопа ^{13}C . Наблюдаемые величины изотопич. сдвига хорошо согласуются с результатами расчета. К. Э. М.

М.П.

ф. 1989, № 11

СМ

1989

№ 20 Б1170. Новые измерения ^{13}C -изотопического сдвига линий для полосы 0—0 системы (A—X) CH. New measurements of ^{13}C isotopic line shifts for the 0—0 band of the CH(A←X) system / Anderson S. M., McCurdy K. E. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 157, № 6. — С. 531—534.— Англ.

Методом индуцированной лазерным излучением Фл при использовании лазера на красителе ($\lambda=429$ нм) с ширинами линий около 0,002 нм ($0,11 \text{ см}^{-1}$) измерены сдвиги линий переходов от $P(8)$ вплоть до $R(7)$ полосы 0—0 системы (A—X) радикала ^{13}CH , вызванные изотопич. замещением $^{13}\text{C} \rightarrow ^{12}\text{C}$. Анализ изотопич. сдвига линий выполнен с учетом вращат., колебат. и электронного вкладов. Полученные данные хорошо согласуются с результатами неэмпирич. расчета и эксперим. результатами, полученными методом микроволнового оптич. двойного резонанса. Объяснение расхождения результатов неэмпирич. расчета с эксперим. данными Рихтера и Тоннера (Richter J. R., Tonner K.-F. // Z. Astrophys.— 1967.— 67.— С. 155) в обл. R-ветви со значениями N от 6 до 16 требует новых измерений для высоких вращат. состояний.

С. Н. Мурзин

М.Н.

Х. 1989, № 20

CH

1989

111: 67084j New measurements of carbon-13 isotopic line shifts for the 0-0 band of the methylidyne ($\text{CH}(A \leftarrow X)$) system. Anderson, S. M.; McCurdy, K. E. (Aerodyne Res., Inc., Billerica, MA 01821 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 157(6), 531-4 (Eng). Laser-excited fluorescence measurements are reported of isotopic line shifts for the 4 strongest rotational transitions in each of the *P* and *R* branches of the $\text{CH}(A \leftarrow X)$ system. These observations were compared with early measurements for transitions further out in the *R* branch, with a recent measurement assoc. with MODR spectroscopy, and with calcns. cor. for the Born-Oppenheimer approxn. The calcn. fits the recent exptl. data quite well, providing a coherent picture of line shifts arising from isotopic labeling. The early measurements appear to be inconsistent with this picture.

дальновост.
физичес.

C.A. 1989, 111, N 8

CH

1989

Baker J.

J. Chem. Phys. 1989, 91,
N3. 1789-1795.

u.n.

(c.w. ● BeH; III)

CH

(DM-32184) 1989

Bauer W., Engelhardt B.
et al.,

τ

$A^2\Delta, v=0$

состоян.

Chem. Phys. Lett., 1989,
158, n 3-4, 321-324.

CH

1989

112: 84600n Calculation of spin densities in diatomic first-row hydrides. Chipman, Daniel M. (Radiat. Lab., Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN 46556 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(9), 5455-65 (Eng). Fermi contact spin densities have been theor. detd. for the ground-state diat. first-row hydrides CH, OII, and NH having open shell π electrons. Multiconfiguration self-consistent-field wave functions include the dominant configuration and single excitation from it describing the most important spin and orbital polarization effects. Optimization of the orbitals by precise numerical grid methods shows that this simple wave function model is capable of providing spin densities in satisfactory agreement with expt. Gaussian basis sets suitable for use with this wave function model are detd. by comparing to the precise numerical spin d. results. Huzinaga's popular (9s5p|1s) primitive Gaussian basis provides a good starting point if augmented with diffuse and polarization functions and with a tight (high exponent) s function at hydrogen. Only the innermost few primitive functions may be contracted. Contraction coeffs. may be detd. on the basis of free atom Hartree-Fock calcs. These studies lead to economical contracted Gaussian basis sets that should be useful for spin d. calcs. on larger polyat. radicals.

расчет спи-
новой плот-
ности

72

С.А. 1990, 112, N 10

CM

[OM. 33751]

1989

Dear A.J., Hanson R.K.,

J. Quant. Spectrosc.
Radiat. Transfer 1989,
42, N 5, 375-384

Development of a laser
absorption diagnostic for

Shock tube studies of CH

CH

1989

Ebber M., Dijk R. et al.

12th Int. Symp. on Mol.

Beams, Perugia, May

Chernop 29-June 2, 1989: Abst.

pap. Perugia, [1989]. C.

266-268. (see. SiH; III)

CH

(OM 32781)

1989

Frank A. Lemus R., et al.,

Спектры,
электрон.,
колебат.
и вращат.
уровни
энергии
разреш.

J. Chem. Phys. 1989, 91,
N1, 29-41.

Algebraic approach to mo-
lecular electronic spect-
ra I ● Energy levels.

CH (27)

(OM. 31870)

1989

CH (45-)

Martin J. M. L., Francois

J. P. et al.,

Do,
ab initio
pacrem

J. Comput. Chem., 1989,
10, N 2, 152-162.



CH

OM 32601

1989

4 B1211. Новый анализ колебательно-вращательного спектра CH из спектров солнца. A new analysis of the vibration-rotation spectrum of CH from solar spectra / Mélen F., Grevesse N., Sauval A. J., Farmer C. B., Norton R. H., Bredohl H., Dubois I. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 134, № 2.— С. 305—313.— Англ.

Во время первой миссии космич. лаборатории Скай-лэб-3 (30.IV—5.V. 1985) на интерферометре Майкельсона впервые получен чистый солнечный спектр в диапазоне 2—16 мкм ($600\text{--}4700\text{ см}^{-1}$) с разрешением $0,01\text{ см}^{-1}$. Для молекулы CH проведено отождествление линий полос 1—0, 2—1 до $I=34,5$; 3—2 до $I=31,5$ и еще не наблюдаемой раньше полосы 4—3 до $I=24,5$ с полушириной около $0,055\text{ см}^{-1}$. Вращат. анализ положения 558 линий дал возможность уточнить молек. постоянные для основного $X^2\Pi$ ($v=0\text{--}4$) с состояния молекулы CH.

Н. В. Кулакова

M. N.

X. 1990, N 4

CH

Om 32601)

1989

110: 182245d A new analysis of the vibration-rotation spectrum of methylidyne from solar spectra. Melen, F.; Grevesse, N.; Sauval, A. J.; Farmer, C. B.; Norton, R. H.; Bredohl, H.; Dubois, I. (Inst. Astrophys., Univ. Liege, B-4200 Liege, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 134(2), 305-13 (Eng). In the solar spectrum, CH vibration-rotation lines are excited to higher vibrational and much higher rotational quantum nos. than in any lab. source. A large no. of new lines (1-0 and 2-1, $J \leq 34.5$; 3-2, $J \leq 31.5$; and 4-3, never seen before, $J \leq 24.5$) were obsd. on solar spectra obtained from space, with the ATMOS-SL3 instrument. The 55S lines were used to derive new accurate mol. consts. for the X²Π ground state of CH.

X²Π, Kette
M.N.

C.A. 1989, 110, N 20

CH

1989

Müller-Plathe Florian,
Diercksen Geerd H.F. et al.

Numer. Determin. Electron.

Struct. Atoms, Diatom. and

ser. n. Polyatom. Mol.; Proc, NATO
Adv. Res. Workshop Versailles,
17-22 Apr., ● 1988, Dordrecht

etc., 1989. c. 311-315.

(car. Bell; III)

CH

1989

9 Б1232. Постоянный электрический дипольный момент CH в его $A^2\Delta$ состоянии. The permanent electric dipole moment of CH in its $A^2\Delta$ state / Steimle T. C., Nachman D. F., Fletcher D. A., Brown J. M. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 1.— С. 222—229.— Англ.

Методом взаимной модуляции в спектре Фл измерен эффект Штарка для линии Q_{2e} (2) полосы (0, 0) перехода $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ радикала CH вблизи $23180, 7045 \text{ см}^{-1}$ с субдоплеровским разрешением. Впервые эксперим. определен постоянный электр. дипольный момент радикала CH в состоянии $A^2\Delta$ $\mu = 0,77(7) D$, к-рый удовлетворительно согласуется с результатами теорет. расчетов $\mu = 0,932 D$ (/ Lie G. C. et al. // J. Chem. Phys.— 1974.— 59.— С. 1887) и $\mu = 1,04 D$ (/ Sun H., Freed K. F. // J. Chem. Phys.— 1988.— 88.— С. 2659). Расхождение между эксперим. и расчетными величинами дипольного момента м. б. вызвано сильной зависимостью $\mu(A^2\Delta)$ от межъядерного расстояния и из-за взаимодействия состояния $A^2\Delta$ с состоянием $B^2\Sigma^-$.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1990, № 9

CH

1989

10 Б1009. Расчеты радиационного времени жизни $A^2\Delta$ -состояния молекулы CH методом конфигурационного взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями (КВ НИК). MRD CI calculations on the radiative lifetime of the $A^2\Delta$ state of CH / Theodorakopoulos G., Petsalakis I. D., Buenker R. J., Honigmann M. // Chem. Phys.— 1989.— 137, № 1—3.— С. 137—141.— Англ.

Методом КВ НИК 1+2 проведен расчет матричного элемента электр. дипольного момента перехода $A^2\Delta \rightarrow X$ и соотв. времени жизни τ ($v'=0$) молекулы CH в различных базисах МО, полученных методом ССП для состояний $^4\Sigma^-$ и $^2\Sigma^+$ молекулы CH, $^1\Sigma^+$ и $^1\Pi$ иона CH^+ и $^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$ иона CH^{2+} . Все расчеты проведены при расстоянии $R=2,10$ а. е., примерно равном равновесному. Самые близкие к наиболее достоверным эксперим. значения величины получены с базисами МО состояний $^1\Pi$ и $^2\Pi$, соотв. ионов. В целом вариация в результатах для матричного элемента составила $\sim 10\%$ и в этих пределах трудно оценить, какое теорет. значение лучше без сопоставления с эксперим.

M. A.

(42)

X, 1990, N 10.

величиной. Раднац. время жизни $A^2\Delta$ -состояния полу-
чено в пределах 448—544 нс.

Н. Ф. Степанов

дстер
ов,
он

CH

1990

Baeck K.R.; Lee Yoon Sup.

et. n.

J. Chem. Phys. 1990. 93,
N 8. C. 5775-5782.

(Cor. ● BH^+ ; III)

CH

[Om. 33179]

1990

Bentzen Z., Kapa R.,
et al.,

J. Mol. Spectrosc.
1990, 139, N 1, 1-10.

Reinvestigati ● ons of the
A²Σ - X²Π band system

in the CH Radical.

CH

1990

Ebben M., Meijer G.,
et al.

срхмп

Appl. Phys. B 1990,
B50 (1), 35-8.

(see. CH; III)

CH

[Dm. 34 604]

1990

cremp

Khersonskii V.K.,
Val'tts I.E.,

Astrophys. and Space
Sci., 1990, 172, N1, 15-19

CH

1990

113: 220531r Evaluation of the temperatures of rotation and vibration from the emission spectra $A^2\Delta-X^2\Pi$ of the methylidyne radical. Koulidiati, J.; Czernichowski, A.; Beulens, J. J.; Schram, D. C. (Groupe Rech. Energ. Milieux Ionis., Univ. Orleans, 45067 Orleans, Fr.). *Colloq. Phys.* 1990, (C5, Eur. Congr. Therm. Plasma Processes Mater. Behav. High Temp., 1990), C5-297/C5-303 (Fr). An emission spectrum of CH radical at 430 nm composed of three vibrational (0,0), (1,1), and (2,2) bands of the $A^2\Delta - X^2\Pi$ transition is studied in order to diagnose the high temp. media contg. hydrocarbons. The spectrum is simulated for the different vibrational and rotational temps. ranging from 2000 to 8000 K and compared to the spectrum recorded from an argon-methane plasma.

$A^2\Delta - X^2\Pi$

M.A.

C.A. 1990, 113, N24

CH

[OM 34507]

1990

McKay V., Braunstein M.,
et al.

J. Electron Spectrosc. and
Relat. Phenom. 1990, 52,
Spec. Issue. 597-612.

Photoelectron Spectroscopy of

Excited Molecular States.

СН

1990

19 B1177. Повторное исследование полос системы $A^2\Delta-X^2\Pi$ радикала СН. Reinvestigations of the $A^2\Delta-X^2\Pi$ band system in the CH radical / Bembenek Z., Kera R., Para A., Rytel M., Zachwieja M., Janjić J. D., Marx E. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 139, № 1.— С. 1—10.— Англ.

На дифракционном спектрометре в области частот $23\,030-23\,880\text{ см}^{-1}$ с теор. разрешением $270\,000$ и точностью $0,005-0,010\text{ см}^{-1}$ измерен колебательно-вращат. спектр полос $0-0$, $1-1$, $2-2$ системы $A^2\Delta-X^2\Pi$ радикала СН. Анализ спектра выполнен с использованием гамильтониана Брауна (/ Brown J. M. et al. // J. Mol. Spectrosc.— 1979.— 74.— С. 294) с 10 параметрами для состояния $^2\Delta$ и 16 параметрами для состояния $^2\Pi$. На основе полученных спектроскопич. данных определены вращат. и колебат. параметры в состояниях $A^2\Delta$ и $X^2\Pi$ с равновесным положением полосы $T_e=23150,454(44)\text{ см}^{-1}$. Равновесные параметры использованы для определения вида ПТ и факторов Франка—Кондона $A-X$ системы. С. Н. Мурзин

М.Н.

х. 1990, № 19

CH

Om. 34578

1990

Kraussam. Nelis T., Brown J.M.,
Crickm. Evenson K.M.,

& a⁴²
10cm. J. Chem. Phys., 1990,
92, NF, ● 4067-4076

The rotational spectrum

of the CH radical in
its $a^4\Sigma^-$ state, studied
by far-infrared laser
magnetic resonance.

CH

[acc. 34574]

1990

Reddy R.R., Reddy A.S.R.,
Viswanath R.

M.N.,
Suzuka

J. Quant. Spectrosc.
and Radiat. Transfer,
1990, 43, ● N 4, 347-349.

CH

1991

114: 174147r Spectroscopy of the methyldyne (CH) free radical. Bernath, P. F.; Brazier, C. R.; Olsen, T.; Hailey, R.; Fernando, W. T. M. L.; Woods, Christine; Hardwick, J. L. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 147(1), 16-26. (Eng). Emission of the $A^2\Delta-X^2\Pi$ and $B^2\Sigma-X^2\Pi$ electronic transitions of the CH free radical were recorded. The $A^2\Delta-X^2\Pi$ and $B^2\Sigma-X^2\Pi$ data were obtained with a Fourier transform spectrometer and addnl. measurements of the $A^2\Delta-X^2\Pi$ transition were made with a spectrograph. These line positions were combined with the previous IR vibration-rotation measurements in a simultaneous fit to detn. the mol. parameters for the $X^2\Pi$, $A^2\Delta$, and $B^2\Sigma$ states.

$X^2\Pi$, $A^2\Delta$,
 $B^2\Sigma$ - Fran-
 con. norm;
 Vi

C.A. 1991, 114, n18

CH

1991

/ 115: 265738w Spectroscopy of the methylidyne (CH) free radical [Erratum to document c.ited in CA114(18):174147r]. Bernath, P. F.; Brazier, C. R.; Olsen, T.; Hailey, R.; Fernando, W. T. M. L.; Woods, Christine; Hardwick, J. L. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 149(2), 563 (Eng). Errors in Table V have been cor. The errors were not reflected in the abstr. or the index entries.

Erratum

C.A. 1991, 115, N 24

CH

Qm 35346)

1991

Bharate N. S., Behere S. H.,
et al.,

dr. n. Nuovo Cim. D. 1991, 13, N1,
15-20.

Estimation of Rotational and
Vibrational Constants for

Diatomic Molecules Using
Mattera's Potential Function.

СН

1991

1 14 Б1071. Теоретическое исследование нейтральных и анионных галокарбинов и галокарбенов. Theoretical study on neutral and anionic halocarbynes and halocarbenes / Gutsev G. L., Ziegler T. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 19.— С. 7220—7228.— Англ.

Методом функционала плотности (ФП) в приближении локальной плотности с учетом нелокальных поправок рассчитаны геометрии и электронное строение CX , CFCI и CX_2 ($\text{X}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) и соотв-щих анионов. Результаты расчетов хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными. Все рассмотренные анионы устойчивы по отношению к отрыву электрона, а также к фрагментации. Показано, что включение нелокальной поправки в ФП необходимо для корректной оценки сродства к электрону. Библ. 89. В. И. Фаустов

геометрии,
электрон-
строение

410 K7

Х. 1992, № 14

CH

1991

2 Д148. Теоретическое исследование нейтральных и анионных галогенкарбинов и галогенкарбенов. Theoretical study on neutral and anionic halocarbynes and halocarbenes / Gutsev G. L., Ziegler T. // J. Phys. Chem. — 1991.— 95, № 19.— С. 7220—7228.— Англ.

Методом функционала плотности в приближении локальной плотности с поправкой на нелокальный обмен исследовано электронное строение CX , CX_2 ($X=H, F, Cl, Br$) и $CFCl$. Приведены вертикальное и адиабатич. сродство к электрону и первые потенциалы ионизации соответствующих анионов. Использован трехэкспо-

Электрон-
строение

Д (48)

$CH_2, CF, CF_2, CCl, CCl_2, CBr,$

ср. 1992, № 2

$CBr_2,$

$CFCl$

нентный базис несгруппированных ф-ций слэтеровского типа. Показано, что все анионы, кроме CF^- , CH_2^- и CF_2^- , обладают двумя связанными состояниями, стабильными по отношению к фрагментации и отщеплению электрона. Обсуждена равновесная геометрия. Рассчитанные синглет-триплетные расщепления согласуются с эксперим. данными и данными полных неэмпирич. расчетов с точностью около 1 ккал/моль. Отмечено, что для хорошей оценки сродства к электрону необходим учет корреляции и нелокальных поправок.

1991

CH⁻

Marudarajan Vijaya,
Scheiner Steve.

M.R.

Chem. Phys. Lett. 1991:
186, N4-5. C. 356-362.

(see.  HCN ; III)

CH

DM 36477

1991

20 B1113. Анализ полосы $B^2\Sigma^- - X^2\pi$ (0—0) в изотопозамещенных радикалах $^{12}C^1H$, $^{12}C^2H$ и $^{13}C^1H$. Analysis of the $B^2\Sigma^- - X^2\pi$ (0—0) band in the $^{12}C^1H$, $^{12}C^2H$ and $^{13}C^1H$ isotopic radicals /Para A. //J. Phys. B .—1991 .—24 ,№ 14 .—С. 3179—3185 .—Англ.

Сфотографирована и проанализирована вращат. структура полосы 0—0 перехода $B^2\Sigma^- - X^2\pi$ в спектрах испускания изотопозамещенных радикалов ($^{12}C^1H$), $^{12}C^2H$ и $^{13}C^1H$, возбуждаемых в высоковольтном разряде источника переменного тока гейслеровского типа, содержащем смесь гелия и метана или гелия и ацетилена. Приведено положение и отнесение линий вращат. структуры всех изотопомеров. При анализе использовался эффективный гамильтониан Брауна. Рассчитанные значения молек. постоянных A_0 , B_0 , D_0 ($\cdot 10^3$), H_0 ($\cdot 10^7$), γ_0 ($\cdot 10^2$), ρ_0 ($\cdot 10^2$), q_0 ($\cdot 10^2$) и qD_0 ($\cdot 10^5$) для состояния $X^2\pi$ ($v=0$) равны соотв. (в cm^{-1}): $^{12}C^1H$ 28,1222; 14,19229; 1,4624;

M.A.

X. 1992, N 20

1,15; —2,56; 3,275; 3,8855; —1,69; $^{12}\text{C}^2\text{H}$ — 28,067;
 7,70194; 4,302; 0,247; —1,18; 1,754; 1,1386; —0,264;
 $^{13}\text{C}^1\text{H}$ — 28,1107; 14,10809; 1,4430; 1,11; —2,43; 3,356;
 3,8421; —1,79. Значения молек. постоянных B_0 , D_0 ($\cdot 10^4$),
 H_0 ($\cdot 10^8$) и γ_0 ($\cdot 10^2$) для состояния $B^2\Sigma^-$ ($v=0$) равны
 соотв. (в см^{-1}): $^{12}\text{C}^1\text{H}$ — 12,64089; 21,454; —33,9; —2,77;
 $^{12}\text{C}^2\text{H}$ — 6,90230; 6,013; —4,10; —1,22; $^{13}\text{C}^1\text{H}$ — 12,56643;
 21,096; —38,0; —2,62. Положения начал полос (в см^{-1})
 для $^{12}\text{C}^1\text{H}$ — 25712,5095; для $^{12}\text{C}^2\text{H}$ — 25804,4440; для
 $^{13}\text{C}^1\text{H}$ — 25713,4449.

В. М. Ковба

$^{12}\text{C}^1\text{H}$

$^{12}\text{C}^2\text{H}$

$^{13}\text{C}^1\text{H}$

On 36477) 1991

115: 122832m Analysis of the $\text{B}^2\Sigma-\text{X}^2\Pi$ (0-0) band in the methylidyne isotopomers ($^{12}\text{C}^1\text{H}$, $^{12}\text{C}^2\text{H}$, and $^{13}\text{C}^1\text{H}$). Para, A. (At. Mol. Phys. Lab., Pedagog. Univ., 35-310 Rzeszow, Pol.). J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 1991, 24(14), 3179-85 (Eng). The emission spectra of the 0-0 band of the $\text{B}^2\Sigma-\text{X}^2\Pi$ system for $^{12}\text{C}^1\text{H}$, $^{12}\text{C}^2\text{H}$ and $^{13}\text{C}^1\text{H}$ were obtained using conventional spectroscopy and a Geissler tube. The spectrum was photographed under high resolu. and calibrated against Th lines. The redn. of the spectrum of the individual bands was performed via a non-linear least-squares fit with the effective Hamiltonian of Brown. By means of a direct fit the following consts. for the $v = 0$ levels in both electronic states were computed: for $\text{B}^2\Sigma-\text{B}_r$, D_r , H_r , γ_r ; for $\text{X}^2\Pi-\text{A}_r$, B_r , D_r , H_r , p_r , q_r , qD_r , and γ_r and $\text{T}_r^{\text{L}}-\text{T}_r^{\text{H}}$ values.

$\text{B}^2\Sigma-\text{X}^2\Pi(0-0)$

11-11

C.A. 1991, 115, N 12

СН

1992

5 Б1121. Исследования состояния $D^2\Pi(v=2)$ СН методом резонансно усиленной многофотонной $(2+1)$ -ионизации. $(2+1)$ resonance-enhanced multiphoton ionization studies of the CH $D^2\Pi(v=2)$ state /Wang Yumin, Li Leping, Chupka William A. //Chem. Phys. Lett. —1992.—192, № 4.—С. 348—352.—Англ.

Состояние $D^2\Pi(v=2)$ молекулы СН исследовано методом резонансно усиленной многофотонной $(2+1)$ -ионизации (МФИ). Радикалы СН получались при фотодиссоциации (266 нм) молекул бромформа. Наблюдаемые аномалии в интенсивностях линий спектра МФИ связываются с вкладом случайных однофотонных почти резонансных возбуждений с участием уровней промежуточного состояния $C^2\Sigma^+(v=0)$. Резкое падение интенсивности линий $P(N \geq 13)$ не может быть объяснено как типичная гетерог. преддиссоциация, а обусловлено преддиссоциацией, связанной с комплексным вз-вием трех состояний типа $^2\Pi(^2\Pi(1)=D^2\Pi, ^2\Pi(2), ^2\Pi(3))$, область энергий 60 000—70 000 см^{-1} .

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1994, №5

CH

1993

Singh H. N., Singh V. B.

Indian J. Pure Appl.

Phys. 1993, 31(5),

341-4.

de, WeXe,
оценка с
помощью
различн.
моделей.
потенц.

● (see. Litt; III)

См

1994

120: 230369c Spectroscopy of the methylidyne (CH) free radical. [Erratum to document cited in CA114(18):174147r]. Bernath, P. F.; Brazier, C. R.; Ojaen, T.; Hailey, R.; Fernando, W. T. M. L.; Woods, Christine; Hardwick, J. L. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 165(1), 301 (Eng). The errors were not reflected in the abstr. or the index entries.

(чек мр)

C. A. 1994, 120, N18

Ch

1994

Bittererová Martina,
Biskupič Stanislav et al.

Collect. Czechosl. Chem.
Lith. Commun. - 1994, 59, N 6,
C. 1241 - 1250

Pal. X. N 17, 1996, 17 5 11143

CH

(PM 37733)

1994

Boldyrev A.I., Gonzalez N.,
Simons J.,

$2/2$,
D,

J. Phys. Chem., 1994,
Жеңеумен, 98, N 40, 9981-9984
теорет-
практик

1995

F: C-H

P: 3

16Б187. Конформационный анализ n-алканов методом функционала плотности. Сравнение с неэмпирическими расчетами. Conformational analysis of n-alkanes using density functional theory. Comparison with ab initio calculations / Tsuzuki Seiji, Uchimaru Tadafumi, Tanabe Kazutoshi [Chemical Physics Letters] // Chem. Phys. Lett. - 1995. - 246, N 1 - 2. - С. 9-12. - Англ.

Методом функционала плотности с использованием функционала BLYP и базиса 6-31ГФ{*} рассчитаны относительные конформационные энергии n-бутана, n-пентана и n-гексана. Показано, что они лучше согласуются с результатами расчета на уровне МПЧ(SDQ) и эксперим. данными, чем с полученными значениями в приближении ХФ.

РЖХ 1997

1995

F: CH

P: 3

2Б1217. Новые исследования системы полос $A_2'\Delta-X_2'\Pi$ радикала CH и новое упрощение колебательно-вращательного спектра CH по сравнению со спектрами ATMOS. New investigations of the $A_2'\Delta-X_2'\Pi$ band system in the CH radical and a new reduction of the vibration-rotation spectrum of CH from the ATMOS spectra / Zachwieja M. // J. Mol. Spectrosc. - 1995. - 170, N 2. - С. 285-309. - Англ.

Р. Жс. X. N 2, 1996.

С высоким разрешением сфотографирована вращательная структура полос 0-0, 1-1, 2-2, 0-1, 1-2, 3-3 и 2-3 перехода $A\{2\}'\Delta-X\{2\}'\Pi$ в спектре испускания СН (гейслеровский разрядный источник). Результаты сопоставлены со спектрами, входящими в базу данных ATMOS. Обнаруженная корреляция между некоторыми параметрами устранена за счет использования более точных констант, полученных из анализов полосы 0-0 (12 ветвей). Приведены новые точные наборы равновесных молекулярных постоянных для обеих электронных состояний (константы 'ЛЯМБДА'-удвоения в состоянии $A\{2\}'\Delta$ получены впервые). Рассчитаны потенциальные кривые резонансного КР, r-центроиды и факторы Франка-Кондона для переходов $A(v=0-5)-X(v=0-5)$. Библи. 31.

CH

1995

122: 250908x New investigations of the $A^2\Delta-X^2\Pi$ band system in the CH radical and a new reduction of the vibration-rotation spectrum of CH from the ATMOS spectra. Zachwieja, M. (At. Mol. Phys. lab., Pedagogical Univ., 35-310 Rzeszow, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 170(2), 285-309 (Eng). Seven bands of the $\alpha^2\Delta-X^2\Pi$ system of the CH radical have been photographed in emission from a Geissler tube using conventional spectroscopic techniques. Under high resolu. and using Th lines as stds., as well as an interferometric comparator equipped with a photoelec. scanning device, the 0-0, 1-1, 2-2, 0-1, and 1-2 bands have been rephotographed and the 3-3 and 2-3 bands, with a total no. of 144 lines, have been recorded for the first time. In the previously reported (*J. Mol. Spectrosc.* 134, 305, 1989; 147, 16, 1991) evaluation of the ATMOS spectrum of CH for detg. the mol. parameters we found total interparameter correlations between some of them, due to the absence of high-J lines of the P and Q branches. With the help of the precise consts. obtained from our 0-0 band measurements (12 branches with $J_{\max} = 24.5$, $f = 181$, $\sigma = 0.0025 \text{ cm}^{-1}$) of the $A^2\Delta-X^2\Pi$ transition, we have been able to remove the correlations and obtain

 $(A^2\Delta-X^2\Pi)$

C. A. 1995, 122, 1420

more accurate mol. parameters for the $X^2\Pi$ ground state. These consts. have subsequently been used to derive new exact mol. parameters for the $A^2\Delta$, $v = 1, 2$, and 3 levels of CH. The Λ -doubling consts. in the $A^2\Delta$ state were obtained for the first time. The complex vibrational anal. has been carried out to det. the equil. mol. consts. Also, RKR potentials and r -centroids have been calcd. for both the combining states, as well as Franck-Condon factors for the A-X system.

.

CH

1995

122: 225593h Observation of CH A $^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$, and B $^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$, emissions in gas-phase collisions of fast O(3P) atoms with acetylene. Orient, O. J.; Chutjian, A.; Murad, E. (Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91109 USA). *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* 1995, 51(3), 2094-8 (Eng). Optical emissions in single-collision, beam-beam reactions of fast (3-22-eV translational energy) O(3P) atoms with C₂H₂ were measured in the wavelength range 300-850 nm. Two features were obsd., 1 with a peak wavelength at 431 nm, corresponding to the CH A $^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$, transition, and a 2nd weaker emission in the range 380-400 nm corresponding to the B $^2\Sigma \rightarrow X^2\Pi$, transition. Both the A $\rightarrow$ X and B $\rightarrow$ X emissions were fit to a synthetic spectrum of CH(A) at a vibrational temp. T_v of 10,000 K (0.86 eV) and a rotational temp. T_r of ~5000 K (0.43 eV); and CH(B) to T_v = 2500 K (0.22 eV) and T_r = 1000 K (0.09 eV). The energy threshold for the A $\rightarrow$ X emission is 7.3 ± 0.4 eV (lab.) or 4.5 ± 0.2 eV (c.m.). This agrees with the energy threshold of 7.36 eV (lab.) for the reaction O(3P) + C₂H₂ $\rightarrow$ CH(A) + HCO.

A $^2\Delta \leftarrow X^2\Pi_2$
B $^2\Sigma \leftarrow X^2\Pi_2$

u.h.

C.A. 1995, 122, N 18

CH

1996

J. Chem. Phys., 1996,
105, N 17, p. 7573

Do,

meap.
p a met

CH

DM 38422

1996

125: 259970f New spectroscopic analysis of the $B^2\Sigma^- - X^2\Pi$ band system of the CH molecule. Kepa, R.; Para, A.; Rytel, M.; Zachwieja, M. (Atomic and Molecular Physics Laboratory, Pedagogical University, 35-310 Rzeszow, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 178(2), 189-193 (Eng). The five (0-0, 0-1, 0-2, 1-0, and 1-1) bands of the $B^2\Sigma^- - X^2\Pi$ system of the CH radical were recorded and analyzed using conventional spectroscopy. The 0-1 and 0-2 bands were obsd. for the 1st time. The spectrum was photographed under high resolu. and calibrated against Th lines. The redn. of the spectra of the individual bands was performed via a nonlinear least-squares fit with the effective Hamiltonians of Brown. By making use of merged calcn. the authors detd. the B_v , D_v , H_v , and γ_u const. values for the $B^2\Sigma^-$ ($v = 0, 1$) levels with the $T_v^{2\Sigma^-} - T_v^{2\Sigma^-}$ band origin values for the analyzed bands.

($B^2\Sigma^- - X^2\Pi$)

M.H.

C.A. 1996, 128, N 20

CH
CH⁺ Li, Xiangzhu; Paldus, 1996
Zs6,

J. Chem. Phys, 1996, 104,
(mop. pacem) (23), 9555-62.

(Au. BeH, III)

CH

1996

Lii chow Arne, Anderson
James B,

расчет
жесткий
мислов.
и остр.
соем.

J. Chem. Phys., 1996, 105,
N 17, 7538-78

CH

(DM 38526)

1996

126: 163576b Analysis of the $B^2\Sigma^- - X^2\Pi$ system of the $^{13}\text{C}^1\text{H}$ molecule. Para, A. (Atomic Molecular Physics Lab., Pedagogical Univ., 35-310 Rzeszow, Pol.). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1996, 29(23), 5765-5771 (Eng), Institute of Physics Publishing. The four (0-0, 0-1, 1-0 and 1-1) bands of the $B^2\Sigma^- - X^2\Pi$ system in the ^{13}H isotopic radical were obtained using conventional spectroscopy and a Geissler tube. The 0-1, 1-0 and 1-1 bands were obsd. for the 1st time. The spectrum was photographed under high resolu. and calibrated against Th lines. The redn. of the spectra of the individual bands was performed via a nonlinear least-squares fit with the effective Hamiltonians of Brown. By using a merged calcn. the rotational const. have been detd. for both combining states and values of the origins for the analyzed bands. For both states the following also were detd.: equil. const., RKR potentials as well as Franck-Condon factors and r-centroids for the B-X system.

($B^2\Sigma^- - X^2\Pi$)
M.A.

C. A. 1997, 126, N 12

F: C-H

P: 3

17Б1124. Квантово-химические расчеты энергии диссоциации связи C-H в углеводородах, спиртах и простых эфирах / Тимергазин К. К., Хурсан С. Л. // Изв. РАН. Сер. хим. [бывш. Изв. АН СССР. Сер. хим.]. - 1996. - 12. - С. 2858-2861. - Рус.; рез. Англ.

Энергии диссоциации связей C-H в углеводородах, спиртах и простых эфирах рассчитаны полуэмпирическими методами МПДП, AM1 и ПМ3. Средняя погрешность расчета $D(C-H)$ при использовании разных квантово-хим. методов составляет $1,3 \text{ ккал} \cdot \text{моль}^{-1}$.

1996

1996

F: R-CH

P: 3

17Б1124. Квантово-химические расчеты энергии диссоциации связи C-H в углеводородах, спиртах и простых эфирах / Тимергазин К. К., Хурсан С. Л. // Изв. РАН. Сер. хим. [бывш. Изв. АН СССР. Сер. хим.]. - 1996. - 12. - С. 2858-2861. - Рус.; рез. Англ.

Энергии диссоциации связей C-H в углеводородах, спиртах и простых эфирах рассчитаны полуэмпирическими методами МПДП, АМ1 и ПМ3. Средняя погрешность расчета $D(C-H)$ при использовании разных квантово-хим. методов составляет $1,3 \text{ ккал} \cdot \text{моль}^{-1}$.

РЖХ 1997

12 CH,

13 CH

1997

127: 72374p Analysis of the 0-0 band of the $C^2E^+ - X^2\Pi$ band system in the ^{12}CH and ^{13}CH isotopic radicals. Bembenek, Z.; Kepa, R.; Rytel, M. (Atomic Mol. Physics Lab., Inst. Physics, Pedagogical Univ., 35-310 Rzeszow, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 183(1), 1-5 (Eng), Academic. The emission spectrum of the 0-0 band of the $C^2E^+ - X^2\Pi$ transition for ^{12}CH and ^{13}CH isotopic mols. were obtained using a Geissler tube. The spectra were photographed under high resolu. and calibrated against Th std. lines. The redn. of the spectra for the individual bands was performed via a nonlinear least-squares fit with the effective Hamiltonian of Brown. New values of the mol. consts. for upper state were detd. The 0-0 band of the $C^2E^+ - X^2\Pi$ system in the ^{13}CH radical was obtained and analyzed for the 1st time.

0,0 band
($C^2E^+ - X^2\Pi$)

C.A. 1997, 127, N 5

CH

1997

nomes.
Kpukhe

126: 298863p Ab-initio X-H potentials calculation. Jaidane, N.; Benlakhdar, Z.; Gritli, H. (Faculte Sciences Tunis, Campus Universitaire, Tunis, Tunisia 1060). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1997, 3090(High-Resolution Molecular Spectroscopy), 121-124 (Eng), SPIE-The International Society for Optical Engineering. Highly correlated ab-initio potential curves are calcd. for the fundamental states of CH, NH, OH and SH. These potentials are first used in a numerically treatment of nuclear motion then fitted with modified Morse potential functions.

(15)



C.A. 1997, 126, N22

CH

[Om. 38757]

1997

Jan Hrušák, et al.,

U. N.

J. Chem. Phys., 1997,
106 (17), 7185...



13 CH

1997

126: 322615g The $A^2\Delta-X^2\Pi$ band system of the ^{13}CH radical. Zachwieja, M. (Atomic Mol. Physics Lab., Pedagogical Univ., 35-310 Rzeszow, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 182(1), 18-33 (Eng), Academic. Seven bands of the $A^2\Delta-X^2\Pi$ system of the ^{13}CH radical were photographed in emission from a Geissler tube. Under high resolu. and using Th lines as stds., and an interferometric comparator equipped with a photoelec. scanning device, the 0-0 band was rephotographed, and the 1-1, 2-2, 3-3, 0-1, 1-2, and 2-3 bands were photographed. The redn. of the spectrum for the individual bands was performed via a nonlinear least-squares fit with the effective Hamiltonians of J.M. Brown et al. (1979). The merged mol. parameters for the obsd. levels and the equil. mol. consts. were compared with calcns. performed within the Born-Oppenheimer approxn. and a small disagreement for some of them was found, due to partial breakdown of the Born-Oppenheimer approxn. The electronic isotopic shift was detd.: $\Delta\nu_e = 0.403 \text{ cm}^{-1}$. The RKR potentials and r-centroids were calcd. for both combining states, and Franck-Condon factors for the A-X system.

($A^2\Delta - X^2\Pi$)

C. A. 1997, 126, N 24

CH

Ali, Md Sadique 1998
et al.,

WeXe,
de,
meopem-
pacem

Indian J. Pure Appl.
Phys. 1998, 36 (9),
508 - 511.

(an. Lit; III)

CH

1998

129: 267205h Highly predissociative levels of CH B $2\Sigma^-$ state detected with two-color resonant four-wave mixing spectroscopy. Kumar, Awadhesh; Hsiao, Chih-Chang; Hung, Wen-Ching; Lee, Yuan-Pern (Sec. 2, 101, Department of Chemistry, National Tsing Hua University, Kuang-Fu Road, Hsinchu, Taiwan 30043). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(10), 3824-3830 (Eng), American Institute of Physics. We demonstrate an application of two-color resonant four-wave mixing spectroscopy to detect highly predissociative levels of CH in the B $2\Sigma^-$ state in a hostile environment of an oxyacetylene flame. The probe and grating wavelengths are in resonance with the A $2\Delta-X^2\Pi$ and B $2\Sigma^-X^2\Pi$ systems, resp. We measured 49 previously unobserved rovibronic lines of the 0-0 band and 38 addnl. lines of the 1-0 band of the B $2\Sigma^-X^2\Pi$ system to access rotational quantum no. N' up to 21 and 13

B $2\Sigma^-$, $\text{HCO}-$
конфигурация
уровни

C.A. 1999, 129, N20

of $\nu'=0$ and 1 in the $B\ ^2\Sigma^-$ state, resp. Inclusion of addnl. line positions measured for the 0-0 and the 1-0 bands yields spectral parameters of the $B\ ^2\Sigma^-$ state significantly improved over those obtained previously with only non-predissociative lines; one addnl. centrifugal-distortion parameter L_v is evaluated significantly. Although power satn. is significant even at smallest practical laser energies, we estd lifetimes through the power dependence of linewidths. The lifetimes of the highest measurable level of $B\ ^2\Sigma^-$ ($\nu'=0$ and 1) are 3 ± 1 ($N'=20$) and 8 ± 2 ($N'=11$) ps, resp.

CH

1998

ab initio
 parcm
 homeric
 kpuuuk, Δ
 2e, We

(73)

129: 235876m Spectroscopic quality ab initio potential curves for CH, NH, OH and HF. A convergence study. Martin, Jan M. L. (Room 262, Kimmelman Building, Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science, 76100 Rehovot, Israel). *Chem. Phys. Lett.* 1998, 292(4,5,6), 411-420 (Eng), Elsevier Science B.V.. A calibration study has been carried out on the ground-state potential curves of CH, NH, OH and HF. Using uncontracted spdfgh or spdfghi basis sets in conjunction with treatments of core correlation and imperfections in the CCSD(T) method, r_e and ω_e of the first-row diat. hydrides can on av. be reproduced to within 0.0002 Å and 1 cm⁻¹, resp., as can the first 4-6 vibrational quanta. The CCSD(T) basis set limit systematically overestimates ω_e by 4-9 cm⁻¹ and underestimates r_e by 0.0003-0.0006 Å. Higher anharmonicities exhibit pronounced basis set sensitivity, which is markedly reduced upon uncontracting the basis set.

C. A. 1998, 129, N 18

CH

(Om. 39831)

1999

Gabrielle Morosi et al.,

J. Chem. Phys. 1999,

Ae

111, N15, 6755-58.

Quantum
calculations
electron

Monte Carlo
●
affinities: First-row

or molecular

hydrides.



F: CH

P: 3

em. 399341

1999

132:40799

An accurate description of the ground and excited states of CH. Kalemos, Apostolos; Mavridis, Aristides; Metropoulos, Aristophanes

Laboratory of Physical Chemistry, Department of Chemistry, National and Kapodistrian University of Athens Zografou, Athens 157 10, Greece J. Chem. Phys., 111(21), 9536-9548 (English) 1999 With the high accuracy afforded by the sextuple correlation consistent basis set of Dunning, we have calcd. energy levels, dissocn. energies, eq distances, and other spectroscopic consts. for eleven valence and four Rydberg states of the CH radical. Comparisons with exptl. and previous theor. results are made for each state that has been treated. An understanding of their binding is attempted by means of simple valence bo Lewis diagrams.

C.A. Lodd, 132

1999

F: CH

P: 3

131:150854 Rydberg-Klein-Rees potential
function calculations for the gro ($x2.\pi$.) and
excited (B2.SIGMA.-) states of the methylidyne (CH)
radical. Nemes, Laszlo; Szalay, Peter G.
(Research Laboratory for Inorganic Chemistry,
Hungarian Academy of Sciences, Budapest H-1112,
Hung.). ACH - Chem., 136(1-2), 205-214 (English)
1999 RKR inversion calcns. are reported for the
doublet ground state ($X2.\pi$.) and doublet excited
state (B2.SIGMA.-) of the CH radical. These
calcns. latest spectroscopic consts. for these 2

states. The authors 1st provide short background description of the RKR method, then report the 1st few t points as well as vibrational levels obtained from these calcns. Using a radial Schrodinger equation solver rotation-vibration transitions, as wel Franck-Condon factors are calcd. for 4 vibrational bands in the B-X elect band. Although in the present case the RKR method is unable to reproduce slight rotational barrier in the B state of CH, spectroscopic quantities obtained from it are quite reliable as long as the transitions end on the 0 rotational stack of the B state.

F: CH

P: 3

131:176494 Two-Color Resonant Four-Wave Mixing Spectra of the C2.SIGMA.+ X2.PI.(1-1) Band of CH in a Flame. Li, Xinghua; Kumar, Awadhesh; Hsiao, C Chang; Lee, Yuan-Pern (Department of Chemistry, National Tsing Hua Univer Hsinchu 30043, Taiwan). J. Phys. Chem. A, 103(31), 6162-6166 (English) 1 Section cross-reference(s): 51 We studied predissociative transitions C2.SIGMA.+ ($v' = 1$)-X2.PI. ($v'' = 1$) of CH in an oxyacetylene flame with two-color resonant four-wave mixing technique in which two grating beams resonance with the C-X transition and the probe beam is resonant with a s A-X transition. Six branches of the

C-X system are spectrally resolved for first time; in total 124 lines detected in this work correspond to excitation of the C state up to $N' = 23$. Obsd. wavenumbers are fitted to yield improved spectral parameters of the C2.SIGMA.+ ($v = 1$) state; one additional centrifugal distortion parameter L_v is evaluated significantly. These data are combined with lines of C-X (0-0) and (2-2) bands to provide improved characterization of the C state of CH. For all lines of the C-X (1-1) band, the line widths are nearly identical. Predissociation mechanisms of the C state are discussed.

F: CH

P: 3

132:250857 Spectroscopy and Relaxation Kinetics
of Matrix-Isolated CH/D Radicals. Burroughs,
Amy; Heaven, Michael C. Department of
Chemistry, Emory University Atlanta, GA 30322,
USA J. Phys. Chem. A, 104(16), 3842-3851
(English) 2000 American Chemical Society.

~~Inorganic Chemistry~~ 73 The A2.DELTA.-X2.PI.
and B2.SIGMA.--X2.PI. transitions of CH/D were
examd. for radicals trapped in Ar and Kr matrixes.
Excitation spectra yield further evidence that
CH/D(B) rotates in solid Ar and Kr. Vibrational
relaxation of CH/D(B) is faster for the heavier
isotope, indicating that vibration to rotation
energy transfer is the dominant mechanism. The
decay of CH(B), $v = 0$ is primarily radiative in

C.A. 2000

'both Ar and Kr, with small contributions from B .fwdarw. A nonradiative transfer. Fluorescence was not detected from CD(B), $v = 0$ as the B .fwdarw. A transfer process was much faster than radiative decay for this isotope. The proximity of the CD(B), $v = 0$ and (A), $v = 1$ levels is responsible for the accelerated transfer rate. Spectra for the A-X transition of CH-Arn clusters were recorded for comparison with the matrix data. Relative to free CH, the transition is blue-shifted in the cluster and red-shifted in an Ar matrix. This contrast suggests that the clusters consist of CH bound to the surface of Arn. ~~spectroscopy~~ relaxation

CH

2000

134: 34620c Resonance multiphoton ionization spectroscopy of the $D^2\Pi(v=2)$ $A^2\Delta$ of CH radicals. Chen, Y.; Jin, J.; Pei, L.; Ma, X.; Chen, C. (Open Laboratory of Bond Selective Chemistry, Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Anhui, Peop. Rep. China 230026). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 2000, 108(1-3), 221-224 (Eng), Elsevier Science B.V. The resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI) spectrum of CH was obsd. in the 240-250 nm region. Rotational anal. of the spectrum indicates that it is due to the $D^2\Pi(v=2)$ $A^2\Delta$ transition. Based on the broad features obsd. at 247.6 nm while monitoring the C^+ ion, the previously unreported predissocn. Rydberg state at 63600 cm^{-1} , built upon the excited core of $CH^+ A^1\Pi$, is discussed.

($D^2\Pi - A^2\Delta$)
 Franzen
 Aram

C. A. 2001, 134, N3

F: C-H

P: 3

132:122171 Computationally (X) Efficient
Methodology to Calculate C-H and C-X (F, Cl, and Br)
Bond Dissociation Energies in Haloalkanes.

McGivern, W. Se Derecskei-Kovacs, Agnes;
North, Simon W.; Francisco, Joseph S. Chemistry
Department, Texas A&M University College
Station, TX 77842, USA J. Phys. Chem. A,
104(2), 436-442 (English) 2000 A
computationally efficient method for calcg. C-H and
C-X (X = F, Cl, an Br) bond dissocn. energies in
haloalkanes was developed by detg. correcti factors
to MP2/cc-pVtz energies. Corrections for basis set
effects were by the difference in bond dissocn.

C. A. 2000, 132

energies calcd. at the MP2/cc-pVtz and MP2/cc-pV5z levels, and correlation effects were cor. by calcg. the diffe in energies at the MP2/cc-pVtz and CCSD(T)/cc-pVtz levels. Subsequent corrections for the spin-orbit energy of the at. fragment and zero-point were applied to give a final bond dissocn. energy. The correction factor detd. using CH₄, MeF, MeCl, and MeBr and yield bond dissocn. energies in excellent agreement with exptl. results. This correction may also be bro applied to multihalogen compds., as shown in calcns. of the C-H and C-X b dissocn. energies of CH₂X₂ and CHX₃ (X = F, Cl, and Br) compds., which accurately reproduce exptl. values.

2000

F: CH

P: 3

132:228959 State-specific collisional coupling of
the CH A 2.DELTA. and B 2.SIGMA.- states. Randall,
Colin J.; Murray, Craig; McKendrick, Kenneth G

Department of Chemistry, The University of
Edinburgh Edinburgh EH9 3JJ, UK Phys. Chem.
Chem. Phys., 2(4), 461-471 (English) 2000

Electronically excited CH radicals were
prepd. in chosen vibrational levels of the A2.DELTA.
and B2.SIGMA.- states by selective laser excitati The
evolution of the populations in the initial and
collisionally produce vibronic levels was followed by
time- and wavelength-resolved fluorescenc

C-A. 2000, 132

spectroscopy. CO₂, as a model collision partner, efficiently promotes the coupling of the A₂.DELTA. and B₂.SIGMA.- states at room temp. (~295 K). A₂.DELTA., $v = 1$ is reversibly transferred to the near-degenerate B₂.SIGMA $v = 0$ level, and irreversibly vibrationally relaxed to A₂.DELTA., $v = 0$, comparable probabilities for these competing processes. CH B₂.SIGMA.-, v is correspondingly reversibly transferred to A₂.DELTA., $v = 1$ and irreversibly transferred to A₂.DELTA., $v = 0$. The branching ratio for the 2 product vibrational states is ~2:1, which contrasts markedly with the predictions of energy-gap scaling laws. The A₂.DELTA., $v = 0$ level is on weakly quenched by CO₂, in agreement with previous measurements. These observations have important consequences for the use of laser-induced fluorescence spectroscopy as a tool for monitoring the d. of CH in collisional environments, and in the interpretation of previously measured quenching rate consts. for electronically excited CH.

2001

F: CH

P: 3

134:272900 **A measurement of the rotational spectrum of the CH radical in the far-infrared.** Davidson, Steven A.; Evenson, Kenneth M.; Brown, John M. Time and Frequency Laboratory, National Institute for Standards and Technology, Boulder, CO, USA. *Astrophys. J.* (2001), 546(1, Pt. 1), 330-337. in English.

Rotational and fine-structure transitions between the lower rotational levels of the CH radical in its X2II state were obsd. in absorption in the lab. with a tunable far-IR (TuFIR) spectrometer. The mols. were generated in an elec. discharge through a mixt. of CH₄ and CO in He. The exptl. line widths were limited by Doppler broadening and the measurements have a 1 σ exptl. uncertainty of 100 kHz. The frequencies were used together with all previous measurements of CH in the $v = 0$ level of the X2II electronic state to det. its mol. parameters and to predict an accurate set of rotational transition frequencies.



CH(A²Δ) · Ar

2001

135: 322948d Potential energy surfaces for CH(A²Δ)-Ar and analysis of the A²Δ-X²Π band system. Kerenskaya, Galina; Kaledin, Alexey L.; Heaven, Michael C. (Department of Chemistry, Emory University, Atlanta, GA 30322 USA). *J. Chem. Phys.* 2001, 115(5), 2123-2133 (Eng), American Institute of Physics. Two-dimensional intermol. potential energy surfaces for the CH(A²Δ)-Ar complex (CH bond fixed at equil.) were calcd. at the multireference singles and doubles CI/correlation-consistent valence quadruple zeta level of theory. These surfaces are of 2²A' and 2²A'' electronic symmetry. Both potentials define a linear CH-Ar equil. structure (Ar...H ~ 3 Å), with a secondary min. for the Ar-CH linear geometry (Ar...C ~ 4 Å). The global min. is ~117 cm⁻¹ below disocn. Side-on approach of the Ar atom breaks the orbital degeneracy of the 2Δ state, but this splitting is relatively small near the equil. sepn., only about 10 cm⁻¹. The potential surfaces were used in simulations of the A-X bands of CH-Ar and CD-Ar. The correlation between the simulated and obsd. spectra was sufficient for assignment of the latter. Systematic adjustment of the A state av. potential, defined as V_a=[V(A') + V(A'')]/2, was done to obtain a surface that reproduces the vibrational energy spacings and rotational consts. of CH-Ar and CD-Ar.

номенклат.
нов. смесей,
соедин.

CHAr
CDAr (ф. н. н. н.)

C. H. 2001, 135, 2122.

C-H

2001

Miroshnichenko EA.

журнал
миссоз.
связей
с
полн-
ншроам. (Eng) (или IV-NO₂; II)

Int. Annu Conf. ICT
2001, 3rd (Energetic
Materials) 103/1 - 103/8