

1977

J
2

87: 144023d Recombination of iodine atoms by flash photolysis over a wide temperature range. VIII. Molecular iodine in molecular oxygen. Antrim, R. E.; Burns, George; Ip, J. K. K. (Dep. Chem., Univ. Toronto, Toronto, Ont.). *Can. J. Chem.* 1977, 55(5), 749-56 (Eng). Flash photolysis of I_2 in a large excess of O_2 was studied between 300 and 1173 K. Between 573 and 1173 K the rate of at. recombination $2I(^2P_{3/2}) + O_2(^3\Sigma_g^-) \rightleftharpoons I_2(^1\Sigma_g^+) + O_2(^3\Sigma_g^-)$ was measured without interference of side reactions. Between 573 and 873 K there is an induction period lasting several hundred μs during which only a small net change in the I_2 concn. takes place. This induction period is consistent with the reaction $O_2(^1\Delta_g) + I_2 = O_2(^3\Sigma_g^-) + 2I$. Below 573 K, the

Unpublished
primary
to acceptor.
 O_2

C.A. 1977. 87 144023d

70325.6641

Ch, Ph, TC

У₂ (96200
номер
параметры)

1977

Х5-17507

Aten J. A., Lanting G. E. H., Los J.
The energy dependence of differential
cross sections for ion-pair formation
in Na, K, Cs + I₂ collisions. "Chem.
Phys.", 1977, 19, N 2, 241-251

(англ.)

0839 фнк

805 809

8.30

ВИНИТИ

70606.8723
Ch, Ph, TC

V(2) ; ⁴⁰³⁰²lit. ~~ill.~~ ^{paep.}
L₂

1977

40-18412

Bickes R.W., Jr, Bernstein R.B.

The SPF-Dunham expansion for the potential well: a regression model for systematic analysis of differential elastic beam scattering cross sections.
"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 6, 2403-2420

(англ.)

08.90 ~~англ~~

850 857 881

ВИНИТИ

γ
 γ_2

1977

Bhattacharyya S. P. et al

J. Phys. Chem. 1974, 78,

N16, 1602-1604 (ann.)

γ , u.n.

ca $\gamma_2 - 11$

72

B9-XI-5675

1977

88: 13960e Systematic hyperfine structure measurements in the B-X electronic transition of molecular iodine-127 by use of a CW dye laser. Brand, H.; Schulz, H. H.; Steudel, A. (Inst. A Experimentalphys., Tech. Univ. Hannover, Hannover, Ger.). *Phys. Lett. A* 1977, 63A(3), 235-6 (Eng). Hyperfine splitting in the ^{18}O , B-X band system of $^{127}\text{I}_2$ was measured by using laser mol. beam spectroscopy. The spectra were fitted to obtain the differences of both the quadrupole coupling and spin-rotation consts. and to derive predissocn. parameters.

B-X

Zeits.
ne/xog.

4.17.

C. A., 1977, LL, 12

ВФ-Х/5674

1977

72

М.И.

10 Б136. Систематические измерения сверхтонкой структуры в системе электронных полос $B-X^{127}\text{J}_2$. Brand H., Schulz H. H., Steudel A. Systematic hyperfine structure measurements in the $B-X$ electronic band system of $^{127}\text{J}_2$. «9th Annu. Conf. Eur. Group Atom. Spectrosc., Cracow, 1977. Sum. Contrib.» Cracow, s. a., 209—210 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера на красителе измерена СТС линии R (53) полосы 18—0 перехода $\text{B}^3\text{Po} + - \text{X}^1\Sigma_g +$ молекулы $^{127}\text{J}_2$. Измерена зависимость интенсивности резонансной флуоресценции модулированного, коллимированного молек. пучка йода от частоты возбуждающего лазерного излучения. Калибровку по частотам проводили с помощью доп. интерферометра Фабри-Перо. Определены константы ядерного квадрупольного и спин-вращательного взаимодействия.

В. М. Ковба

Х. 1978, N 10

J₂

ВР-Х1-5675

1977

6 Д506. Систематические измерения сверхтонкой структуры электронного перехода $B-X$ молекулы $^{127}\text{J}_2$ с использованием непрерывного лазера на красителе. Brand H., Schulz H. H., Steudel A. Systematic hyperfine structure measurements in the $B-X$ electronic transition of $^{127}\text{J}_2$ by use of a cw dye laser. «Phys. Lett.», 1977, A63, № 3, 235—236 (англ.)

М. Н.

Сверхтонкая структура перехода ^{18}O , $B-X$ молекулы $^{127}\text{J}_2$ исследована методом лазерной спектроскопии с использованием молекулярного пучка. В результате анализа полученных спектров определены: различия квадрупольных постоянных в основном и возбужден-

р. 1978, № 6

ных состояниях молекулы, спин-вращательные постоянные в возбужденных состояниях, а также параметры предиссоциации. Показано, что спин-вращательное взаимодействие в состоянии $J_2(V)$ удовлетворительно описывается эффективным гамильтонианом, предполагающим связь типа С по Гунду.

В. С. Иванов

1977
10 Б160. Систематические измерения сверхтонкой структуры электронного перехода $B-X$ $^{127}\text{J}_2$ с помощью лазера на красителе непрерывного действия Brand H., Schulz H. H., Steudel A. Systematic hyperfine structure measurements in the $B-X$ electronic transition of $^{127}\text{J}_2$ by use of acw dye laser. Phys. Lett., 1977, A63, № 3, 235—236 (англ.)

С помощью узкополосного (4 МГц) перестраиваемого лазера на красителе исследована сверхтонкая структура вращательных линий $R(29)$, $R(53)$, $P(86)$ и $P(98)$ перехода $B^3\Pi_{o+}(v'=18)-X^1\Sigma_g^+(v''=0)$ молекулы $^{127}\text{J}_2$. Измерялась интенсивность флуоресценции коллимированного (1:100) молек. пучка иода как функция частоты возбуждающего излучения. Для указанных четырех переходов получены постоянные квадрупольного взаимодействия ΔeQq (1930,8, 1930,2, 1928,4, 1932,8 МГц соотв.) и спин-вращательные постоянные c_1' (38,7, 40,0, 41,4, 40,8 кгц). Получены значения параметров преддиссоциации ($v'=18$) $|c_v'| = 9,8 \pm 4$ сек $^{-1/2}$ и $|a_v'| = 138 \pm 60$ сек $^{-1/2}$, $c_v' \times a_v' < 0$.

В. М. Ковба

Х. 1978, N 10

У₂

1977

Электронно-
графич.
исследов.

17 Б106 Деп. Электронографическое исследование молекулы J_2 при комнатной температуре. Бутаев Б. С., Гершиков А. Г. (Редколлегия ж. «Вестн. Моск. ун-та. Химия»). М., 1977. 15 с., библиогр. -19 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 26 мая 1977 г., № 2048—77 Деп.).

С целью калибровки модернизированного электронографа МГУ исследованы пары J_2 с ускоряющим напряжением 39 кВ при т-ре сопла ампулы 21°. Из спектроскопич. данных с помощью теории возмущений второго порядка рассчитаны параметры молекулы J_2 , к-рые сравнивались с экспериментальными.

Автореферат

2. 1977 IV. 17

1044

y
2

90:61616k Electron diffraction study of the iodine(I_2) molecule at room temperature. Butaev, B. S.; Gershikov, A. G. (Khim. Fak., Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). Deposited Doc. 1977, VINITI 2048-77, 16 pp. (Russ). Avail. VINITI. In an effort to calibrate the high-temp. electronograph, the electron diffraction by I_2 vapors at room temp. was studied. Systematic errors in detn. of mol. parameters are evaluated. For internuclear distances, the scaling errors, σ_s , exceed the error in detn. of the center of the electronogram, σ_c . For vibrational amplitudes, $\sigma_e > \sigma_s$.

(10^{-4})
Электронграф.



CA 1979, 90, N8

I_2
 Br_2

Bugrim E.D., Makrenko S.N. 1974
Tsikoka I.k. # 'Temperature Dependence
of Deactivation' efficiency for a
 $B^3\Pi_{0,4}$ state of iodine and bromine
molecules excited with He-Ne
Laser.

Opt. and Spectr., 1974, 43, 13, 424-73

Изучение квантовых процессов в молекулах
 $I_2(B^3\Pi_{0,4}, v'16)$ и $Br_2(B^3\Pi_{0,4}, v'17)$ с помощью

Можно безударной гезакриваши $\gamma_2(B^3P_{44} + 1\frac{1}{2})$

в диапазоне $T = 300 - 600 K$

Флуорес. паров при $T \leq 700 K$ при
возбуждении He-Ne лазером.

Заряд. кинетика. Сер. пути молекул Br_2

Скорость в зависимости от T

	$z \cdot 10^{10}$ см/с	z 600K	z 300K	T	$z \cdot 10^{16}$	z Å
He						
Ne	3,24	18 ± 2,3	23 ± 1	300	2,90	175 ± 7
Ar	2,54	30 ± 3,5	51 ± 7	403	3,22	166 ± 12
Kr	4,44	70 ± 8,0	95 ± 6	181	3,53	168 ± 13
Xe	2,80	58 ± 7	116 ± 8	578	2,95	148 ± 1
Br ₂	3,67	91 ± 12	150 ± 8	148	2,89	155 ± 14
				663	2,48	147 ± 17

J_2

1977

17 Б1531. Реакции $J_2(D^1\Sigma_u^+)$ и $J_2(^3\Pi_{2g})$. Механизм образования JO при импульсном фотолизе смесей J_2 и O_2 . Callear Anthony B., Metcalfe Martin P. Reactions of $J_2D^1\Sigma_u^+$ and $J_2^3\Pi_{2g}$. The mechanism of formation of JO in the flash photolysis of J_2 , O_2 mixtures. «Chem. Phys.», 1977, 20, № 2, 233—242 (англ.)

флуоресценция

Изучали флуоресценцию (Фл) паров J_2 из $^3\Pi_{2g}$ -состояния при 3400 Å, возбуждаемую неразложенным светом импульсной лампы. Добавки Ne, Ar или CF_4 приводят к сильному повышению интенсивности Фл. В опытах с оптич. фильтрами показано, что возбуждение

stod.
s. phy

Х. 1977 № 17

происходит светом 1800—2000 Å. Тушение Фл добавками O_2 и CO_2 обнаруживает заметные отклонения от ур-ния Штерна—Фольмера. Показано, что полученный в перв. акте $J_2(D^1\Sigma_u^+)$ в столкновительных процессах переходит в $J_2(^3\Pi_{2g})$ с константами скорости для различных газов, равными (10^{-12} см³/молекула·сек): Ne 1,88; Ar 8,2; CF_4 16,0. Дезактивация состояний $J_2D^1\Sigma_u^+$ и $^3\Pi_{2g}$ в соударениях с различными молекулами происходит со след. константами скорости (10^{-10} см³/молекула·сек) соотв.: O_2 0,96; 1,65; CO_2 0,96; 4,2; пропан ~5; ~9. Поглощение света 1800—2000 Å в смесях J_2-O_2 приводит также к образованию JO. Наиболее вероятны след. процессы его образования: $J_2(D^1\Sigma_u^+) + O_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow JO(X^2\Pi) + J(^2P_{3/2}) + O(^3P)$ и $O(^3P) + J_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow JO(X^2\Pi) + J(^2P_{3/2})$. Обнаружена новая система полос в спектре испускания JO с квантами при ~2015,5 Å (0,0-полоса), 1984,0 Å (1,0) и 2042,5 Å (0,1).
 В. Е. Скурат

1977

У
2

9 Д1011. Реакции $J_2(D^1\Sigma_u^+)$ и $J_2(^3\Pi_{2g})$. Механизмы образования JO при импульсном фотолизе смесей J_2 и O_2 . Callear Anthony B., Metcalfe Martin P. Reactions of $J_2D^1\Sigma_u^+$ and $J_2^3\Pi_{2g}$. The mechanism of formation of JO in the flash photolysis of J_2 , O_2 mixtures. «Chem. Phys.», 1977, 20, № 2, 233—242 (англ.)

возбужд.
состоянии.

С помощью импульсного фотовозбуждения исследованы люминесценция (Л) и фотохимич. реакции в парах J_2 . Найдено, что введение в реакционную систему посторонних инертных газов (Ne, Ar и CF_3) приводит к значительному усилению излучения $^3\Pi_{2g} \rightarrow ^3\Pi_{2u}$ около $\lambda = 340$ нм, в то время как молекулы O_2 и CO_2 оказывают тушащее действие на эту Л. Определена спек-

☒

①7JO (образов. при фотолизе)

☒

Ф 1977 №9

тральная область (180—200 нм), в которой происходит возбуждение J_2 . Показано, что первоначально образуется состояние $D_1\Sigma_u^+$ молекулы, J_2 , которое при столкновении дезактивируется до $^3\Pi_{2g}$. Оба состояния принимают участие в реакции с O_2 и CO_2 . Измерены основные константы скоростей спонтанной дезактивации возбужденного J_2 и взаимодействия его с посторонними газами. Установлен механизм образования JO при фотолизе смеси J_2 с O_2 . Определены энергии активации отдельных стадий указанной фотореакции. Проведено сравнение полученных эксперим. результатов с данными по импульсному радиолизу J_2 .

Т. А. Ш.

1977

Y0

I₂chemp
Y.P.

86: 163055m Reactions of $I_2 D^1\Sigma_u^+$ and $I_2 ^3\Pi_{2g}$. The mechanism of formation of iodine monoxide in the flash photolysis of molecular iodine, molecular oxygen mixtures. Callear, Anthony B.; Metcalfe, Martin P. (Phys. Chem. Dep., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *Chem. Phys.* 1977, 20(2), 233-42 (Eng). The fluorescence of I vapor was excited with white light from a flash lamp. Addn. of Ne, Ar or CF₄ gave rise to strong emission from $I_2 ^3\Pi_{2g}$ at ~ 3400 Å. Excitation occurs at 1800-2000 Å with optical filters. Quenching of the fluorescence by O₂ and CO₂ showed marked deviation from Stern-Volmer behavior. The anal. of the results demonstrates that $I_2 D^1\Sigma_u^+$, formed initially, is collisionally transferred to $I_2 ^3\Pi_{2g}$. Both states are removed in collision with O₂ and CO₂. Various rate coeffs. were measured, relative to the spontaneous decay rates. By using optical filters in the flash photolysis of I₂, O₂ mixts., the formation of IO is sensitized by light absorption at 1800-2000 Å. By studying the IO yields as a function of [O₂], [CO₂], and inert gas pressure, it was concluded that IO arises via a reaction of $I_2 D^1\Sigma_u^+$ with O₂, possibly by the steps: $I_2 D^1\Sigma_u^+ + O_2 X^3\Sigma_g^- \rightarrow IO X^2\Pi + I(^2P_{3/2})$, $O(^3P) + I_2 X^1\Sigma_g^+ \rightarrow IO X^2\Pi + I(^2P_{3/2})$. At low dispersion, a new system of IO was discovered in the UV.

C.A. 1977.

86 N 22

1977

I₂

(encirp)

88: 81414e Triple spectroscopy of iodine using a c.w. dye laser. Colles, M. J.; Marinero, E. E. (Dep. Phys., Heriot-Watt Univ., Riccarton/Edinburgh, Scot.). *Lasers Chem., Proc. Conf.* 1977, 101-6 (Eng). Edited by West, Michael A. Elsevier: Amsterdam, Neth. Simultaneous absorption, fluorescence and optoacoustic spectroscopy (triple spectroscopy) was studied in I₂. A low combination of optoacoustic and fluorescence yield, indicates significant spontaneous predissocn., and triple spectroscopy provides a more definitive method for detg. the appearance of weak predissocn.

C.A., 1978, 88, 112

1977

у
2

10 Д571. Спектр комбинационного рассеяния молекул йода, адсорбированных на поверхности платиновых электродов. Cooney R. P., Reid E. S., Hendra P. J., Fleischmann M. The Raman spectrum of adsorbed iodine on a platinum electrode surface. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 6, 2002—2003 (англ.)

Получен спектр комб. рас. молекул J_2 , адсорбированных на поверхности платиновых электродов из кислой среды ($2 \cdot 10^{-3}$ М КJ; 0,1 М H_2SO_4) при разности потенциалов между электродами, равной +500 мВ, и возбуждении лазерной линией 514,5 нм мощностью 130 мВт. Обнаружено, что при разности потенциалов ~700 мВ интенсивность линии 174 см^{-1} в спектре комб. рас. адсорбированного J_2 пренебрежимо мала. Проведено сопоставление спектров комб. рас. J_3^- , PtJ_4^{2-} , а также газообразных, кристаллич. и адсорбированных

С. К. Р

ф. 1977 № 10

на поверхности платиновых электродов молекул J_2 .
Предположено, что понижение частоты валентного колебания адсорбированных молекул J по сравнению с аналогичными значениями в спектре кристаллич. J_2 отражает изменение эффективности межмолекулярных взаимодействий при адсорбции J_2 . Сделан вывод, что уменьшение интенсивности линии 174 см^{-1} адсорбированного J_2 с ростом разности потенциалов обусловлено поглощением возбуждающего и рассеянного излучений молекулами J_3^- в электролите. Библ. 12. И. В. А.

Оттиски 5766

1977

У
2

12 Д332. Прямое экспериментальное доказательство сверхтонкой преддиссоциации молекулярного иода методом насыщенного поглощения. Couillaud B., Ducasse A. Direct experimental evidence of the hyperfine predissociation of molecular iodine using a saturated absorption experiment. «Opt. Commun», 1977, 21, № 2, 199—204 (англ.)

н/с диссоц.

Методом насыщенного поглощения с использованием стабилизированного лазера на красителе исследована сверхтонкая структура некоторых линий в полосах 9—3; 10—3; 11—3; 11—4 и 12—3 системы В—Х-молекулярного иода. Показано, что интенсивности различных сверхтонких компонент одной линии не пропорциональны $2F+1$ тем больше, чем ближе значение ν' к 6, при котором наблюдается пересечение потенциальных кривых состояний $^3\Pi_0^+$ и $^1\Pi$. Предварительные эксперим. результаты, касающиеся зависимости интенсивности сверхтонких компонент от квантовых чисел ν' , J и F дают прямые доказательства наличия недавно описанной сверхтонкой преддиссоциации молекулы I_2 .

88.56-1X-25

Ф. 1977 N 12

ценного поглощения. Насыщающие и пробные пучки поперечно поляризованы и полностью коллинеарны, что позволило устранить эффект Доплера (ширина линий СТС ~ 1 МГц). Источником служил перестраиваемый лазер на красителе непрерывного излучения (5750—6260 Å). В полосах с $\nu' = 10$ —12 интенсивность компонент СТС пропорциональна $2F' + 1$ ($F = J + M_1 + M_2$, M_1 и M_2 — проекции I_1 и I_2 на направление J), однако в случае полосы 9—3 наблюдалось аномальное распределение интенсивности, причем с ростом J' возмущения возрастали. Относит. интенсивность линий слабо зависела от давл. паров (0,01—0,2 мм) нода в ячейке и не зависела от относит. поляризации пробного и насыщающего пучков. Полученные данные рассматриваются как прямое эксперим. подтверждение существования сверх-

тонкой предиссоциации нода, связанной с взаимодействием состояния $B^3\Pi_0^+$ и континуума I_n -состояния.
В. М. Ковба

70425.8819
Ch, Ph, TC, MGU

41125
I₂ (ell. h.)

1977
XI-5357

Gerstenkorn S., Luc P., Perrin A.

Rotational analysis of the 5350 Å band of
iodine by means of Fourier transform
spectroscopy.

"J. Mol. Spectrosc.", 1977, 64, N 1, 56-69

(англ.)

40

0859 пж

824 829

050

ВИНИТИ

Y₂

ommueu 5498

1974

Dalby F. W., et al.

u.n.

Can. J. Phys., 1974,
55, 1033 - 1046

24 Б149. Последовательная двухфотонная адсорбционная спектроскопия молекулы иода. Danu-
luk M. D., King G. W. Two photon sequential ab-
sorption spectroscopy of the iodine molecule. «Chem.
Phys.», 1977, 22, № 1, 59—70 (англ.)

Описаны аппаратура и методика эксперимента, ис-
пользуемые в последовательной двухфотонной адсорбц.
спектроскопии. Суть метода заключается в след. ла-
зером накачки с перестраиваемой частотой селективно
возбуждаются нек-рые уровни низколежащего состоя-
ния, с к-рого под действием излучения другого ла-
зера с перестраиваемой частотой происходят переходы
в конечное состояние. Этим методом исследованы элек-
тронные состояния молекулы иода в области энергий
5 эв. Лазером накачки селективно возбуждались вра-
щательные уровни состояния $B(O_u^+)$. В наблюдаемых
спектрах идентифицированы пять колебательных про-
грессий, отнесенные к различным электронным состоя-
ниям иода. Для каждого электронного состояния оп-
ределены энергия электронного перехода T_e и колеба-
тельные постоянные ω_e , $\omega_e x_e$ и $\omega_e y_e$. Из анализа двух
наиболее интенсивных прогрессий γ и ϵ вычислены

1977

У
2

М.И.

х. 1977
N 24

вращательные постоянные B_e и α_e , к-рые равны (в см^{-1}): $B_e^\gamma = 1,9664 \cdot 10^{-2}$, $\alpha_e^\gamma = 1,79 \cdot 10^{-5}$, $B_e^e = 2,153 \cdot 10^{-2}$ и $\alpha_e^e = 5,07 \cdot 10^{-5}$. Установлено, что электронные состояния γ и e имеют O_g^+ симметрию, тогда как остальные три (α, β, δ) симметрию O_g^+ или I_g^+ . А. М. Шаповалов.

что

1977

Y
2

12 Д333. Спектроскопия двухфотонного последовательного поглощения молекул иода. Danu-
luk M. D., King G. W. Two photon sequential absorp-
tion spectroscopy of the iodine molecule. «Chem.
Phys.», 1977, 22, № 1, 59—70 (англ.)

M. H.

Исследованы спектры двухступенчатого возбуждения молекулярного иода. В качестве источников возбуждающего излучения использованы два лазера на растворах органич. красителей (ЛК) с независимой перестройкой частоты. Один ЛК осуществлял накачку отдельных вращательно-колебательных подуровней возбужденного состояния $B(0_u^+)$, а частота другого

Р. 1977, N 12

ЛК сканировалась для выявления переходов с этих подуровней в более высокорасположенные (в диапазоне 5 эв) возбужденные состояния. Противоположное распространение возбуждающих лучей позволило частично компенсировать доплеровское уширение исследуемых переходов. Обнаружено и проанализировано пять колебательных прогрессий, получены значения колебательных и вращательных констант, а также величины равновесных межъядерных расстояний для всех пяти электронных состояний со связью ионного типа. Два из них идентифицированы как состояние 0_g^+ , остальные как 0_g^+ или 1_g^+ . Библиография. 26. Х. В.

BP-XI-5736

1977

J₂

(20)

88: 13936b Energy levels of iodine near the B state dissociation limit. Danyluk, M. D.; King, G. W. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *Chem. Phys.* 1977, 25(3), 343-51 (Eng). By means of 2 photon sequential absorption spectroscopy, in which a mol. such as I₂ is excited from the ground X to an intermediate B to an upper E electronic state, it is possible to excite selectively rotational band structure for the B ← X transition up to within 0.5 cm⁻¹ of the dissociation limit D for the transition. The amt. of rotational structure which can be obsd. depends on the ratio of the bandwidth of 1 of the exciting dye lasers to the rotational const. in the E vibronic state, and this ratio can be varied to change the observable rotational line d. and complexity. The B-X I₂ transition was analyzed near dissociation by this technique under extremely high resn. An improved value $D = 20,043.063 \pm 0.020$ cm⁻¹ was obtained, as well as values for the consts C₅, C₆ and C₈ in the long-range potential out to an internuclear sepn. of 15 Å.

C.A. 1978 88, N2

J₂

ВВ-Х/5736

1977

4 Д324. Энергетические уровни молекулы йода в области диссоциационного предела состояния В. Danyluk M. D., King G. W. Energy levels of iodine near the B state dissociation limit. «Chem. Phys.», 1977, 25, № 3, 343—351 (англ.)

Энергетические уровни молекулы йода вблизи диссоциационного предела состояния В (вплоть до уровней, отстоящих на $\sim 0,5 \text{ см}^{-1}$) исследованы методом спектроскопии последовательного двухфотонного поглощения с использованием переходов $X \rightarrow B$, $B \rightarrow E$ и $B \leftarrow E$. Показано, что кол-во линий вращательной структуры, наблюдаемое в спектрах, зависит от соотношения ширины полосы излучения одного из возбуждающих лазеров и вращательной постоянной молекулы J₂ в состоянии E. Возможность менять это соотношение, а следовательно, и плотность вращательных линий, существенно упрощает интерпретацию спектра. Уточнено значение энергии диссоциации состояния В молекулы J₂. $D = (20043,063 \pm 0,020) \text{ см}^{-1}$. Определены значения постоянных C₅, C₆ и C₈ дальнедействующего потенциала молекулы J₂(В) при межъядерных расстояниях до 15 Å. Библ. 14.

В. С. Иванов

сп. № 4, 1978

ВФ-Х1-5736

1944

8 Б107. Уровни энергии иода вблизи диссоциационного предела состояния В. Danyluk M. D., King G. W. Energy levels of iodine near the B state dissociation limit. «Chem. Phys.», 1977, 25, № 3, 343—351 (англ.)

Методом двухфотонного поглощения исследованы переходы системы $B^3\Pi_{ou}^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы I_2 в состоянии с $\nu_B = 77-82$ (на $5-0,5 \text{ см}^{-1}$ ниже диссоциац. предела для состояния $B^3\Pi_{ou}^+$). Использованы два узкополосных перестраиваемых лазера на красителях. Первый, накачивающий (сканирование давлением, ширина полосы на выходе $< 0,07 \text{ см}^{-1}$), возбуждал, переходы из основного состояния в состояние $B^3\Pi_{ou}^+$; второй, пробный (мех. сканирование, ширина полосы $\sim 1,5 \text{ см}^{-1}$) — переходы с высоколежащих колебательных уровней состояния $B^3\Pi_{ou}^+$ на один из электронно-

М.П. 20

2, №8, 1948

колебательных уровней какого-либо из пяти электронных состояний (E) с энергией 5,0—5,5 эв. При фиксированной пробной частоте осуществляли сканирование накачивающей частоты и измеряли интенсивность $E \rightarrow B$ флуоресценции. Определены энергии колебательных уровней B -состояния с $v = 77—82$. Проведена совместная обработка полученных результатов и данных по электронному спектру поглощения (переходы с $v_B \leq 77$), в результате которой получены уточненное значение энергии диссоциации $D_B = 20\,043,063 \pm \pm 0,020 \text{ см}^{-1}$ и параметры дальнего действующего потенциала вида $V = D - \sum_{m \geq n} C_m / r^m$ ($C_5 = 2,776 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ $\text{\AA}^5$, $C_6 = 17,8 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1} \text{\AA}^6$, $C_8 = 243 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1} \text{\AA}^8$, $8,0 \text{\AA} \leq r_v \leq 15,3 \text{\AA}$).

В. М. Ковба



X 9 - 18851

1974

У₂

18 Б9. Структура молекулярных эффективных потенциалов в соединениях тяжелых элементов с применением к молекуле J_2 . Ewig Carl S., Osman Roman, Van Wazer John R. The structure of molecular effective potentials in compounds of heavy elements, with application to J_2 . «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 8, 3557—3561 (англ.)

теория
псевдо-
потенциала

Кратко изложена стандартная формулировка теории псевдопотенциала Филипса—Клейнмана (ПФК), обсуждены ее достоинства и трудности, возникающие в случае применения к молекулам с несколькими валентными электронами. Введен модифицированный ПФК (МПФК), позволяющий избежать этих трудностей, но являющийся неэрмитовым. Однако, недиагональные матричные элементы МПФК в базисе МО, по крайней мере, на два порядка меньше диагональных элементов. С учетом этого обстоятельства использовано диагональное приближение для МПФК. Все члены фокиана, включающие координаты электронов остова, заменены локальным модельным потенциалом (МП), содержащим только координаты валентных электронов. Предложен наиболее общий способ построения МП на основе требования

X. 1974
N 18

эквивалентности действия истинного и модельного фокианов на псевдоволновые функции. Этот способ не связан с аппроксимацией МП какой-либо аналитич. функцией и требует решения ур-ний Хартри—Фока для атомов. При этом кач-во локального МП не зависит от размеров базиса, используемого при получении приближенных хартри-фоковских решений. С целью проверки изложенной более строгой формулировки теории псевдопотенциала проведены расчеты в миним. базисе для молекулы J_2 . Результаты, полученные с использованием ПФК и МПФК, сравнивались с полным хартри-фоковским расчетом. Применение МПФК приводит к наилучшему согласию, причем замена строгого МП аналитич. аппроксимацией сравнительно мало влияет на результаты.

А. В. Абраменков

1977

У2

1963. Возмущение молекулярного йода в паровой фазе в присутствии молекул примесей и последствия этого эффекта в стабилизации He—Ne-лазера. Flo-ry G., Broyer M., Vigue J., Lehmann J. C. Perturbation de l'iode moléculaire en phase vapeur par la présence de gaz étrangers. Conséquence pour la stabilisation du laser He—Ne. «Rev. phys. appl.», 1977, 12, № 5, 901—904 (франц.; рез. англ.)

Методами магнитной деполяризации флуоресценции (эффект Ханла) и изучения кинетики затухания флуоресценции после ее импульсного возбуждения изучали зависимости константы скорости γ дезактивации уровня $B^3\Pi_0^+$ ($V'=62$, $J'=27$) молекулы J_2 от давл. паров

J_2 при различных режимах заполнения оптич. кювет. парами $^{127}J_2$ высокой чистоты. В кач-ве источника возбуждения применяли лазер на ионах Ar^+ (5017 Å).

X. 1977 N 19

Обнаружены различия этих зависимостей, связанные с влиянием примесей в кюветах. Предложен метод заполнения кювет парами J_2 , позволяющий снизить содержание примесей и получать воспроизводимые значения γ_0 (величина γ , найденная экстраполяцией к нулевому давл. паров J_2), равные $7(\pm 1) \cdot 10^4$ сек $^{-1}$. Полученные данные важны для усовершенствования стандартов длины волны на основе одномодового He—Ne-лазера (6328 А), в к-рых для стабилизации частоты применяют насыщение на пике поглощения в парах J_2 . Даны оценки влияния примесей в J_2 на точность стабилизации.

В. Е. Скурат

B9-XT-5357

1977

86: 48867r Rotational analysis of the 5350 Å band of iodine by means of Fourier transform spectroscopy. Gerstenkorn, S.; Luc, P.; Perrin, A. (Lab. Aime Cotton, CNRS II, Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 64(1), 56-69 (Eng). The 5350 Å (30,0) band of the I spectrum was recorded with high resolu. by means of Fourier transform spectroscopy. The rotational lines in the *P* and *R* branches were measured to $J = 165$ with ref. to U stds. emitted by a hollow cathode. The differences between the 2 sets of measurements were less than 0.001 cm^{-1} , and the std. deviation between the obsd. wavenos. and those calcd. with the spectroscopic consts. B_v , D_v , and H_v is 0.0007 cm^{-1} . The precision reached is an order of magnitude greater than in previously published data, and the consts. H_v of the I absorption spectrum have been detd. for 1st time. This work shows that the use of Fourier transform spectroscopy is particularly powerful for mol. absorption studies in the visible region where, although the multiplex gain is lost, the throughput gain remains, and this enables the performance to approach that achieved in the IR. This method can be expected to open up not only significant new spectroscopic expts., but it also allows a complete high-precision measurement of the existing mol. spectra in the visible and UV (electronic rotational-vibrational transitions).

J2

y. q.
encrip

C. A. 1977.

86 N 8

У 2

1977

У 8 Д414. Вращательный анализ полосы 5350 Å йода методами спектроскопии с преобразованием Фурье Gerstenkorn S., Luc P., Perrin A. Rotational analysis of the 5350 Å band of iodine by means of Fourier transform spectroscopy. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 64, № 1, 56—69 (англ.)

Получены спектры поглощения паров йода в области 535 нм с разрешением $0,025 \text{ см}^{-1}$. Регистрация спектров произведена с помощью фурье-спектрометра на $4 \cdot 10^5$ точек, перемещение его подвижного зеркала синхронизировалось лазером на He—Ne, стабилизированного лэмбовским провалом. Калибровка частот выполнена по спектрам излучения и уранового полого катода. Наблюденные линии отнесены к полосе $30,0$ электронного перехода $B^3\Pi_{0u} - X^1\Sigma_g$. Приведены частоты линий с J до 165; по этим величинам рассчитаны молекулярные постоянные с точностью на порядок выше прежней, причем константа H определена впервые. Сделан вывод о перспективности методов фурье-спектроскопии в видимой области. Библ. 24.

М. Тонков

Мин.

ф. 1977
N 8

5354
XV - 5354
5354

У
17 Б171. Анализ вращательной структуры полосы 5350 Å йода с помощью фурье-спектроскопии. Gerstenkorn S., Luc P., Perrin A. Rotational analysis of the 5350 Å band of iodine by means of Fourier transform spectroscopy. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 64, № 1, 56—69 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра измерена вращательная структура ($I \leq 165$) полосы (30,0) перехода $B^3\Pi_{0u} + -X^1\Sigma_g +$ молекулы J_2 . В кач-ве стандарта использованы линии урана (полый катод). Применение фурье-спектроскопии позволяет на порядок увеличить точность измерений линий вращательной структуры полос электронно-колебательных спектров в видимой и УФ-области. Получены след. значения вращательных постоянных $B_{30'}$, B_0'' , $D_{30'}$, D_0'' , $H_{30'}$, H_0'' , $B_0'' = B_{30'}$, $D_{30'} - D_0''$ (см^{-1}) — $0,0228367 \pm 30$, $0,0373115 \pm 30$, $(14,80 \pm \pm 0,20) \cdot 10^{-9}$, $(4,55 \pm 0,20) \cdot 10^{-9}$, $-37,4 \cdot 10^{-15}$, $-0,76 \cdot 10^{-15}$, $0,0144748$, $10,25 \cdot 10^{-9}$. Результаты сопоставляются с данными по электронно-колебательно-вращательным спектрам поглощения и испускания J_2 , полученными обычными спектральными методами. В. М. Ковба

Х. 1977 № 14

1977

7585-11-5854

Fe-lazer

[ошн. 5303]

1977

(аз. и. ^{кыш} физик.
корис. зорго)

Hartmann B., et al.

Optics commun., 1977,
21, N1, 33-8

70607. 1535

30066

1977

Ph, TC, MGU

L2

INT. 5260

Gray D.R., Baker H.J., King T.A.

Atomic absorption of thermally dissociated
iodine for laser applications. "J. Phys.

D: Appl. Phys.", 1977, 10, N 2, 169-177

(англ.)

0890 ПМК

837 847 8 8 1

ВИНИТИ

J₂

[OMM 5284]

1947

(изерн. возд.
гр. черк.)

Jeyes S. R., et al

Chem. Phys. Lett. 1977,

48, N1, 91-4

1977

J₂

№ 4 Д603. Лазерная спектроскопия и преддиссоциация молекул. Lehmann J. C. Laser spectroscopy and predissociations of molecules. «Atom. Phys. Vol. 5». New York—London, 1977, 167—178 (англ.)

На примере молекулы J₂ продемонстрированы некоторые возможности лазерной спектроскопии при исследовании процессов преддиссоциации. Подробно проанализированы данные систематич. измерений времен жизни индивидуальных уровней во вращательных и колебательных сериях состояния J₂ (B³Π₀₊⁺). Показа-

но, что на основании таких данных можно получить информацию о механизме процесса преддиссоциации. Для молекулы J₂ (B³Π₀₊⁺), наряду с известной вращательной преддиссоциацией, впервые обнаружена преддиссоциация за счет сверхтонкого взаимодействия. Отмечено, что последняя может найти применение для разделения изотопов. Приведены значения констант скоростей излучения и преддиссоциации для

лазерная
спектроскопия

97, № 4, 1978

уровня $J_2(B^3\Pi_{0+}, v=7)$, скорость преддиссоциации которого близка к максимуму: скорость излучения $(1,1 \pm 0,1) \cdot 10^6 \text{ сек}^{-1}$, скорость вращательной преддиссоциации $\sim 10^6 \text{ сек}^{-1}$ для $J=60$ и скорость сверхтонкой преддиссоциации $(0,5 \div 8) \cdot 10^6 \text{ сек}^{-1}$ (в зависимости от I, J и F). Рассмотрены индуцированная магн. полем преддиссоциация и интерференционные эффекты. Показано, что используя квантовомеханич. эффекты интерференции состояний можно зарегистрировать очень слабую преддиссоциацию, т. е. преддиссоциацию со временем, значительно превышающим радиационное время жизни. Для некоторых уровней молекулы $J_2(B^3\Pi_{0+})$ малые скорости преддиссоциации определены с использованием эффекта интерференции магнитной и вращательной преддиссоциации. При этом привлекались данные о циркулярной поляризации флуоресценции в магн. поле. Показано, что при точности измерения поляризации $\sim 1\%$ можно зарегистрировать преддиссоциацию, скорость которой составляет $\sim 10^{-4}$ от скорости излучения.

В. С. Иванов

γ_2

summa 5757

1977

Lowe J. P.

J. Amer. Chem. Soc.,
1977, 99, (17), 5557-70.

($A\bar{e}; \gamma$)

1977

16 Б164. Изучение переноса момента количества движения при упругих, неупругих и реактивных соударениях с помощью возбуждаемой лазером циркулярно поляризованной флуоресценции. McCaffery A. J., Jeyes S. R., Rowe M. D. Katô H. Transfer of angular momentum in elastic, inelastic, and reactive collisions from circularly polarised laser fluorescence. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1977, 81, № 2, 225—228 (англ.)

Циркулярно поляризованный резонансный свет лазера возбуждал молекулы йода из состояния $1\Sigma_g^+$, $v=C$, $J=0$ в состояние $3\Pi_0 u^+$, $v=16$, $J=34$ с селективным небольшим заселением M -подуровней. В области $17\,090\text{--}17\,070\text{ см}^{-1}$ в излучении наблюден $P(35)$, $P(33)$ дублет с противоположной круговой поляризацией компонент. В результате соударений происходил

X. 1977. N16

перенос энергии возбуждения на уровни с др. значениями J . Возникающие P и R -ветви исследованы в области $17\,100\text{--}16\,900\text{ см}^{-1}$. Они сохраняют высокую степень поляризации, что указывает на анизотропию распределения по M -подуровням. При упругих соударениях имеет место эффект реориентации, проявляющийся в сохранении поляризации при высоких давлениях и при высоких J . Построена кривая зависимости степени поляризации линий $P(J)$ от J . Получен спектр излучения Li_2 . Линии P -, R -ветвей циркулярно поляризованы, а линии Q -ветви очень слабо поляризованы. В результате реактивных соударений $\text{Li}\text{--}\text{Li}_2$, сопровождающих возбуждение $R(30)$, возникает дублет $Q(30)$, $Q(32)$.

М. Ковнер

72

1977

3 Д291 Д. Исследование спектра поглощения йода в области $18\,000\text{--}19\,000\text{ см}^{-1}$ методами спектроскопии с преобразованием Фурье. Perrin-Baland Agnès. Etude du spectre d'absorption de l'iode entre $18\,000$ et $19\,000\text{ см}^{-1}$ par la méthode de spectroscopie par transformée de Fourier. Thèse doct. Univ. Paris-Sud, 1977. Var. pag., ill. (франц.)

Спектр
поглощения

Получены спектры поглощения паров йода в видимой области в интервале $18\,000\text{--}19\,000\text{ см}^{-1}$ с высоким разрешением. Для регистрации спектра использован фурье-спектрометр. Приведены частоты и отнесение колебательно-вращательных линий. Вычислены вращательные постоянные вплоть до H для высоковозбужденных состояний молекулы с колебательными числами от 24 до 34. Рассмотрены достоинства и недостатки спектроскопии с преобразованием Фурье в условиях шумов регистрирующей системы и шумов источника. Выполнен анализ ошибок.

М. Тонков

ор. 1979, N3

У
2

1977

Спектр
поглощения

11 Д498. Абсорбционная спектроскопия с использованием перестраиваемых лазеров на красителях. Popescu Denisa, Stănciulescu C., Bobulescu R., Brătescu Maria-Antoaneta, Popescu Iovit I. Absorption spectroscopy with tunable dye lasers. «An. Univ. București. Ști. natur.», 1976, 25, 27—33 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера на красителе и дифференциальной оптич. системы исследован видимый спектр поглощения паров J_2 в области длин волн 5930—5800 Å. В спектре обнаружены 15 полос. Для трех из них ($17002,85 \text{ см}^{-1}$, $16999,96 \text{ см}^{-1}$ и $16990,84 \text{ см}^{-1}$), идентифицированы линии P - и R -ветвей до $J=50$. Описана аппаратура. Библ. 17.

Ф. 1977 № 11

У
2

1977

У 13 Б134 Д. Систематическое изучение сверхтонкой структуры в электронном переходе $B^3\Pi_{0+u}-X^1\Sigma_g^+$ $^{127}\text{J}_2$ с использованием непрерывного лазера на красителе. Schulz H. H. Systematische Hyperfeinstrukturuntersuchungen im $B^3\Pi_{0+u}-X^1\Sigma_g^+$ elektronischen Übergang von $^{127}\text{J}_2$ unter Verwendung eines cw-Farbstofflasers. Diss. Dokt. Naturwiss. Fak. Math. Naturwiss. Techn. Univ. Hannover, 1977. 61 S., (нем.)

Сконструирована установка для измерения линий сверхтонкой структуры в электронно-колебательно-вращательном спектре молекулы $^{127}\text{J}_2$ в высококоллимированном газовом потоке с использованием лазера на красителе. Измерены спектры флуоресценции $^{127}\text{J}_2$, свя-

М. Н.

Д. 1979, N 13

занные с переходом $v' = 8 - v'' = 0$ системы $B^3\Pi_{0+u} - X^1\Sigma_g^+$, возбуждаемые лазером. Создана программа расшифровки спектра, учитывающая квадрупольное взаимодействие до 2 порядка включительно, а также спин-орбитальное взаимодействие. С помощью этой программы проведен анализ измеренной структуры и определены разности констант квадрупольного и спин-орбитального взаимодействия. Из анализа соотношения интенсивностей между компонентами сверхтонкой структуры определены параметры естественной и сверхтонкой предиссоциации. Предложено новое теор. рассмотрение предиссоциационного взаимодействия в электронном переходе $B-X$ молекулы $^{127}\text{J}_2$. Библ. 50. С. Б. Осин

Y₂

number 5662

1977

comm. NY to name Simmons

check

86: 197212a Atlas of molecular iodine spectrum from 19 000 to 18 000 cm^{-1} , Simmons, J. D.; Hougen, J. T. (Inst. Basic Stand., Natl. Bur. Stand., Washington, D. C.). J. Res. Natl. Bur. Stand., Sect. A 1977, 81A(1), 25-80 (Eng). A line identification band atlas is presented for $\mu\text{-}1000 \text{ cm}^{-1}$ segment, from 19,000 to 18,000 cm^{-1} , of the mol. I absorption spectrum. Each page of the atlas covers a 20 cm^{-1} region of the spectrum and contains a CALCOMP-produced photodensitometer trace of the spectrum together with accompanying tabular identification data. The tabular data includes: line identification nos., obsd. wavenos., calcd. wavenos., and rotational and vibrational assignments.

C.A. 1977. 86 N26

J₂

Оттиск 5662

1977

1 Д348. Атлас спектра J₂ от 19 000 до 18 000 см⁻¹
Simmons J. D., Hougen J. T. Atlas of the J₂ spectrum from 19 000 to 18 000 cm⁻¹. «J. Res. Nat. Bur. Stand.», 1977, A81, № 1, 25—80 (англ.)

Приведены измеренные и рассчитанные волн. числа линий, их колебательно-вращательное отнесение, а также фотоденситометрич. диаграммы видимого спектра поглощения молекулы J₂ в области 19 000—18 000 см⁻¹ (переход $B^3\Pi_{ou}^+ - X^1\Sigma_g^+$), сфотографированного с разрешением ~350 000.

В. С. Иванов

отт. № 4 в напек Simmons

ф. 1978 № 1

атлас
спектра

У
2

Оттиск 5662
отт. № 4 в каталоге Simmons

1977

2 Б148. Атлас спектра J_2 от 19 000 до 18 000 см^{-1} .
Simmons J. D., Hougen J. T. Atlas of the I_2
spectrum from 19 000 to 18 000 см^{-1} . «J. Res. Nat. Bur.
Stand.», 1977, A81, № 1, 25—80 (англ.)

С высоким разрешением измерен спектр поглощения
йода в области 19 500—17 700 см^{-1} . Табулированы вол-
новые числа отдельных линий в диапазоне 19 000—
18 000 см^{-1} и дано их отнесение по ν' , ν'' и I . Проана-
лизирована вращательная структура каждой индиви-
дуальной (ν' , ν'') полосы, определены и приведены зна-
чения B' , B'' , D' , D'' , H' и H'' .

В. М. Ковба

М. П.

х, 1978, № 2

I₂

ommu 5662

1977

Atlas of the I₂ spectrum from 19 000 to 18 000 cm⁻¹, J. D. Simmons and J. T. Hougen, *J. Res. Nat. Bur. Stand. (U.S.)*, 81A (Phys. and Chem.), No. 1, 25-80 (Jan.-Feb. 1977).

OTUAC

Key words: high-resolution spectrum; iodine spectrum; line identification atlas; rovibronic assignments; spectral analysis; visible absorption spectroscopy.

A line identification band atlas is presented for a 1000 cm⁻¹ segment, from 19 000 to 18 000 cm⁻¹, of the molecular iodine absorption spectrum. Each page of the atlas covers a 20 cm⁻¹ region of the spectrum and contains a CALC MP produced photodensitometer trace of the spectrum together with accompanying tabular identification data. The tabular data include: line identification numbers, observed wavenumbers, calculated wavenumbers, and rotational and vibrational assignments.

Publ. NBS

1977 omu, W. D. Hance Simmons

1974

У₂

7 Б1048. Наблюдение (0—0)-перехода $B \leftarrow X$ в молекуле J_2 . Smalley Richard E., Wharton Leonard, Levy Donald H. Observation of the $B \leftarrow X$ (0—0) transition in J_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1977, 51, № 2, 392—394 (англ.)

изучено

$B \leftarrow X$

При возбуждении непрерывным перестраиваемым лазером на красителе (родамин В) J_2 в сверхзвуковом потоке в смеси с He наблюдается 0—0 полоса излучательного перехода $B \leftarrow X$. Оценена величина франк-кондоновского фактора этой полосы $\sim 2 \cdot 10^{-9}$. Предпринятая попытка наблюдения флуоресценции ван-дер-ваальсовского комплекса HeJ_2 не увенчалась успехом либо вследствие очень малой величины франк-кондоновского фактора, либо вследствие столкновительной диссоциации HeJ_2 в возбужденном состоянии.

Г. К. Васильев



20.10.1978

1977

Y₂

See checkp (B ← X)

87: 209053k Observation of the B ← X (0-0) transition in molecular iodine. Smalley, Richard E.; Wharton, Lennard; Levy, Donald H. (James Franck Inst., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 51(2), 392-4 (Eng). The 0-0 band of the B ← X visible spectrum of I₂ was obsd. in spite of its very small Franck-Condon factor. The expected satellite band of the van der Waals mol. HeI₂ was not obsd., and a mechanism is suggested to account for the absence of the van der Waals spectrum.

C.A., 1977, 87, 126

У
2

1977

спектр
флуоресценции
(в CCl_4)

9 Б84. Пикосекундное возбуждение $\text{B} \rightarrow \text{X}$ излучения J_2 в растворе CCl_4 . Ультрабыстрое затухание и спектр. Struve W. S. Picosecond excitation of J_2 $\text{B} \rightarrow \text{X}$ emission in CCl_4 solution: ultrafast decay and spectrum. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 51, № 3, 603—606 (англ.)

Изучены спектр флуоресценции и кинетика затухания р-ра J_2 в CCl_4 при возбуждении $\text{B}^3\Pi_{0+u}$ состояния лазерным одномодовым 531 нм ~ 8 псек импульсным излучением. Показано, что в отличие от чисто резонансного спектра в изученном случае при возбуждении излучением 514,5 нм Ar^+ -лазера проявляется резонансный спектр КР.

О. Г. Гаркуша

2. 1978 № 9

3
2

Таманис М.Я., Фербер Р.С,
Шмит О.А.

1977

Св. Сенсибилизированная дру-
жественная емсей паров
медальон Риза, Лав. Ун.С, 1977
8-6, стр. 116

Дорогой Лёня — извинения
сказать моя рука и плечо
у ватмана встало
дальше моя я.

70422.7515
Ph, Ch, TC

30526GR

1977

Г₂ (кб. мех. пасть)

45-18035

K p.N. 70422.7514

Teichteil Ch., Malrieu J.P.,
Barthelat J.C.

Non-empirical pseudopotentials for molecular calculation. II. Basis set extension and correlation effects on the X₂ molecules (X=F, Cl, Br, I).

"Mol. Phys.", 1977, 33, N 1, 181-197
(англ.)

(см. F₂ III)

813 816

850

0859

ВИНИТИ

Y₂

BP-XI-5612

1977

87: 92753v A CI non-empirical pseudopotential calculation of the vertical valence excited states of the iodine molecule. Teichteil, Christian; Malrieu, Jean Paul (Lab. Phys. Quantique, Univ. Paul Sabatier, Toulouse, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 49(1), 152-6 (Eng). The non-empirical at. pseudopotential proposed by Ph. Durand and J. C. Barthelat (1975) was used, together with the CIPSI algorithm for large scale CI, to calc. the vertical transition energies of the I mol., in a valence extended (double-zeta + d) basis set. All the valence excited states were considered. The mixing of configurations is very important esp. for the Σ_g^+ , Π_g and Π_u symmetries. The exptl. known transition energies are calcd. within a 1 eV error, despite the lack of diffuse orbitals and spin-orbit interaction. Some qual. Mulliken's ests. are discussed. A new $^3\Sigma_g^+$ state arising from the $10\sigma_u \rightarrow 11\sigma_u$ single excitations is predicted in the 9 eV region.

($3 \Sigma_g^+$ coer.)

C. D. 1977. 87 XI 2

У
2

89-XI-5612

1974

23 Б15. Расчет вертикальных валентных возбужденных состояний молекулы иода неэмпирическим методом КВ с использованием псевдопотенциала. Teichteil Christian, Malrieu Jean Paul. A CI non-empirical pseudopotential calculation of the vertical valence excited states of the iodine molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 152—156 (англ.)

Рассчитаны энергии вертикальных электронных переходов для состояний симметрии $\Sigma_{g,u}$, $\Pi_{g,u}$, $\Delta_{g,u}$ молекулы иода. Влияние электронов атомных остовов учтено с помощью псевдопотенциала, подобранного по данным неэмпирич. расчета атома иода методом Хартри—Фока. Базисный набор для орбиталей валентных электронов составлен из двухэкспонентных функций s - и p -типа с добавлением поляризац. d -орбиталей. Параметры базисных функций также подобраны по результатам неэмпирич. расчетов атома иода. Значения энер-

Е. М. Н.

Х. 1974 № 23

гий переходов определены методом конфигурац. взаимодействия (КВ) в окрестности равновесного межъядерного расстояния основного состояния молекулы. Расхождение вычисл. значений с имеющимися в распоряжении эксперим. величинами, как правило, не превышает 1 эв. Отмечено сильное смешивание конфигураций одной и той же симметрии, особенно для состояний Σ_g^+ , Π_u и Π_g . В целом энергетич. картина для возбужденных состояний хорошо согласуется с качеств. предсказаниями Малликена. Единственное отличие связано с найденным дополнительным $^3\Sigma_g^+$ состоянием в области 9 эв.

А. В. Немухин

У₂

ВР-Х1-5612

1977

12 Д114. Расчеты состояний молекулы йода, соответствующих вертикальным валентным возбуждениям, методом КВ с неэмпирическим псевдопотенциалом. Teichteil Christian, Malrieu Jean Paul. A CI non-empirical pseudopotential calculation of the vertical valence excited states of the iodine molecule. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 1, 152—156 (англ.)

М.П.

Рассчитаны энергии валентных возбужденных состояний молекулы J_2 . Расчеты производились с использо-

Р. 1977, № 12

ванием неэмпирич. основных псевдопотенциалов в валентном ($5s$, $5p$) базисе типа двойной экспоненты с включением поляризующих $5d$ -ф-ций. В расчетах методом КВ использовался единый набор МО, полученных в приближении ССП. Ф-ция КВ нулевого приближения состояла из 30—55 слэтеровских детерминантов, вклад остальных возбужденных конфигураций учитывался в рамках теории возмущений второго порядка. Приведены вертикальные энергии возбуждения для 25 состояний типа Σ , π и Δ . Полученные результаты сравниваются с оценками, выполненными Малликоном. Энергии низших переходов, как правило, занижены на 10%. Обсуждаются пути улучшения расчетного метода (введение диффузных ф-ций, учет спин-орбитального взаимодействия).

В. И. Барановский

оттиски 5415 1977

J_2

Br_2

М. П.

В (+1)

Х. 1977. № 24

24 Б130. Ультрафиолетовые лазерные переходы в J_2 и Br_2 . Tellinghuisen Joel. The ultraviolet laser transitions in J_2 and Br_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, № 3, 485—490 (англ.)

Измерены электронные спектры испускания $^{127}J_2$ и $^{129}J_2$ в области 3400 А, а также $^{79}Br_2$ и естественного Br_2 в области 2900 А. Проведен анализ колебательной структуры полученных систем полос. Рассчитаны молек. постоянные для $^{127}J_2$ (обрабатывали 70 полос $^{127}J_2$ и 55 полос $^{129}J_2$ с $v' = 0-8$, $v'' = 5-23$): $\omega_e' = 103,97$, $\omega_e \chi_e' = 0,205$, $\omega_e'' = 106,29$, $\omega_e \chi_e'' = 0,856$, $D_e = 2350 \pm 100$, $T_e' \approx 40\,540$, $T_e'' \approx 10\,200$ см $^{-1}$ и для $^{79}Br_2$ (при расчете использованы 29 полос $^{79,79}Br_2$, 9 полос $^{79,81}Br_2$, 4 полосы $^{81,81}Br_2$ с $v' = 0-5$, $v'' = 5-15$).

$\omega_e = 150,79$, $\omega_e \chi_e = 0,356$, $\omega_e = 152,82$, $\omega_e \chi_e'' = 0,471$,
 $D_e = 2830 \pm 150$, $T_e' \approx 13\,230$, $T_e'' \approx 48\,910$ см⁻¹. Рассчита-
ны также значения вторых и третьих коэф. ангармоничности для нижних состояний обеих молекул.
Показано, что наблюдаемые системы полос связаны не с $E-B$, а с $1432,2g^3\Pi-2431,2u^3\Pi$ переходами.
Т. обр., впервые экспериментально обнаружены предсказанные ранее состояния $2u^3\Pi$. Отмечено, что
с помощью соотв-щей настройки лазера можно получить генерацию в диапазоне 3400—3430 Å и ниже для J_2
и в диапазоне 2913—2916 Å для $B\gamma_2$. С. Б. Осин

I₂

omnen 5415/1974

Br₂

(дискр. лазер возв. дискр)

87: 124974m The ultraviolet laser transitions in molecular iodine and molecular bromine. Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, Tenn.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 49(3), 485-90 (Eng). Vibrational analyses are given for the UV laser transitions in I₂ (≈ 3400 Å) and Br₂ (≈ 2900 Å). Both systems are attributed to the $1432, 2g^3\Pi \rightarrow 2u^3\Pi$ transition. This designation contradicts all previously published analyses and represents the 1st identification of the predicted $2u^3\Pi$ valence state in these mols.

B (+1)

C.A. 1977 87 N16

14
J2

1977

91: 29700t Laser spectroscopy of iodine molecule. Venka-
teswarlu, P. (Dep. Phys., Indian Inst. Technol., Kanpur, India).
Indian J. Phys. 1977, (Commemoration Vol. Pt. 2, 1977),
273-95 (Eng). A review with 61 refs.

лазерная
спектроскопия

C.A. 1979, 91/N14

У
а

15 Б87. Вращательная, сверхтонкая и магнитная
преддиссоциация молекулярного йода. Vigué Jacques,
Broyer Michel. Gyroscopic, hyperfine and mag- 1977
netic predissociations of molecular iodine. «Etats atom.
et mol. couplés contin. atom. et mol. hautement excités.
Colloq., Aussoi, 1977». Paris, 1977, 333—339 (англ.)

Ее,
предисс.

Проведено детальное исследование различных механизмов преддиссоциации молек. йода — вращательного, сверхтонкого взаимодействия и магнитного. Получено теор. выражение для скорости преддиссоциации при одновременном учете вращательного механизма и механизма сверхтонкого взаимодействия. Входящие в это выражение параметры определены из сравнения с эксперим. данными, полученными для скорости флюоресценции, всех подуровней сверхтонкой структуры одного вращательного состояния. Отмечено, что преддиссоциация, обусловленная внешним магнитным полем, приводит к флюоресценции с круговой поляризацией даже при линейной поляризации возбуждающего света. Тщательное изучение магнитной преддиссоциации показало, что она относится к состоянию $^1\Pi_u$ молек. йода и позволяет уточнить положение этого состояния.

Б. И. Жилинский

Л. 1979, N 15

1977

2 Д663. Выход флуоресценции для сверхтонких компонент... состояния В молекулы I_2 : проверка наличия сверхтонкой преддиссоциации. Viguer J., Broquet M., Lehmann J. C. Fluorescence yield of individual hyperfine components in the B state of I_2 : a test of hyperfine predissociation. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1977, 10, № 10, L379—L383 (англ.)

Измерен относительный квантовый выход флуоресценции для 49 колебательно-вращательных подуровней состояния $B^3\Pi_0$ -и молекулярного йода. Флуоресценция возбуждалась одномодовым непрерывным лазером на красителе родамине 6Ж с накачкой от Ag^+ -лазера. Анализ наблюдаемой зависимости интенсивности флуоресценции от квантовых чисел I и J позволил установить наличие интерференции вращательной и сверхтонкой преддиссоциации, а также сделать вывод о том, что состояние $^1\Pi_u$ ответственно как за магнитную и колебательную, так и сверхтонкую преддиссоциацию. Найденные значения параметров преддиссоциации согласуются со значениями, определенными ранее при помощи косвенных методов. Библ. 8. А. М. М.

сверхтон-
кая
преддиссоц.

Ф. 1978
№ 2

70506.6610

96200

1974

Ch, Ph, TC

Je

миср/миср.

МОН ИУЗН 8-18261

Visser A.G., Bekooij J.P., Meij

L.K. van der, Vreugd G. de, Korving J.

Angular momentum polarization in molecular beams of I_2 and Na_2 . "Chem.

Phys.", 1977, 20, N 3, 391-408 (англ.)

0868 ЛМК

837 841

8 5 9'

ВНИИТИ

Зак. 528

1974

88: 43550p **Optically pumped continuous iodine molecular laser.** Wellegehausen, B.; Stephan, K. H.; Friede, D.; Welling, H. (Inst. Angew. Phys., Tech. Univ. Hannover, Hannover, Ger.). *Opt. Commun.* 1977, 23(2), 157-61 (Eng). Continuous laser oscillation was obsd. for various $B^3\Pi_{0+u} \rightarrow X^1\Sigma_{0+g}$ transitions of mol. I in the wavelength range of 583.0-1338 nm excited by a single frequency 514.5 nm Ar laser. For pump powers of 3W output powers up to 250 mW were obtained. Some properties of the laser system are discussed.

Lazep

C. H., 1978, LP, N 6

1977

19 Б157. Экспериментальное измерение диссоциативной молекулярной потенциальной функции по непрерывным спектрам резонансного комбинационного рассеяния. Williams P. F., Fernandez A., Rousseau D. L. Experimental measurement of dissociative molecular potential functions from continuum resonance Raman spectra. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 47, № 1, 150—154 (англ.)

Предложен метод точного определения отталкивательных потенциальных функций двухатомных молекул, основанный на анализе непрерывных спектров РКР этих молекул в газовой фазе. Метод применен для определения потенциальной функции отталкивательного состояния ${}^1\Pi_u$ молекулы J_2 . Потенциал ${}^1\Pi_u$ состояния задавали в виде функции $V_{1u}(R) = A \exp(-bR)$, где R — межъядерное расстояние. Найдено, что наилучшее согласие эксперим. (использованы данные по поляризованному и деполяризованному рассеянию для двух обертонов — $\Delta v = 3$, и $\Delta v = 8$, и четырех лазерных возбуждающих линий — 4965, 4880, 4765 и 4579 Å) и расчетных спектров РКР наблюдается при значениях

потенциал
р-уи

X. 1977
N 19

параметров A и b , равных $1,52 \cdot 10^{-7}$ и $2,844$ соотв., и
 при отношении квадратов дипольных матричных эле-
 ментов для $^3\text{Po}^+$ и ^1Pi состояний, равном $0,2$. От-
 мечена высокая точность определения полученной по-
 тенциальной кривой ошибка в $R \leq \pm 0,01 \text{ \AA}$ в интер-
 вале $\sim 3000 \text{ см}^{-1}$ (считая от энергии диссоциации J_2 в
 состоянии $^3\text{Po}^+$ и выше). Обсуждены причины ухуд-
 шения точности вне указанного интервала. Показано,
 что учет вклада ^1Pi состояния приводит к значит.
 улучшению как качеств., так и колич. согласия экспе-
 римента с расчетом.

С. Б. Осин

Y₃

Common 8415

| 1978

Abundi R.K., et al.

Ofgr.
Spaus. net.
Crest. basilar
paspalum

Indian J. Pure
and Appl. Phys.
1978, 16, 135-141.

72

1977

56: 180128e Experimental measurement of dissociative molecular potential functions from continuum resonance Raman spectra. Williams, P. F.; Fernandez, A.; Rousseau, D. L. (Dep. Phys., Univ. Puerto Rico, Rio Piedras, P. R.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 47(1), 150-4 (Eng). A novel method is given for accurately detn. of repulsive potential functions of diat. mols. The method utilizes an anal. of the continuum resonance Raman spectra obsd. from mol. vapors. Results are given on applying this method to det. the repulsive U_{100} state potential function of I_2 .

non-mu.
op-548

C. A. 1977. 86 N24

Г₂

Summary 8416 | 1978

отбор

М.Н.

Рамаан-
центр

Asundi R.K., et al.
Indian J. Pure and Appl.
Sci., 1978, 16, p.142-150.

У
2

спектры
К.Р.

2. 1981. N5

5 Б236 Д. Исследование когерентного антистоксова комбинационного рассеяния при электронном резонансе. Молекула йода в газовой фазе. Attal Brigitte. Etude de la diffusion Raman anti-stokes cohérente à la résonance électronique: application à la molécule d'iode en phase gazeuse. Thèse doct. Univ. Paris, 1978. 90 p., ill. (франц.) 198

Изучены спектры резонансного КАРС газообразного J_2 , как при резонансе в области эл-ного перехода $^1\Sigma_g^+ \leftarrow ^3P_{0u}^+$, так и при возбуждении в области континуума. Исследована частотная зависимость нелинейной восприимчивости третьего порядка χ^3 . Рассмотрена возможность использования резонансного КАРС для исследования молекул NO_2 , глиоксаля, CO и O_3 . Отмечается, что резонансное КАРС позволяет получать более высокое отношение полезного сигнала к шуму на спектре, чем обычное КАРС. Метод м. б. также использован для заселения возбужденных электронных состояний и изучения динамич. (в поле световой волны) эффекта Штарка (при освещенности ~ 10 МВт/см² пик в спектре КАРС йода расщепляется на две компоненты с расстоянием между ними $\sim 0,1$ см⁻¹).

А. В. Бобров

Y₂

Summer 6237

1978

88: 161004m Laser photoluminescence of iodine matrix samples: spectroscopic evidence for several iodine (I_2) species. Ault, Bruce S.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(1), 68-73 (Eng). Three structured photoluminescence systems were obtained in the 12,000 to 16,000 cm^{-1} range from matrixes contg. I_2 . These sharp emissions contained increasing vibronic intervals. The most likely origins of the strong emissions are different structural isomers of mol. 1 dimers or trimers.

gonoxu-4-

C.A. 1978, 28, 122

72

1948

Bhattacharyya S.P.

(7)
ко. мех.
расчет

Indian J. Chem. Sect A
1948, 16A (7), 4-6

сш. Br F - III

J₂

omura 6823

1978

Birtwistle D. L.; et al.

J. Phys. B: Atom and Mol.

Phys.; 1978, 11 (16), 2949-55.

Dissociative attachment
in iodine

У
2

2 Д128. Эффективный гамильтониан - сверхтонкого взаимодействия в гомоядерных молекулах. Применение к расчету B -состояния молекулярного йода. Broys M., Vigué J., Lehmann J. C. Effective hyperfine hamiltonian in homonuclear diatomic molecules. Application to the B state of molecular iodine. «J. phys.» (France), 1978, 39, № 6, 591—609 (англ.; рез. франц.)

Эксперим.
Спектр.

С использованием алгебры неприводимых шаровых тензоров в компактной форме получен и исследован эффективный гамильтониан сверхтонкого взаимодействия для гомоядерных двухатомных молекул с типом связи a по Гунду. В гамильтониане учтены члены второго порядка: магнитодипольный и электр. квадрупольный. Полученные выражения использованы для интерпретации эксперим. спектров состояния $B^3\Pi_n^+$ молекулы йода: интерпретированы константы скалярного и тензорного спин-спинового взаимодействия. Показано, что имеющиеся в настоящее время константы магнитного октупольного взаимодействия определены, по-видимому, неверно, т. к. его величина лежит за пределами точности экспериментов.

А. И. Шушин

Ф.1979-2

1948

72
 (7)

89: 83269f Electron-diffraction study of the iodine molecule at room temperature. Butaev, B. S.; Gershikov, A. G. (USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1978, **13**(2), 228 (Russ). The mol. structure of I₂ in the gas phase was detd. by electron diffraction at 21.1°. The parameters r_g 2.672(3) and l_m 0.049(5) Å agree with 2nd-order perturbation calcs.

A. Libackyi

7e
 энантиомерная
 несимметричность

Q.A., 1948, 29, 11/10

1978

J₂

и.п.

БФ-Х-6144

с. 1978, № 4

7 Б141. Резонансно усиленное трехфотонное поглощение молекулярного иода. Chen Kuo-mei, Steephoeck Larry E., Yeung Edward S. Resonance enhanced three-photon absorption of molecular iodine. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 59, № 2, 222—225 (англ.)

Методом поглощения в-ва внутри резонатора лазера на красителе непрерывного действия впервые измерен резонансно усиленный трехфотонный спектр возбуждения $D \leftarrow X$ молекулы иода, J₂. Трехфотонный характер процессов поглощения следует из данных зависимости интенсивности флуоресценции J₂ от мощности излучения лазера и давл. газа. Максимум интенсивности флуоресценции зарегистрирован вблизи 3200 А. Интенсивность флуоресценции трехфотонного спектра промодулирована однофотонными переходами. В спектре идентифицировано свыше 80 колебательных трехфотонных переходов. Определены спектроскопич. постоянные J₂ в D-состоянии $\nu_{00}=40998$ см⁻¹, $\omega_0'X_0'=0,045$ см⁻¹. Отклонение теоретически вычисленных частот переходов для вращательной Q-ветви от эксперим. значений находится в пределах разрешающей способности установки.

С. Н. Мурзин

I₂

BP-XI-474 1978

90:46238v Resonance-enhanced three-photon absorption of molecular iodine. Chen, Kuo-Mei; Steenhoek, Larry E.; Yeung, Edward S. (Ames Lab., Dep. Energy, Ames, Iowa). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 59(2), 222-5 (Eng). D ← X Resonance enhanced 3-photon excitation spectrum of I₂ was obsd. by a cw intracavity absorption technique. Vibrational quantum nos. of D ← X transitions are given for every major spectral feature. The corresponding 1-photon enhancement from the B state is evident from the 1-photon vibrational assignment. The spectroscopic consts. for the D state are $\nu_{00} = 40,998 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_0 = 113 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega'_0 X_0 = 0.045 \text{ cm}^{-1}$.

u, n.

C.A. 1979, 90, 16

I₂

om muck 6290

1978

89: 154881n Laser fluorescence studies of molecular iodine.
I. Spectral assignments of the 5145 Å fluorescence. Clark,
R.; McCaffery, A. J. (Sch. Mol. Sci., Univ. Sussex, Brighton,
Engl.). *Mol. Phys.* 1978, 35(3), 609-15 (Eng). The circular
polarization of the I₂ fluorescence induced by the 5145-Å Ar ion
laser line were measured and the spectrum was assigned using
the signs of polarization of the rotationally resolved features.
Nine sep. fluorescence series were excited by the laser used in
normal multi-mode operation. The main fluorescence doublets
and the frequencies and polarizations of the rotational transfer
features were used to compare recently published results.

laser
polarization

C.A. 1978, 89, N18

Омисси 6290

1978

J
2

23 Б151. Исследование флуоресценции молекулярного йода возбуждаемой лазером. I. Отнесение спектра флуоресценции от линии 5145 А. Clark R., McCafferty A. J. Laser fluorescence studies of molecular iodine I. Spectral assignments of the 5145 А fluorescence. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 3, 609—615 (англ.)

спектр
флуоресценции

Исследован спектр флуоресценции молек. йода, возбуждаемый Ar^{+} -лазером ($\lambda_{возб} = 5145$ А). Отнесение возбуждаемых переходов выполнено с учетом результатов поляризац. измерений. В спектре флуоресценции, кроме сильно поляризованных дублетов, соответствующих непосредственно возбуждаемым переходам, наблюдались доп., частично поляризованные линии, связанные с др. состояниями, заселяемыми в результате неупругих столкновений. Показано, что линия 5145 А возбуждает как минимум девять переходов: $P(13)$ $v' = 43 - v'' = 0$, $R(15)$, 43—0; $P(48)$, 44—0; $P(88)$, 47—0; $P(103)$, 49—0; $P(46)$, 50—1; $R(98)$, 58—1; $P(48)$, 62—2; $P(54)$, 61—2.

В. М. Ковба

2. 1978, N 23

У
2

Оттиски 6290

1978

10 Д677. Исследования флуоресценции молекулярного йода, вызываемой лазерным излучением. Ч. I. Отнесение спектров флуоресценции в области 5145 Å. Clark R., McCaffery A. J. Laser fluorescence studies of molecular iodine. I. Spectral assignments of the 5145 Å fluorescence. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 3, 609—615 (англ.)

И.И. М.И.

Методом одновременной регистрации интенсивности и степени поляризации излучения изучена флуоресценция молекул J_2 , возбуждаемая излучением Аг-лазера ($\lambda=5145$ Å). Пары J_2 находились под давл. $2,3 \times 10^{-1}$ мм рт. ст. Показано, что примененный метод позволяет надежно идентифицировать компоненты спектра, отвечающие индивидуальным колебательно-вращательным переходам. В спектральной области 5146—5178 Å выделено 9 серий линий. Сделано предположение о том, что линии, лежащие в области высоких энергий, относятся к «антистоксовскому» излучению и соответствуют переходам с высоких колебательных уровней основного состояния молекулы J_2 . Обсуждены причины низкой интенсивности флуоресценции с этих уровней. Библ. 22.

сп. 1978, № 10

У
2

23 Б152. Исследование флуоресценции молекулярного йода возбуждаемой лазером. II. Релаксация ориентированных молекул в основном и возбужденном состояниях. Clark R., McCafferty A. J. Laser fluorescence studies of molecular iodine II, Relaxation of oriented ground and excited molecules. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 3, 617—637 (англ.)

Исследована зависимость круговой поляризации (С) линий вращательной структуры спектра флуоресценции молек. йода, возбуждаемого A_1^+ -лазером (5145 А), от интенсивности возбуждающего излучения, давл. паров йода (до 0,23 мм) и давления посторонних газов (гелий, аргон, кислород). Большая часть измерений проведена на полосе $\nu' = 43 - \nu'' = 2$. В многомодовом режиме линия 5145 А одновременно возбуждает несколько колебательно-вращательных уровней состояния $B^3\Pi_{ou} + J_2$ [доминируют переходы $P(13)$ и $R(15)$, $\nu' = 43 : \nu'' = 0$], поэтому вместо P, R -дублетов в спектре флуоресценции при отсутствии постороннего газа наблюдались триплеты. Для всех трех компонент триплета величина C приблизительно постоянна при давлении

и.п.

сигн. флуоресц.

паров йода в ячейке $0,23-0,02$ мм и начинает заметно уменьшаться при $P < 0,01$ мм. Найдено, что процесс возбуждения молекул йода сопровождается перераспределением заселенности возбужденных вращательных состояний за счет упругих и неупругих столкновений $I_2^* - I_2$, $I_2^* - \text{газ}$ ($\Delta M = 0$), в результате к-рых в спектре появляются доп. линии. Рассмотрены возможные схемы перераспределения заселенности с участием молекул йода в резонансно-возбужденных состояниях и молекул, между к-рыми происходит перенос энергии.

ния сечений упругих и неупругих столкновений (соотв. 680 и 82 Å²). Сообщ. I см. пред. реферат. В. М. Ковба

У
2

12 Д838. Исследование индуцированной лазерной флуоресценции молекулярного иода. Ч. II. Релаксация ориентированных молекул, находящихся в основном и возбужденном состояниях. Clark R., McCaffery A. J. Laser fluorescence studies of molecular iodine. II. Relaxation of oriented ground and excited molecules. «Mol. Phys.», 1978, 35, № 3, 617—637 (англ.)

спектры
флуоресценции

Получены спектры флуоресценции газообразных молекул I_2 , возбуждавшихся излучением Аг-лазера (5145 Å). Исследованы зависимости интенсивности полос флуоресценции и степени поляризации излучения молекул I_2 от давления смесей $I_2 + Ag$ и $I_2 + O_2$ при различных интенсивностях возбуждающего излучения. Показано, что зависимость степени поляризации флуоресценции позволяет получить количественную информацию о процессах колебательно-вращательной релаксации молекул I_2 в состояниях $1\Sigma_g^+$ и $2\Pi_u^+$ при столкновениях с атомами Аг и молекулами O_2 . Результаты сравниваются с данными других авторов, полученными различными спектроскопическими методами и в экспериментах по рассеянию. Ч. I см. Clark R., McCaffery A. I., «Molec. Phys.», 1978, 35, 639.

р. 1978, № 12

У
2

расчет
потенциальных
кривых

1978
1 Б35. Исследование интенсивных систем полос
спектра молекулы J_2 методом псевдопотенциала.
Das G., Wahl A. C. Pseudopotential study of some
prominent band systems of the spectra of the J_2 mole-
cule. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 53—62 (англ.)
Многоконфигурационным методом ССП с использо-
ванием приближения псевдопотенциала рассчитаны потен-
циальные кривые основного и ряда возбужденных со-
стояний молекулы J_2 . Электроны каждого атома под-
разделялись на электроны внутреннего остова (элект-
ронные оболочки с $n=1-3$), внешнего остова ($n=4$)
и валентные. Влияние электронов внутреннего остова
учтено псевдопотенциалом, построенным на основе
хартри-фоковского расчета атома йода в релятивист-
ском приближении; орбитали валентных электронов
ортогональны к орбиталям электронов внутреннего

1055.6528

2.1049,1/1

остова. Разложение по выбранному базисному набору функций s -, p - и d -типа и процедура самосогласования проводились как для орбиталей валентных электронов, так и для орбиталей внешнего остова. Однако, при построении многоконфигурац. волновых функций учитывались возбуждения только валентных электронов. Разработана и использована процедура, позволяющая учесть релятивистские эффекты. А. В. Немухин

У
2

Оттиски 6528

1978

12 Д157. Изучение с помощью псевдопотенциала некоторых основных систем полос спектра молекулы J_2 (Das G., Wahl A. C. Pseudopotential study of some prominent band systems of the spectra of the J_2 molecule. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 53—62 (англ.)

Методом МК ССП с использованием численного хартри-фоковского релятивистского основного потенциала проведены расчеты электронной структуры $X^1\Sigma_g^+$, $D^1\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_{o+u}$, $^3\Pi_{1u}$, $^3\Pi_{2u}$, $^3\Pi_{o+g}$, $^3\Pi_{1g}$, $^3\Pi_{2g}$ состояний молекулы J_2 . Проанализирован характер релятивистских потенц. кривых указанных электронных состояний; для каждого из них вычислены основные спектроскопич. параметры. Найденные значения хорошо согласуются с соответствующими эксперим. данными. Сделан ряд уточнений в отношении спектров поглощения и эмиссии паров J . В частности, указано, что эмиссионную полосу около 3425 Å, наблюдаемую в присутствии посторонних газов, следует отнести к переходу $^3\Pi_{2g} \rightarrow ^3\Pi_{2u}$.

О. В. Сизова

р. 1078, N 12

72

Chemica 6528

1978

89: 119873q Pseudopotential study of some prominent band systems of the spectra of the iodine molecule. Das, G.; Wahl, A. C. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(1), 53-62 (Eng). By using pseudopotential multiconfiguration SCF (MCSCF) techniques, several states of the I_2 mol. were studied to explain some important band systems of the spectra of I vapor. Spectroscopic parameters of the states $X^1\Sigma_g^+$, $D^1\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_{o^+u}$, $^3\Pi_{1u}$, $^3\Pi_{2u}$, $^3\Pi_3^+g$, $^3\Pi_{1g}$, $^3\Pi_{2g}$ are evaluated and compared with known exptl. data. Attempts are made to resolve questions in regard to the assignments of mol. states to the above band systems as well as those pertaining to the positions and symmetries of various currents that have remained only partially answered over the years.

M. N.



C.A. 1978, 89, N14

1978

У₂

1) 24 Б167. Исследование сверхтонкой структуры молекулярного иода методом насыщенной флуоресценции. Döpel E., Kühlike D., Dietel W. The hyperfine structure of molecular iodine in saturated fluorescence. «Opt. Commun.», 1978, 25, № 1, 62—64 (англ.)

Методом насыщенной флуоресценции измерена СТС линии R (127) полосы 11—5 перехода $B^3\Pi(O_u^+) - X^1\Sigma(O_g^+)^{127}J_2$. Оптич. ячейка с парами иода (0,015—0,24 мм) помещалась внутри резонатора одномодового He—Ne лазера. Измерялась интенсивность антистоксовой флуоресценции иода в процессе перестройки частоты лазера с помощью пьезоэлектрич. преобразователя. В исследуемом интервале частот (≥ 500 мГц) обнаружены четырнадцать компонент СТС.

В. М. Козба

спектр,
сверхтонк.
структ.

X. 1978, N 24

1948

Y
2Свєтл -
монкал
сиринкова

88: 200423u The hyperfine structure of molecular iodine in saturated fluorescence. Doepel, E.; Kuehlke, D.; Dietel, W. (Sekt. Phys., Friedrich-Schiller-Univ., Jena, E. Ger.). Opt. Commun. 1978, 25(1), 62-4 (Eng). The hyperfine structure of the $R(127)$ 11-5 line (633 nm) of $^{127}\text{I}_2$ was investigated by means of the satd. fluorescence excited in the resonator of a single mode ^3He - ^{20}Ne laser. Fourteen hyperfine components were detected in the tuning range of the laser at pressures from 15 to 240 mtorr.

C.A. 1948, 88, V26

1978

J₂

10 Д678. Сверхтонкая структура уровней молекулярного йода в насыщенной флуоресценции. Döpel E., Köhlke D., Dietel W. The hyperfine structure of molecular iodine in saturated fluorescence. «Opt. Commun.», 1978, 25, № 1, 62—64 (англ.)

Исследована сверхтонкая структура (СТС) линии R (127) полосы 11-5 перехода $B^3\Pi(O_u^+) - X^1\Sigma(O_g^+)$ молекулы $^{127}J_2$. Наблюдалась насыщенная антистоксова флуоресценция при возбуждении излучением однофотонного $^3He - ^{20}Ne$ лазера (633 нм). Компоненты СТС регистрировались при давлении J_2 (15...240) $\cdot 10^{-3}$ мм рт. ст., ширина линий при этом составляла 5—10 МГц.

сверхтонк.
структура

К. Б.

сп. 1978 № 10

Xi-6340 1979
Z (un) Gerstenkorn S., Luc P.

J. Mol. Spectrosc., 1975, 77, W2, 210-221
(un)

Assignments of several groups iodine
I₂ lines in the B-X system.

Py, 1980, 19317

10

(92)

Y₂

BP-XI-6350

1948

90130543y Atlas of the Absorption Spectra of the Iodine
Molecule at 14800-20000 cm^{-1} . (Atlas du Spectre d'Absorption
de la Molecule d'Iode 14800-20000 cm^{-1}) Gerstenkorn, S.; Luc,
P. (C.N.R.S.: Paris, Fr.). 1978. 560 pp. F 185.

Amstat

Генер. нод.

C.A. 1949, 20, 116

У
2

Атлас
спектра
поглощения

5 Б123 К. Атлас спектра поглощения молекулярно-го йода 14 800—20 000 см^{-1} . Gerstenkorn S., Luc P. Atlas du spectre d'absorption de la molecule d'iode 14 800—20 000 см^{-1} . Paris, CNRS, 1978. 103 p., ill. (англ.) 1978

С помощью модифицированного фурье-спектрометра с разрешением $0,015 \text{ см}^{-1}$ измерен спектр поглощения молек. йода в области перехода $B^3\Pi_{ou} + - X^1\Sigma_g +$ (14 800—20 000 см^{-1}). Чтобы компенсировать общее уменьшение интенсивности полос, связанное с изменением величины факторов Франка—Кондона для полос $(v', 0)$ использованы три оптич. ячейки с длиной поглощающего слоя 200, 50 и 13 см. Для калибровки спектра применяли урановую разрядную лампу с полым катодом. Табулировано положение около 70 000 линий, принадлежащих 127 полосам $(v' = 3-62-v'' = 0-6)$. Получены след. значения молек. постоянных:
 $T_e = 15768,947 \text{ см}^{-1}$, $G(v') = 125,745201(v' + 1/2) - 0,772911918(v' + 1/2)^2 - 0,283926777 \cdot 10^{-3}(v' + 1/2)^3 - 0,239596998 \cdot 10^{-3}(v' + 1/2)^4 + 0,109239978 \cdot 10^{-4}(v' + 1/2)^5 - 0,323808305 \cdot 10^{-6}(v' + 1/2)^6 + 0,583472987 \cdot 10^{-3}(v' + 1/2)^7 - 0,539459277 \cdot 10^{-10}(v' + 1/2)^8 + 0,197506946 \cdot 10^{-12}(v' + 1/2)^9$, $G(v'') = 214,5204(v'' + 1/2) + 0,607906 \cdot 10^{-12}(v'' + 1/2)^2 - 0,001322(v'' + 1/2)^3$ (в см^{-1}). В. М. Ковба

2.10.79, NS

ВВ-1-6349-1978

У₂

7 Б73. Определение параметров ангармонической колебательной потенциальной функции по спектральным данным и расчет электронографических параметров молекулы J_2 . Гершиков А. Г., Спиридонов В. П., Бутаев Б. С. «Вестн. МГУ. Химия», 1978, 19, № 6, 654—657 (рез. англ.)

М.п.

Численной диагонализацией колебательного гамильтониана с использованием спектроскопич. данных определены пять коэф. колебательной потенциальной функции молекулы J_2 . Эти коэффициенты использованы для вычисления электронографич. молек. параметров r_g и l_e . Полученные результаты с точностью до 0,001 Å согласуются с вычисленными на основе потенциала Ридберга — Клейна — Риса, что позволяет рекомендовать его использование для расчета электронографич. параметров r_g и l_e из спектральных данных. Е. Розенберг

2. 1979 N 7

ВФ - X1-6349 1978

4 Д168. Определение параметров ангармонической колебательной потенциальной функции по спектральным данным и расчет электронографических параметров молекулы J_2 . Гершиков А. Г., Спиридонов В. П., Бутаев Б. С. «Вестн. МГУ. Химия», 1978, 19, № 6, 654—657 (рез. англ.)

Определены 5 коэф. колебательной потенц. ф-ции молекулы J_2 из спектроскопич. данных методом численной диагонализации матрицы колебательного гамильтониана. На основе полученных параметров произведен расчет ф-ции радиального распределения $p(r)$ и электронографич. параметров r_g и l_g .

М. П.

сп 1979 №4

BP-XI-6349

1978

90 127927w Determination of parameters of the anharmonic vibrational potential function from spectroscopic data and calculation of electron diffraction parameters of the iodine molecule. Gershikov, A. G.; Spiridonov, V. P.; Butaev, B. S. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR) *Vestn. Mosk. Univ. Ser. 2: Khim.* 1978, 19(6), 654-7 (Russ). The potential function parameters for I_2 were detd. from spectroscopic data by numerical diagonalization of the vibrational Hamiltonian. The potential function parameters were used to calc. the electron diffraction mol. parameters, i.e., the r centroid and bond length. The results are compared with those calcd. by using a Rydberg-Klein-Rees potential.

homework
sp-445

C.A. 1979, 90, N16

1948

Y
2

91: 163401z Determination of equilibrium parameters of diatomic molecules by an electron-diffraction method. Gershikov, A. G. (Khim. Fak., Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Deposited Doc.* 1978, VINITI 1864-78. 113-15 (Russ). Avail. VINITI. A procedure for processing experimental scattering factors, enabling calculation of interatomic distances is described. The value of r_e for I_2 calculated from diffraction data of B. S. Bugaer and G. (1977) agrees with the spectroscopic value of R. J. Le Roy (1970).

(2e)

C.A. 1949, 9, 120

I_2

ommuca 6504

1978

(+)

(γ_e^-)

89: 49256q Direct experimental determination of equilibrium parameters and Morse anharmonic constants of diatomic molecules by electron diffraction. Gershikov, A. G.; Spiridonov, V. P.; Butaev, B. S. (Dep. Chem., Moscow State Univ., Moscow, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 55(3), 599-602 (Eng). The applicability of modern electron diffraction to the direct exptl. detn. of equil. parameters r_e, l_e and the Morse anharmonic const. a of a diat. mol. is demonstrated. The results obtained for the iodine mol. I_2 : $r_e = 2.665(3)$ Å, $l_e = 0.050(3)$ Å and $a = 1.56(25)$ Å⁻¹ agree with spectroscopic data within the uncertainties quoted.

C.A. 1978. 29 N 6

У₂

М. И.

оттиск 6504

10 Д146. Прямое экспериментальное определение равновесных параметров и ангармонических постоянных потенциала Морзе двухатомных молекул методом электронной дифракции. Cersnikov A. G., Spiridonov V. P., Butayev B. S. Direct experimental determination of equilibrium parameters and morse anharmonic constants of diatomic molecules by electron diffraction. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 55, № 3, 599—602 (англ.) 1978

В качестве иллюстрации возможностей современного метода электронной дифракции произведено определение параметров потенциала Морзе молекулы J_2 . С использованием этого потенциала производная функции интенсивности может быть записана в виде

$$D(s) = \exp(-l_e^2 s^2 / 2) \cdot \cos sr_e - (3/2 a l_e^2 s - 1/6 a l_e^4 s^3) \cdot \sin sr_e \quad (1),$$

где a — константа ангармоничности, l_e — средняя амплитуда колебаний. Параметры определялись путем аппроксимации $D(s)$, вычисленной путем дифференцирования эксперим. кривой $sM(s)/g(s)$, выражением (1) с помощью метода наименьших квадратов. Получены следующие значения (в скобках — спектроскопич. данные): r_e (Å) = 2,665 (2,6656); l_e (Å) = 0,050 (0,051); a (Å⁻¹) = 1,56 (1,445).

Р. И. Г.

ф. 1978, № 10

I₂ (reacc. comp.) XI-5784 1978

Gershikov A.G., Spiridonov V.P.,
Butayev B.S.

Chem. Phys. Lett., 1978, 55, n3, 599-
- 602 (Russ.)

2803 / Direct experimental deter-
mination of equilibrium para-
meters and Morse anharmonic
constants of diatomic molecules
by electron diffraction.

Russ., 1978, 18 565 10 (9)

У
2

спектр
флуоресц.

1978

6 Б1330. Изучение методом поляризованной лазерной флуоресценции переноса энергии и момента количества движения в гомоядерных двухатомных молекулах. Jeyes S. R., McCaffery A. J., Rowe M. D. Energy and angular momentum transfer in homonuclear diatomic molecules from polarized laser fluorescence. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 3, 845—867 (англ.)

При спектральном разрешении $0,17 \text{ см}^{-1}$ изучали спектры поляризованной по кругу флуоресценции молекул J_2 при давл. 0,19 мм и т-ре 19° при возбуждении перестраиваемым лазером на красителе (диапазон перестройки 5600—6200 А, спектральная ширина лазерной линии 50 МГц) отдельных вращательных состояний $J=2-21$ вибронного уровня $v'=16$ возбужденного состояния $J_2^*(^3\text{Po}_n^+)$. Цель работы состояла в исследовании правил отбора для изменения квантового числа

Энер.
и ф

Х. 1979, № 6

M_J в процессах переноса вращательной энергии при столкновениях между молекулами J_2^* и J_2 . Показано, что упругие и неупругие столкновения обнаруживают характеристики как сильных, так и слабых столкновений. Например, наблюдали очень большие изменения вращательного квантового числа J' (ранее в опытах с разбавлением J_2 инертными газами было показано, что J' может изменяться на величину >60), тогда как величина M_J не изменяется. Отсюда получено след. правило отбора при упругих столкновениях гомоядерных двухатомных молекул: $\Delta M_J = 0$. Анализ лит. данных показывает, что это правило относится и к легким молекулам (Li_2 в столкновениях с Ag и He), а не является просто следствием динамики взаимодействия тяжелых молекул J_2^* с разбавляющими газами. Измеренные поляризации сравнены с результатами расчетов по двум моделям: без учета и с учетом эффектов ядерного спина. Показано, что лишь последняя модель дает удовлетворительное согласие с экспериментом, особенно при низких значениях J' . Это означает, что ядерный спин играет определяющую роль в поляризации J_2^* . При правильном учете этого эффекта не обнаруживается деполаризации, к-рую можно было бы приписать эффекту столкновений. В случае вращательно неупругих столкновений проведено сравнение экспериментально измеренных изменений поляризации с результатами расчетов по двум моделям: с сохранением угла ориентации и с сохранением квантового числа M_J . Эксперимент. данным наилучшим образом удовлетворяет лишь последняя модель, т. е. и для вращательно неупругих столкновений имеется тенденция к сохранению M_J , хотя это заключение пока нельзя считать строго установленным правилом отбора. В. Е. Скурат

1978

У
2

14 Б168. Молекулярные столкновения и деполаризация излучения J_2 в газовой фазе при возбуждении светом, поляризованным по кругу. K a t o H. Molecular collisions and depolarization of emission from J_2 in the gas phase excited by circularly polarized light. «J. Chem. Phys. 1978, 68, № 1, 86—96 (англ.)»

молекул.
статков.
в газ. фазе.

Молекулярный иод в газовой фазе возбуждали селективно в отдельные колебательно-вращательные состояния электронного состояния $^3P_{0+}(B)$ с помощью поляризованного по кругу излучения одномодового перестраиваемого лазера на красителях. При перестройке частоты возбуждения изучали зависимость поляризации излучения и асимметрию интенсивностей для колебательно-неупругих переходов $J' \rightarrow J' + \delta J'$ и $J' \rightarrow J' - \delta J'$ от величины квантовых чисел J , и ν' . Проведено теор. рассмотрение столкновений между двумя двухатомными молекулами без пренебрежения эффектами пространственной ориентации. Теория объясняет высокую степень поляризации как резонансного излучения, так и излучения с колебательно-вращательных и вращательных состояний, особенно при высоких значениях квантового числа J' .

Резюме

Х. 1978, №14

198

У
2

9 Д466. Применение эффекта резонансного комбинационного рассеяния для определения времени фазовой релаксации высоких колебательных уровней. Kiefer W., Baierl P. Application of the resonance Raman effect to determine dephasing lifetimes of higher vibrational levels. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1978, 16, № 3, 171—175 (англ.)

Время
фазовой
релаксации

Методом резонансного комб. рас. определены времена фазовой релаксации высоких колебательных состояний молекулы J_2 в растворе. Время фазовой релаксации определялось по ширине линий комб. рас., соответствующих колебательным возбуждениям молекулы с большими квантовыми числами (до $\nu''=13$). Влияние других факторов на ширину линий комб. рас. (энергетич. релаксация, изотопич. расщепление, неоднородно уширение) было существенно подавлено выбором объекта исследований. Источником возбуждения служил аргоновый ионный лазер ($\lambda=514.5$ нм, $W=1$ вт), а для выделения чисто изотропной части комб. рас. применялась разработанная техника двухканальной записи. Приведены эксперим. зависимости времени фазовой релаксации от ν'' для растворов J_2 в четыреххлористом углероде и в циклогексане и рассчитаны потенциальные ф-ции молекулы. Библ. 27.

В. С. З.

Ф1949, N3

1978

4 Д267. Йод — пробная молекула в современной спектроскопии. Lehmann J. C. Iodine, a test molecule in modern spectroscopy. «Contemp. Phys.», 1978, 19, № 5, 449—468 (англ.)

Краткий обзор современного состояния абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии молекулы йода, которая со времен начала века служит пробной молекулой для проверки и демонстрации возможностей новых эксперим. методик. Много внимания уделено последним работам, благодаря которым удалось детально понять механизм предиссоциации состояния $J_2(b)$. Библ. 28.

В. С. Иванов

У
2

обзор

ВЗР-Х/1-6329

Ф.1049, №4

ВФ-Х-6329 1948

У
2

7 Б133. Иод — пробная молекула современной спектроскопии. Lehmann J. C. Iodine, a test molecule in modern spectroscopy. «Contemp. Phys.», 1978, 19, № 5, 449—468 (англ.)

Обзор. Кратко рассмотрены последние достижения спектроскопии поглощения и флуоресценции с использованием J_2 в кач-ве пробной молекулы. Подробно обсуждается механизм преддиссоциации J_2 в состоянии V_3Po^+ по данным различного рода спектральных исследований. Библ. 33. В. М. Ковба

механизм
преддиссоц.

2. 1949, № 4

2

ВР-Х1-6143

1978

3 Д292. Полосы многофотонной резонансной ионизации J_2 . Lehmann Kevin K., Smolarek John, Goodman Lionel. Multiphoton resonance ionization bands in I_2 . «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 4, 1569—1573 (англ.)

Спектр
резонансной
ионизации

Исследованы спектры многофотонной резонансной ионизации паров J_2 в области 360—600 нм. Система полос с $T_0 = (48\,426 \pm 4)$ см⁻¹ и $\omega_e = (254 \pm 1)$ см⁻¹ приписана трех- или четырехфотонной ионизации через промежуточное двухфотонное резонансное состояние. На основании поляризационных измерений и сопоставления с системой Далби (отстоящей на 5146 см⁻¹ в сторону больших энергий) уточнена интерпретация обеих систем: $2g(^2P_{3/2g})ns\sigma_g$ и $1g(^2P_{1/2g})ns\sigma_g$ соответственно. В видимой области (500—600 нм) в спектре многофотонной ионизации наблюдается чрезвычайно плотная структура. С использованием данных поляризационных измерений интенсивная система в этой области с $T_0 = (35\,762 \pm 4)$ см⁻¹ и $\omega_e = (104 \pm 1)$ см⁻¹ приписана двухфотонному резонансному промеж. состоянию 0_g . В. С. Иванов

Ф.1979N3

89:206740n Multiphoton resonance ionization bands in molecular iodine. Lehmann, Kevin K.; Smolarek, John; Goodman, Lionel (Dep. Chem., Rutgers, State Univ., New Brunswick, N. J.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(4), 1569-73 (Eng). Multiphoton resonance ionization (MPRI) bands of I_2 vapor were examd. in the 360-600 nm region. A band system with $T_0 = 48,426 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_e = 254 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$ is assigned to a 2-photon resonant intermediate state involved in either 3- or 4-photon ionization. Polarization measurements establish that the transition is either $1g$ or $2g \leftarrow 0g$. Comparison to the Dalby system (2d), 5146 cm^{-1} to higher energy allows a more detailed interpretation of the excited states of both systems: $2g(2^1I_{3/2g})ns\sigma_g$ and $1g(2^1I_{1/2g})ns\sigma_g$, resp. Excitation into the visible $B \leftarrow X$ absorption band between 500 and 600 nm leads to a dense set of MPRI lines. An intense system in this region with $T_0 = 35,762 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_e = 104 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$ is assigned to a 2-photon resonant intermediate state with polarization measurements establishing it as $0g$. It is further interpreted as arising from the 2-electron promotion $0g \rightarrow \sigma_u, \pi_u \rightarrow \sigma_u$. A striking feature of the MPRI spectra of I_2 is the near absence of lines corresponding to the normal optical bands and also the absence of many possible multiphoton transitions allowed by selection rules. The cross section of the $B \rightarrow X$ transition does occur prominently in the spectrum multiplicatively superimposed on the higher resonance, however.

32

(M.N)

89-11-6143

C. H. 1048, 1049, 1050

1978

6 Б1359. Полосы многофотонной резонансной ионизации в J_2 . Lehmann Kevin K., Smolarek John, Goodman Lionel. Multiphoton resonance ionization bands in J_2 . «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 4, 1569—1573 (англ.)

В области 360—600 нм измерены спектры многофотонной резонансной ионизации (МФРИ) паров J_2 под действием излучения лазеров на красителе. Система

J₂

M, H

B9-XI-MY3

J 1978, N6

полос с параметрами $T_0 = 48426 \pm 4$ см⁻¹ и $\omega_e = 254 \pm 1$ см⁻¹, приписана двухфотонному резонансному промежут. состоянию, участвующему в трех- или четырехфотонной ионизации. Измерения поляризации показали, что соотв-щим переходом является 1_g или $2_g \leftarrow 0_g$. Возбуждение в полосе поглощения $B \leftarrow X$ в области 500—600 нм дает набор близко расположенных многочисленных линий МФРИ. Интенсивная система полос в этой области с параметрами $T_0 = 35\,762 \pm 4$ см⁻¹ и $\omega_e = 104 \pm 1$ см⁻¹ приписана резонансному промежут. состоянию типа 0_g согласно поляризац. измерениям. Установлено, что оно возникает в результате двухэлектронного перехода $0_g \rightarrow \sigma_u$, $\pi_u \rightarrow \sigma_u$. Отличительная особенность спектров МФРИ J_2 состоит в практически полном отсутствии линий, соотв-щих нормальным оптич. полосам, а также в отсутствии многих возможных многофотонных переходов, разрешенных правилами отбора.

В. Е. Скурат

1948

Y₂

(enclp)

88: 81429p Hyperfine structure in the electronic spectrum of molecular iodine-127 by saturated absorption spectroscopy at 633 nm. Morinaga, A.; Tanaka, K. (Natl. Res. Lab. Metrol., Tokyo, Japan). *Appl. Phys. Lett.* 1978, 32(2), 114-16 (Eng). The full hyperfine components of the *R*(127) line in the 11-5 band and the 10 components of the *P*(33) line in the 6-3 band of the *B* - *X* electronic transition of ¹²⁷I₂ were obsd. by the satd. absorption spectroscopy using a complex resonator He-Ne laser. The frequency of the laser was locked to each component and the frequency sepns. of the components were precisely measured. The hyperfine structure of the *R*(127) line was compared with a model which included both nuclear elec. quadrupole and magnetic hyperfine interactions.

C.A. 1978, 88/12

I₂

Commerce B317 | 1978

Mohammad Noor S.

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1978, 16, 752-760

On the Generalization of the
Linnett Potential

y₂

Commencement 8302 | 1978

Mohammad S. Noor

papers
numerous.
republic

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1978, 16,
761-65

1978

22 Б151. Сравнительное изучение эффекта Джоши в парах иода при действии видимого и инфракрасного излучения. Prashad J. Comparative studies of the Joshi effect in iodine vapour under visible and infra red radiations. «Cienc. e cult.», 1978, 30, № 1, 78—79 (англ., рез. порт.)

Исследован эффект Джоши в парах иода под действием видимого, неотфильтрованного ИК- и отфильтрованного (окно из KBr) ИК-излучения. Найдено, что в соответствии с теорией величина $\pm \Delta i$ наибольшая в случае видимого излучения и наименьшая для фильтрованного ИК-излучения.

В. М. Ковба

Дурдин
Жоши

2-1978, N22

Y₂

~~Number~~ 6773

1978

*paper
fabriob.
recessed*

Schäerfenberg P.

Theor. chim. acta, 1978, 49,

115-22.

аттиск 6686

1978

у
2

O₂

21 Б68. Спектроскопические расчеты электронографических параметров двухатомных молекул. Spiridonov V. P., Gershikov A. G., Butayev B. S. Spectroscopic calculations of electron diffraction parameters of diatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 56, № 2, 343—346 (англ.)

По методу численной диагонализации матрицы колебательного гамильтониана и методом матрицы плотности вычислены величины электронографич. параметров r_g и l_e для молекул J_2 и O_2 при различных t -рах с использованием спектроскопич. данных. Полученные величины сопоставлены с эксперим. данными, а также с результатами расчетов др. методами. В. Спиридонов

Мессер
Бутайев

(+1) 14



2.1978, №1

1978

Y₂O₂

M. N.

89: 80366z Spectroscopic calculations of electron diffraction parameters of diatomic molecules. Spiridonov, V. P.; Gershikov, A. G.; Butaev, B. S. (Dep. Chem., Moscow State Univ., Moscow, USSR). *Chem. Phys. Lett.* 1978, 56(2), 343-6 (Eng). By using spectroscopic data, the electron diffraction parameters r_g and l_c for the I and O mols. were calcd. at various temps. by numerical diagonalization of the vibrational Hamiltonian matrix and by the d. matrix approach. The results are discussed and compared with available exptl. data. A comparison was also made with the results of 2nd-order perturbation calcs. for I reported in the literature.

(+1) ☒

C.H. 1978, 29, N10

ВФ-Х1-6344

1978

J₂Br₂спектр
показат.

⊕ ⊗

5 Д1099. УФ-лазерные переходы в J₂ и Br₂. I e i-
linghuisen J. Ultraviolet laser transitions in I₂ and
Br₂. «High-Power Lasers and Appl. Proc. 4th Colloq.
Electron. Transit. Lasers, Munich, 1977». Berlin e. a.,
1978, 110—113 (англ.)

Исследована структура эмиссионных спектров молекул ^{127,127}I₂ и ^{79,79}Br₂ в полосах 3400 и 2900 Å соответственно. Определены спектроскопич. константы переходов и оценено радиационное время жизни верхних уровней обеих молекул (~20 нсек). Сделан вывод, что указанные переходы принадлежат к системе D¹→A¹, а не E→B, как предполагалось ранее. Рассмотрены особенности генерации лазерного излучения при переходах D¹→A¹ в молекулах J₂ и Br₂. Отмечено, что низкая выходная мощность и малая эффективность существующих J₂- и Br₂-лазеров в определенной степени обусловлены поглощением лазерного излучения молекулами, находящимися в возбужденных состояниях, в частности, в состоянии D¹.

С. Л.

ф. 1970, 15

32

1978

11 B99. Электронно-колебательная масс-спектроскопия с многофотонной ионизацией молекулярного пучка. Молекула J_2 . Zandee L., Bernstein R. B., Lichten D. A. Vibronic/mass spectroscopy via multiphoton ionization of a molecular beam: the J_2 molecule. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 7, 3427—3429 (англ.)

спектр
ионизации

37268

Измерены спектры многофотонной ионизации J_2 в молек. пучке. Измерялась интенсивность ионных токов ионов J^+ и J_2^+ , прошедших через масс-фильтр, как функция частоты перестраиваемого лазерного излучения. При трехфотонной ионизации ($\lambda_{\text{лаз}}=366-376$ нм) наблюдались полосы системы Делби (секвенции $\Delta v=0, 1, 2, 3, 4, v''=0-4$, прогрессия $v'=0-v''=0-2, \omega_e'=241 \text{ см}^{-1}, \omega_e''=214 \text{ см}^{-1}, T_0=53\,652 \text{ см}^{-1}$). Предполагается, что промежут. двухфотонным резонансным состоянием при этом является низколежащее ридберговское состояние с остовом $J_2^+(^2\pi_{1/2g})$. Положение полос в спектрах при регистрации ионов J^+ и J_2^+ совпадает, однако их относит. интенсивности сильно отличаются, что объясняется резким увеличением коэф. ветвления J^+/J_2^+ с ростом энергии. При пятифотонной ионизации ($\lambda_{\text{лаз}}=582-590$ нм) наблюдалась часть полос системы Гудмена, причем, интенсивности полос при регистрации ионов J_2^+ были приблизительно вдвое меньше, чем при регистрации ионов J^+ .

В. М. Ковба

ж. 1979, N 11