

щегося в плоскости изображения ФЭУ, задиафрагмированного малым отверстием. Для отбеленных фазовых голограмм отношение интенсивностей на всей площади действительного изображения находилось в пределах 50÷100. Эффективность восстановления голограмм с дискретной информацией была меньшей, чем в случае голограмм типа простой дифракционной решетки. Это объясняется прежде всего неполной распределенностью записи транспаранта по полю голограммы. При более распределенной записи эффективность восстановления голограмм с дискретной информацией может быть существенно повышена.

### Литература

- [1] Ю. Н. Денисюк. *Опт. и спектр.*, 15, 522, 1963.  
 [2] С. В. Вуркхардт. *J. Opt. Soc. Am.*, 57, 601, 1967.  
 [3] Н. Кiemle. *Optics Technology*, 5, 1969.  
 [4] J. Upatnieks, C. Leonard. *Appl. Opt.*, 8, 85, 1969.

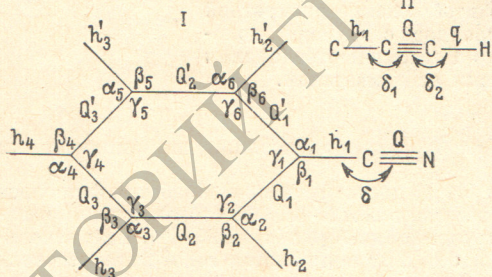
Поступило в Редакцию 12 октября 1970 г.

УДК 539.194.01

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИК СПЕКТРОВ БЕНЗОНИТРИЛА, БЕНЗОНИТРИЛА-d<sub>5</sub> И ФЕНИЛАЦЕТИЛЕНА

К. М. Данчинов, А. Н. Родионов, Е. А. Гастрилович и Д. Н. Шигорин

В литературе накоплен большой экспериментальный материал по колебательным спектрам исследуемых соединений [1-3]. Однако решения задач о нормальных колебаниях в этих работах не были выполнены, так что предложенная ими интерпретация колебательных спектров не подкреплялась теоретическим расчетом. Поэтому решение механической задачи (с последующим использованием ее результатов для определения электрооптических параметров вышеуказанных молекул) представляет несомненный интерес.



Равновесные конфигурации и система естественных координат бензонитрила (I) и ацетиленовой группы (II) фенилацетилена.

Расчеты проводились на ЭВМ «Минск-22» с использованием метода и программы Грибова [4]. На рисунке приводятся равновесные конфигурации и система естественных координат бензонитрила (I) и ацетиленовой группы (II) фенилацетилена.

Геометрические параметры взяты из [5, 6]

- I.  $\rho_{(C=C)} = 1.40$ ,  $\rho_{(C-H)} = 1.08$ ,  
 $\rho_{(C-C)} = 1.44$  и  $\rho_{(C=N)} = 1.15 \text{ \AA}$ ,  
 II.  $\rho_{(C=C)} = 1.46$ ,  $\rho_{(C=C)} = 1.20$ ,  
 $\rho_{(C-H)} = 1.06 \text{ \AA}$ .

Кроме того, были использованы следующие значения масс атомов:  $m_C = 12.01$ ,  $m_N = 14.0$ ,  $m_H = 1.008$  при значениях единичных длин связей и масс, равных 1 Å и 1 а. е. м.

В литературе известно несколько силовых полей, удовлетворительно описывающих экспериментально измеренные частоты бензола и его алкил-, галоидо- и металлпроизводных [7-13]. Нами для бензольного кольца была выбрана система силовых постоянных из [13], удовлетворяющая дополнительным экспериментальным данным (значения для кориолисовых постоянных в  $C_6H_6$  и  $C_6D_6$  близки к экспериментально измеренным). В связи с использованием этого поля были введены следующие модифицированные координаты:

$$\varphi_1 = \frac{1}{2} (\alpha_1 - \beta_1), \quad \varphi_2 = \frac{1}{2} (\alpha_2 - \beta_2), \quad \varphi_3 = \frac{1}{2} (\alpha_3 - \beta_3), \quad \varphi_4 = \frac{1}{2} (\alpha_4 - \beta_4),$$

$$\varphi_5 = \frac{1}{2} (\alpha_5 - \beta_5), \quad \varphi_6 = \frac{1}{2} (\alpha_6 - \beta_6).$$

Таблица 1

Частоты плоских колебаний бензонитрила, бензонитрила- $d_5$ 

Соединение	Номер частоты	Симметрия	Частоты, см <sup>-1</sup>			Соединение	Частоты, см <sup>-1</sup>		Отнесение *
			опыт [° <sup>3</sup> ]		расчет		опыт [° <sup>3</sup> ]	расчет	
			ИКС	КР					
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C≡N	1	A <sub>1</sub>	3080	3071	3062	C <sub>6</sub> D <sub>5</sub> -C≡N	2305	2280	ν
	2		3062	—	3060		2286	2275	ν
	3		3042	—	3057		2283	2269	ν
	4		2232	2222	2240		2226	2196	ν (C≡N)
	5		1599	1600	1595		1568	1555	Q
	6		1492	1498	1462		1378	1349	Q
	7		1192	1190	1222		1123	1125	Q, ν (C-CN)
	8		1178	1178	1195		959	955	δ
	9		1027	1023	1034		871	840	δ, Δ
	10		1001	997	1002		845	828	Δ, δ
	11		769	765	750		718	717	Δ, Q
	12		461	460	456		452	435	Δ, ν (C-CN)
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C≡N	13	B <sub>2</sub>	3072	—	3057	C <sub>6</sub> D <sub>5</sub> -C≡N	2286	2270	ν
	14		3027	—	3057		2283	2269	ν
	15		1584	—	1573		1568	1587	Q
	16		1448	1445	1410		1330	1284	Q
	17		1337	1310	1330		1280	1250	Q
	18		1289	1287	1291		1040	1033	δ
	19		1163	—	1156		838	856	δ
	20		1071	—	1074		823	845	δ
	21		629	624	612		599	590	Δ
	22		551	—	552		552	537	β (C≡N)
	23		—	381	194		357	180	β (C-CN)

\* ν — вал. (C—H), Q — вал. (C—C), δ — деф. (C—H), Δ — деф. кольца.

Таблица 2

## Частоты плоских колебаний фенилацетилена

Соединение	Номер частоты	Симметрия	Частоты, см <sup>-1</sup>			Соединение	Частоты, см <sup>-1</sup>		Отнесение *
			опыт [° <sup>3</sup> ]		расчет		опыт [° <sup>3</sup> ]	расчет	
			ИКС	КР					
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C≡CH	1	A <sub>1</sub>	3315	3291	3305	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C≡CD	2608	2628	ν (≡C—H)
	2		3065	3063	3062		3068	3058	ν
	3		3058	—	3060		3059	3057	ν
	4		3035	—	3057		3037	3057	ν
	5		2119	2113	2124		1989	2002	ν (C≡C)
	6		1597	1599	1592		1596	1590	Q
	7		1490	1488	1459		1489	1458	Q
	8		1192	1194	1215		1189	1210	Q, ν (C—C≡C)
	9		1178	1178	1196		1174	1195	δ
	10		1028	1029	1034		1023	1034	δ
	11		1000	1001	1002		998	1001	Δ, δ
	12		763	763	745		759	743	Δ, Q
	13		467	467	450		462	441	Δ, ν (C—C≡)
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C≡CH	14	B <sub>2</sub>	3101	—	3057	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> -C≡CD	3101	3062	ν
	15		3083	—	3057		3085	3060	ν
	16		1573	—	1572		1572	1572	Q
	17		1446	1443	1409		1443	1408	Q
	18		1332	1332	1331		1328	1331	Q
	19		1285	1284	1291		1279	1291	δ
	20		1158	1160	1156		1157	1156	δ
	21		1071	1070	1083		1069	1083	δ
	22		648	657	627		482	445	β (≡C—H)
	23		610	621	610		610	610	Δ
	24		516	517	491		529	551	β (C≡C)
25	—	351	166	344	156	β (C—C≡C)			

\* ν — вал. (C—H), Q — вал. (C—C), δ — деф. (C—H); Δ — деф. кольца.

В дальнейшем, используя эту систему постоянных, мы произвели уточнение постоянных каждой группы связей:  $C-C\equiv N$  и  $C-C\equiv CH$ , первоначальные значения которых были взяты из [4, 6]. В результате варьирования (в силовом поле бензольного кольца уточнялись только константы  $K_{\gamma_1}$ ,  $K_{\varphi}$  и  $A_{h_{1\gamma_1}}$ ) были получены следующие силовые постоянные (в ед.  $10^6 \text{ см}^{-2}$ ) для каждой группы:

$$I. K_{h_1} = 8.43, K_Q = 27.9, K_{\delta} = 0.72, K_{\gamma_1} = 2.40, K_{\varphi_1} = 2.345, A_{h_{1\gamma_1}} = -0.40;$$

$$II. K_{h_1} = 8.30, K_Q = 26.0, K_{\varrho} = 10.6, K_{\delta_1} = 0.52, K_{\delta_2} = 0.35, K_{\gamma_1} = 2.35, \\ K_{\varphi_1} = 2.645, A_{h_{1\gamma_1}} = -0.40.$$

В табл. 1, 2 приведены экспериментальные и рассчитанные значения частот, их отнесение и типы симметрии. Наблюдается удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных частот, за исключением частоты  $\nu_{23}$  для бензонитрила (и соответственно  $\nu_{25}$  для фенилацетилена), которая относится к деформационному колебанию группы  $C-C\equiv N$ .

В работах [1-3] в области деформационных колебаний групп  $-C\equiv CH$  и  $C-C\equiv N$  были найдены две полосы с частотами  $\sim 170$  и  $\sim 380 \text{ см}^{-1}$ , но полоса с частотой  $\sim 170 \text{ см}^{-1}$  была отнесена к колебанию  $B_1$ . В наших расчетах попытка приблизить частоту  $\nu_{23}$  в (I) и  $\nu_{25}$  в (II) к полосе  $380 \text{ см}^{-1}$  вызвала непомерно большое увеличение силового коэффициента. Таким образом, проведенный расчет показывает, если судить по формам колебаний и величине силовой постоянной, что к деформационному колебанию групп  $-C\equiv CH$  и  $C-C\equiv N$  скорее всего должны быть отнесены полосы с частотами соответственно  $165$  и  $170 \text{ см}^{-1}$ .

#### Литература

- [1] J. C. Evans, R. A. Nyquist. Spectrochim. Acta, 16, 918, 1960.
- [2] J. H. Green. Spectrochim. Acta, 17, 607, 1961.
- [3] R. J. Jacobsen. Spectrochim. Acta, 21, 127, 1965.
- [4] Л. А. Грибов. Введение в теорию и расчет колебательных спектров многоатомных молекул. Изд. ЛГУ, 1965.
- [5] Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. Колебательные спектры многоатомных молекул. Изд. «Наука», М., 1970.
- [6] Е. М. Попов, В. П. Рощупкин. Опт. и спектр., сб. № 2, 166, 1963.
- [7] М. А. Ковнер. ДАН СССР, 91, 499, 1953.
- [8] М. А. Ковнер, Б. Н. Снегирев. Опт. и спектр., 9, 170, 1960.
- [9] М. А. Ковнер, А. М. Боромолов. Опт. и спектр., 1, 564, 1956.
- [10] А. Н. Родионов. Ж. прикл. спектр., 10, 797, 1969.
- [11] А. Н. Родионов и др. Изв. АН СССР, серия хим., 5, 1047, 1969.
- [12] D. H. Whiffen. Phil. Trans. Roy. Soc., London, A248, 131, 1955.
- [13] J. D. Inker, J. Mills. Spectrochim. Acta, 24, 417, 1968.

Поступило в Редакцию 9 декабря 1970 г.

УДК 535.2

## К КИНЕТИКЕ ПРОЦЕССА САМОФОКУСИРОВКИ КОРОТКИХ СВЕТОВЫХ ИМПУЛЬСОВ

А. А. Колоколов и Г. В. Скроцкий

При рассмотрении самофокусировки коротких световых импульсов, длительность которых сравнима со временем установления нелинейной поляризации, необходимо учитывать различные переходные процессы, идущие в нелинейной среде. В данной работе оценивается величина поглощения света, связанного с релаксацией нелинейной поляризации, для случаев ориентационного эффекта Керра и для стрикции. Кроме того, определяется скорость прорастания оптического волновода для стрикционной нелинейности.

Для оценки поглощения используется простая модель осциллятора. Уравнение для усредненной проекции дипольного момента  $P$  одной молекулы на направление внешнего поля  $E_{вн.}$  можно записать в виде

$$\ddot{P} + 2\gamma\dot{P} + \omega_0^2 P = \alpha\omega_0^2 E_{д.} \quad (1)$$

где  $\gamma$  учитывает обычно поглощение,  $\alpha$  — статическая поляризуемость молекулы вдоль направления внешнего поля,  $\omega_0$  — собственная частота осциллятора,  $E_{д.} = E_{вн.} +$