

качающейся пластинкой в четверть волны и регистрируется фотоэлектрически. Электромагнит позволяет получать в междуэлектродном зазоре поле до 16 000 гаусс. Измерительная кювета имеет длину 0.2 м. Свет проходит ее дважды (в прямом и обратном направлениях). Система проверялась на отсутствие явления магнитного вращения плоскости поляризации.

Нами были проведены измерения абсолютного запаздывания Δ_{\parallel} , Δ_{\perp} и постоянной Коттона—Мутона C в магнитном поле для молекул различных типов (хлорбензол, толуол, бензол, хлороформ). Значения отношения абсолютных запаздываний для этих жидкостей при различных напряженностях магнитного поля приводятся в таблице и равны $\Delta_{\parallel}/\Delta_{\perp} = -2.0 \pm 0.1$.

Полученные нами значения Δ_{\parallel} и Δ_{\perp} являются термодинамически равновесными. На основании полученных значений отношения абсолютных запаздываний механизм возникновения магнитного двулучепреломления в жидкости можно представить следующим образом: или явление носит чисто ориентационный характер и не сопровождается заметной магнитострикцией, или сама стрикция является анизотропной.

Приношу благодарность В. А. Замкову за ценные указания.

Литература

- [1] P. Langevin. Le Radium, 7, 233, 249, 1910.
- [2] M. Born. Ann. Phys., 55, 177, 1918.
- [3] M. Pauthenier. Ann. de Phys., 14, 16, 239, 1920.
- [4] J. Minard. J. Rech. CNRS, № 60, 253, 1962.
- [5] В. А. Замков, В. А. Радкевич. Депонировано ВИНТИ, № 1710—70 Дец.

Поступило в Редакцию 23 марта 1971 г.

УДК 535.36

ПОПРАВКА К РАБОТЕ «ФЛУКТУАЦИИ АНИЗОТРОПИИ И РАССЕЯНИЕ СВЕТА В ЖИДКОСТЯХ»

В. П. Романов и В. А. Соловьев

В заключительной части [1] было ошибочно отмечено расхождение в коэффициентах с работой [2]. Это замечание было следствием вычислительной ошибки при сопоставлении формул. В действительности результаты обеих работ в этой части совпадают. Само расхождение мы объясняли тем, что в [2] использовался избыточный набор независимых переменных. На самом деле ФДТ можно применять и к избыточному набору. Действительно, пусть на обобщенные координаты x_i , связанные с внутренними и внешними силами f_i и F_i уравнениями состояния $x_i = -b_{ik}f_k$ и движения $M_{ik}x_k = f_i + F_i$ (ср. [3]), наложено дополнительное условие $A_k x_k = 0$. Тогда как внутренние, так и внешние силы связаны уравнениями вида $A_i b_{ik}f_k = 0$. Добавляя в правой части уравнений движения члены $\lambda_i A_k b_{kj} F_j$, где λ_j — неопределенные множители Лагранжа, находим $x_k = p_{kj}(\lambda) F_j$. Условие связи требует $A_k p_{kj}(\lambda) = 0$, что дает (с учетом условий симметрии типа $p_{kj} = p_{jk}$) полную систему для определения всех λ_i . Найденные таким образом восприимчивости p_{jk} и используются в ФДТ. В случае простых условий связи, например $\xi_{ik} = \xi_{ki}$, как в [1, 2], эта процедура сводится к записи уравнений движения в симметризованной форме: $2\eta \xi_{ik} = (\psi_{ik} + \psi_{ki})/2$. При вычислении полных флуктуаций условие связи можно учесть введением в функцию распределения множителя $\delta(A_k x_k)$ (δ — дельта-функция Дирака). В [2] все условия типа симметрии учтены в явном виде.

Мы глубоко признательны С. М. Рытову за любезное разъяснение этого вопроса.

По вине авторов в [1] допущены опечатки. В третьем уравнении (25) вместо δS следует читать $\partial S / \partial x_1$, в четвертом — вместо $\partial^2 \mathcal{F} / \partial x_1^2 - \partial^2 \mathcal{F} / \partial x_2^2$.

В формуле (29) мы вслед за Леонтовичем [4] допустили неточность: вместо X_{α} там должно стоять ζ_{23}^{α} . Уравнения для X^{α} и ζ_{23}^{α} совпадают, и поэтому выражения для $\langle X_{\alpha}^2 \rangle_{\omega k}$ и $\langle \zeta_{23}^{\alpha 2} \rangle_{\omega k}$ идентичны.

- [1] В. П. Романов, В. А. Соловьев. *Опт. и спектр.*, 29, 884, 1970.
 [2] С. М. Рытов. *ЖЭТФ*, 58, 2154, 1970.
 [3] В. П. Романов, В. А. Соловьев, Л. С. Филатова. *ЖЭТФ*, 58, 887, 1970.
 [4] М. А. Леонтович. *J. Phys. USSR*, 4, 499, 1941.

Поступило в Редакцию 29 марта 1971 г.

УДК 535.34-2

ОБ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ НЕКОТОРЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ИОНОВ С ЗАМКНУТОЙ ОБОЛОЧКОЙ

В. Н. Полтавец и М. М. Местечкин

В данной заметке приводятся результаты применения разработанной ранее [1, 2] схемы расчета электронных спектров к новому классу объектов, которые можно охватить без каких-либо изменений самой модели. Это — ионы молекул сопряженных углеводородов с замкнутой оболочкой. Сюда можно отнести анионы молекул (типа перилля), содержащие одно пятичленное кольцо, катионы молекул (типа тропилля), содержащие одно семичленное кольцо и двухзарядные ионы обычных бензоидных молекул. Все детали расчета, включая выбор геометрии, таковы же, как в [3]. Нужно только обратить внимание на следующие особенности в случае расчета основного состояния ионов. Сходимость применяемой процедуры [4] к матрице остаточных зарядов иона нужной кратности обеспечивается должным сдвигом начала отсчета в одноэлектронной матрице энергии F . Причем для альтернатных ионов подбор этого сдвига («химпотенциала») производился дважды: один раз — для получения исходного хюккелевского распределения зарядов в ионе, а второй — для самосогласованного.

Найденное самосогласованное распределение электронной плотности в ионах качественно соответствует картине отталкивающихся зарядов: по сравнению с хюккелевским распределением одноименные избыточные заряды скапливаются на периферии молекулы.

Значения синглетных и триплетных уровней ряда ионов (и очень близких им по структуре молекул) приведены в таблице и сопоставлены с известными нам литературными экспериментальными данными [5-8]. Для некоторых ионов положение максимумов поглощения по экспериментальным данным устанавливается весьма неоднозначно, но в общем для низших уровней соответствие расчета и эксперимента таково же, как и в других случаях применения данной методики [2, 3]. В случае иона тетрацена отнесение уровней лучше соответствует данным [5], чем [6].

Результаты этих расчетов говорят о новых возможностях используемой модели. Стоит отметить, что в последнее время при расчете молекул сопряженных углеводородов [9-11] имеется тенденция к изменению параметров в сторону применяемых нами значений (уменьшение параметров электронного взаимодействия и некоторое увеличение β). Все большее распространение для исследования электронных спектров приобретают и полумпирические варианты метода хаотических фаз, например, [12, 13]. По сравнению с последними упомянутыми работами наша методика расчетов позволяет в рамках близкой схемы изучать более широкие классы объектов.

Литература

- [1] М. М. Местечкин. *Строение молекул и квантовая химия*, 111. Изд. «Наукова думка», Киев, 1970.
 [2] М. М. Местечкин, Л. С. Гутыря. *Оптика и спектр.*, 26, 159, 1969; 28, 454, 1970.
 [3] М. М. Местечкин, Л. С. Гутыря, В. Н. Полтавец. *Оптика и спектр.*, 30, 1022, 1971.
 [4] М. М. Местечкин, В. Н. Полтавец. *ТЭХ*, 3, 695, 1967.
 [5] E. de Voer, S. I. Weissman. *Rec. trav. chim.*, 76, 824, 1957.
 [6] P. Balk, G. J. Hoijtink, J. W. H. Schreurs. *Rec. trav. chim.*, 76, 813, 1957.
 [7] G. Naville, H. Strauss, E. Heilbronner. *Helv. chim. Acta.*, 43, 1221, 1960.