

А. Д. Смирнов

РАСЧЕТ КОНСТАНТ ЦЕНТРОБЕЖНОГО ИСКАЖЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ Cu_2

Построены потенциальные кривые Ридберга–Клейна–Риса для ряда электронных состояний молекулы Cu_2 , для каждой потенциальной кривой приведено решение радиального волнового уравнения. Полученные колебательные волновые функции и значения колебательной энергии использованы для расчета констант центробежного искажения.

**Constants of centrifugal distortion of Cu_2 molecule / A.D. Smirnov
// Vestnik MGTU. Natural Sciences. 1999. No. 1. P. 105–115.**

The potential energy curves are calculated for some electron states of Cu_2 molecule by the Rydberg–Klein–Ress method. These potential curves are used to determine the eigenvalues and eigenfunctions by numerical solution of the radial Schrodinger equation. The centrifugal distortion constants are found from the vibrational wave functions and energies. The obtained centrifugal distortion constants are compared with the values derived by Dunham coefficients. Figs.2. Refs.20. Tabs.2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dunham J. L. // Phys. Rev. 1932, V. 41, P. 721–730.
2. Kirschner S. M., Watson J. K. G. // J. Molec. Spectr., 1974, V. 51, P. 321–333.
3. Vidal C. R., Schengraber H. // J. Molec. Spectr., 1977, V. 65, P. 46–64.
4. Albitritton D. L., Harrop W. J., Schmeltekopf A. L., Zare R. N. // J. Molec. Spectr., 1973, V. 46, P. 25–36.
5. Huston J. M. // J. Phys. B. 1981, V. 14, P. 851–857.
6. Tellinghuisen J. // J. Molec. Spectr. 1987, V. 122, P. 455–461.
7. Юрченко С. Н. // Оптика и спектр. – 1995. – Т. 78. – № 6. – С. 907–910.
8. Morse M. D. // Chem. Rev., 1986, V. 86, № 6. P. 1049–1109.
9. Klambunde K. J. // Free atoms, clusters and nanoscale particles. Academic Press. 1994.
10. Кузьменко Н. Е., Кузнецова Л. А., Кузяков Ю. Я. Факторы Франка–Кондона двухатомных молекул. – М.: Изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 1984. – 344 с.
11. Смирнов А. Д. Факторы Франка–Кондона и потенциальные кривые комбинирующих состояний $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ перехода димера // Оптика и спектр. – 1995. – Т. 78. – № 4. – С. 615–621.

12. L o c h e t J. // J. Phys. B, 1978, V. 11, No. 3. P. 55–57.
13. М с . C a f f r e y J. G., B e n n e t t E. R., M o r s e M. D., B r e c k e n - r i d g e W. H. // J. Chem. Phys., 1989, V. 91, No. 1, P. 92–103.
14. R o h l f i n g E. A., V a l e n t i n i J. J. // J. Chem. Phys. 1986, V. 84, No. 12, P. 6560–6566.
15. Х ь ю б е р К. П., Г е р ц б е р г Г. Константы двухатомных молекул. Часть 1. – М.: Мир, 1984.
16. P a g e R., G u d e r m a n C. S. // J. Chem. Phys. 1991. V. 94. No. 1. P. 39–51.
17. С м и р н о в А. Д., К у з ь м е н к о Н. Е., К у з ь я к о в Ю. Я. Факторы Франка–Кондона, r -центроиды и истинные потенциальные кривые комбинирующих состояний $B_u^1\Xi^+ - X^1\Xi_g^+$ перехода молекул Cu_2 // Оптика и спектр. – 1979. – Т. 47. – № 2. – С. 261–265.
18. С м и р н о в А. Д., К у з ь м е н к о Н. Е., К у з ь я к о в Ю. Я. Факторы Франка–Кондона и r -центроиды для перехода $A^1\Pi_u - X^1\Xi_g^+$ для молекул Cu_2 // Оптика и спектр. – 1980. – Т. 48. – № 1. – С. 194–196.
19. С м и р н о в А. Д. Потенциальные кривые основных электронных состояний димеров натрия, калия, цезия // Оптика и спектр. – 1996. – Т. 81. – № 3. – С. 390–396.
20. H u f f a k e r J. N. // J. Chem. Phys. 1976, V. 64. P. 3175–3181.

Статья поступила в редакцию 18.11.1997

Александр Давидович Смирнов родился в 1946 г., окончил в 1969 г. МГУ им. М.В. Ломоносова. Канд. хим. наук, доцент кафедры “Химия” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 60 научных работ в области квантовохимических расчетов молекул.

A.D. Smirnov (b. 1946) graduated from Lomonosov Moscow State University in 1969. Ph. D. (Chem.), ass. professor of “Chemistry” Department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 60 publications in the field of quantum-chemical calculations for molecules.