

CH<sub>3</sub>I

1973

крити-  
ка  
Зеніт

-----  
Spence D, Schulz G.J.

"J.Chem. Phys."

1973, 58, N5, 1800-1803.

● (ca SF<sub>6</sub>; III)

CH<sub>3</sub>F

1973

cannot  
have

Schmidt K.H., Muller A.,  
J. Mol. Struct., 1973,  
18, No1, 135-151.

● (corr. CH<sub>3</sub>F; III)



30719.8191

TE, Ch, Ph

CH<sub>3</sub>I(J;  $\bar{J}_e$ ) 894801973  
4-1026

Uehara Yoichi, Saito Naoshi, Yonezawa Teijiro. Ionization potentials of trifluoromethyl and methyl halides by photoelectron spectroscopy and calculations by extended Hückel and CNDO/2 methods.

СМ.ПРОД.

898 898

9 1 1

0918 БИК

ВИНИТИ

30719.8191

TE, Ch, Ph

89480

"Chem. Lett.", 1973, <sup>прох</sup> N 5, 495-500  
(англ.)

0918 ИИИ

898 898 911

ВИНИТИ

$\text{CH}_3\text{Y}$

дипольн.  
коррелиру-  
е-ущи.

Baize A. Y.

„Y. Chem Phys“ 1974, 60,  
N7, 2936 - 2937 (англ.)

Дипольные корреляционные  
ф-ции для свободного враще-  
ния.

1974

(см СД; III)

ф. 1974. №9.

41110.3789  
Ch.TC.Ex-C

CH<sub>3</sub>I (сум. ност;  
35225 нолетр.)

1974

2657

Bron Jan.

Partition function ratios of the methyl  
halides differing only in isotopic  
substitution.

"Can. J. Chem.", 1974, 52, N 17,  
3078-3082  
(англ., рез. франц.)

207 210

220

0228 пик винити

1974

CH<sub>3</sub> I

Duncan J. L.

"J. Mol. Struct." 1974 22,  
N2, 225-235 (and)

u. n.

(as CH<sub>4</sub>; III)

x. 1975. N2

40426.6623

CH<sub>3</sub>J

197-4

TE. Ch. Ph

C22.11.054969

28 5-4646

Byssel Hans Hermann, Lehmann Walter J.,  
 Lucas Kai, Müller Achim, Schmidt Karl-  
 heinz. Die Anwendbarkeit verschiedener  
 Näherungsmethoden zur Berechnung von  
 Kraftkonstanten bei Säkulargleichungen  
 der Ordnung  $n \geq 2$ . "Z. Naturforsch.",  
 1974, 29a, N. 2, 332-337

(нем., рус. англ.)

076 078 092 0100 ЕВН ВИНТИ

CH<sub>3</sub>J

HJ

He

X IV - 7662

1974

14 Б192. Об отнесении молекулярных ридберговых состояний. Hochmann Petr, Wang Hung-tai, Felps W. Sidney, Foster Stephen, McGlynn Sean P. On the assignment of molecular rydberg series. «Chem. Spectroscopy and Photochem. Vacuum—Ultraviolet». Dordrecht—Boston, 1974, 385—393 (англ.)

Методом наименьших квадратов выполнен анализ эксперим. данных по ридберговым сериям в спектрах CH<sub>3</sub>J, HJ и He. В спектре CH<sub>3</sub>J идентифицировано по сериям, сходящихся к ионизац. пределам  $E_{1/2}$  и  $E_{3/2}$ .  
М. Р. Алнев

ридберг. состояния.

☒ (+2)

х. 1976 N 14

CH<sub>3</sub>I

XIV-4662

7 Д370. О выявлении молекулярных ридберговских серий. Hochmann Petr, Wang Hung-tai, Felps W. Sidney, Foster Stephen, McGlynn Sean P. On the assignment of molecular Rydberg series. «Chem. Spectroscopy and Photochem. Vacuum-Ultraviolet». Dordrecht—Boston, 1974; 385—393 (англ.)

Предложен простой способ определения ридберговских серий в молекулярных спектрах поглощения, в которых лишь частично разрешена колебательная структура электронных полос. В результате анализа спектра поглощения CH<sub>3</sub>I определены 22 ридберговских серий (вместо 6 известных до сих пор), сходящиеся к двум первым потенциалам ионизации этой молекулы, для которых получены значения  $76\,960 \pm 20$  см<sup>-1</sup> и  $82\,050 \pm 20$  см<sup>-1</sup>. Библ. 10. В. С. Иванов

У.

Ридбергт.  
серии

ф 1976 N7



$\text{CH}_3\text{I}$  (сложн. атом.)

1974

Iwata Y., Watanabe T.,

Annu. Rep. Res. React. Inst.,  
Kyoto Univ., 1974, 7, 87-93.

Reinvestigation of the crystal  
structure of iodoform by  
neutron diffraction.

C.A. 1975. 82 v22. 148611p

Исц. сг. 10.

C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>N

1974

Ishita Shigenori et al.

инфракрасная  
спектрометрия

"Синтез" Бунески, Mass  
Spectrosc 1974, 22, N4,  
233-238 (англ)

(all C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>; III)

40412, 3756  
Ex-AR/KP-z,  
TE, Ma, Ph, MGU

CH<sub>3</sub>I (абс. спектр)  
02 49048

1974  
2011

Kasuya Takahiro. Infrared absorption  
spectrometer with a broad-band tunable  
He-Xe laser. "Appl. Phys.", 1974, 3,  
N 3, 223-228

(англ.)

0034 мн

069 071

ВИНИТИ

H<sub>3</sub>CF

1974

Reviews of P.N.

memor.  
racem.

Cienc Cult (Sao Paulo)  
1974, 26(9) 875-6

(on H<sub>3</sub>CF; III)

41105.9542  
Ch, Ph, TC

30526

CHJ<sub>3</sub>

02

1974

2638

Lin S.M., Mascord D.J., Grice R.

Reactive scattering of alkali dimers  
 $K_2+I_2$ ,  $CH_2I_2$ ,  $CHI_3$ ,  $CBr_4$ .

"Mol. Phys.", 1974, .28, N 4, 957-974

(англ.)

0227 ПЛАН

203 205

ВИНИТИ

0214

1974

 $\text{CH}_3\text{I}$  $\text{CH}_3\text{Br}$ 

(A)

96543a Chemi-ionization in alkali-methylhalogen collisions. Moutinho, A. M. C.; Aten, J. A.; Los, J. (FOM.-Inst. Atoom Molecuulfys., Amsterdam, Neth.). *Chem. Phys.* 1974, 5(1), 84-94 (Eng). Chemi-ionization was observed in collisions between the K, Na and Li atoms and the MeI and MeBr mols. Total cross sections were measured as functions of the translational energy and the internal energy of the Me halide mols. The molecular electron affinities were determined from the thresholds of these reactions. The thresholds indicate that these neg. ions are formed by vertical or near-vertical transitions, in contrast to most experiments on chemi-ionization, which yield the adiabatic electron affinities. In the threshold region, the cross sections are strongly dependent upon the internal energy of the molecules. At very high temperature, MeI dissociates, and so chemi-ionization was observed with I atoms.

④ ☒

C.A. 1974. 81. N16

CH<sub>3</sub>I (u.h)

\* 4-4449

1974

89163c Combined analysis of microwave and infrared spectra of methyl iodide. Rotational and l-type doubling constants of the  $\nu_3$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $\nu_2$  states. Matsuura, Hiroatsu; Kawashima, Yoshiyuki; Hirose, Chiaki (Inst. Protein Res., Osaka Univ., Suita, Japan). *J. Mol. Struct.* 1974, 20(2), 205-12 (Eng). The rotational const.  $B$  and the l-type doubling const.  $q$  were detd. for the  $\nu_3$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $\nu_2$  states of MeI from the microwave transition frequencies, in combination with the ir data previously reported. Since these vibrational states were coupled through the Fermi resonance and the xy-type E-E and  $A_1$ -E Coriolis

C.A. 1974. 80. N/6

resonances, the anal. was made by setting up and solving the complete form of the secular determinants of the energy matrixes. The rotational and  $l$ -type doubling consts. were detd. as  $B_3 = 0.250173$ ,  $B_{3c} = 0.247600$ ,  $B_2 = 0.249369 \text{ cm}^{-1}$ ,  $q_3 = -0.000027$ , and  $q_{3c} = -0.000179 \text{ cm}^{-1}$ , which are unperturbed by Fermi and Coriolis interactions. Other band consts. for  $\nu_3$  and  $\nu_3 + \nu_6$  were also refined in accordance with the new values of  $B_3$  and  $B_{3c}$ . The combined anal. of microwave and ir spectral data was useful for the precise detn. of vibration-rotation levels in the perturbed system.



CH<sub>3</sub>I

ХЗ-4449

1974

(м.п.)

8 Д580. Совместный анализ микроволнового и инфракрасного спектров метилйодида: вращательные постоянные и постоянные *l*-удвоения для состояний  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$  и  $\nu_2$ . Matsuura Hiroatsu, Kawashima Yoshiyuki, Hirose Chiaki. Combined analysis of microwave and infrared spectra of methyl iodide: rotational and *l*-type doubling constants of the  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$  and  $\nu_2$  states. «J. Mol. Struct.», 1974, 20, № 2, 205—212 (англ.)

Выполнен теоретич. анализ микроволн. и ИК-спектра молекулы CH<sub>3</sub>I, полученных авторами ранее. При этом использованы частоты вращательных переходов с  $J=0 \rightarrow 1$  и  $1 \rightarrow 2$  в возбужденных состояниях  $\nu_2$ ,  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$  и частоты линий с  $J \leq 40$  ИК-полос  $\nu_2$ ,  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ . Расчеты выполнены с учетом резонанса Ферми между  $\nu_5$

Р. 1974. N8

и  $\nu_3 + \nu_6$ , резонанса Кориолиса между  $E$ -компонентами  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ , связанного с  $xy$ -осями, и  $A_1 - E$ -резонанса Кориолиса между  $\nu_2$  и  $\nu_6$ , связанного также с  $xy$ -осями: приведены явные выражения матриц энергии, использованные при расчете. Из частот всех переходов методом наименьших квадратов в сочетании с точными методами диагонализации матриц вычислены невозмущенные резонансами значения вращательных постоянных ( $B_5 = 0,250173$ ,  $B_{36} = 0,247600$ ,  $B_2 = 0,249369$  см $^{-1}$ ), постоянных  $l$ -удвоения ( $q_5 = -0,000027$ ,  $q_{36} = -0,000179$  см $^{-1}$ ), параметров резонансов Ферми ( $K_{356} = 29,6149$  см $^{-1}$ ) и Кориолиса ( $\xi_{5,36} = 0,03267$  см $^{-1}$ ) и других молекулярных параметров  $\text{CH}_3\text{J}$ . М. Р. Адиев

$\text{CH}_3\text{J}$

ХЗ-4449

1974

м.и.

16 Б250. Совместный анализ микроволнового и инфракрасного спектров метилиодида: вращательные постоянные и постоянные  $l$ -удвоения для состояний  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$  и  $\nu_2$ . Matsuura Hiroatsu, Kawashima Yoshiyuki, Hirose Chiaki. Combined analysis of microwave and infrared spectra of methyl iodide: rotational red spectra of methyl iodide: rotational and  $l$ -type doubling constants of the  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$  and  $\nu_2$  states. «J. Mol. Struct.», 1974, 20, № 2, 205—212 (англ.)

Выполнен теор. анализ МВ- и ИК-спектра молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$ , полученных ранее. При этом использованы частоты вращательных переходов с  $J=0 \rightarrow 1$  и  $1 \rightarrow 2$  в возбужденных состояниях  $\nu_2$ ,  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$  и частоты линий с  $J \leq 40$  ИК-полос  $\nu_2$ ,  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ . Расчеты выполнены с учетом резонанса Ферми между  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ , резонанса Кориолиса между  $E$ -компонентами  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ , связанного с  $xz$ -осями и  $A_1$ - $E$ -резонанса Кориолиса между

$\nu_2$  и  $\nu_5$ , связанного также с  $xu$ -осями: приведены явные выражения матриц энергии, использованные при расчете. Из частот всех переходов методом наименьших квадратов в сочетании с точными методами диагонализации матриц вычислены невозмущенные резонансами значения вращательных постоянных ( $B_5=0,250173$ ,  $B_{36}=0,247600$ ,  $B_2=0,249369$  см<sup>-1</sup>), постоянных  $l$ -удвоення ( $q_5=0,000027$ ,  $q_{36}=0,000179$  см<sup>-1</sup>), параметров резонансов Ферми ( $K_{356}=29,6149$  см<sup>-1</sup>) и Кориолиса ( $\xi_{5,36}=0,03267$  см<sup>-1</sup>) и других молекулярных параметров  $\text{CH}_3\text{J}$ .

М. Р. Алиев

1974

CH<sub>3</sub>

I

Анализ колебательно-вращатель-  
ных спектров молекулы с исполь-  
зованием ЭВМ.

(м.к.)

Макадара Точи, et. al.

"J. Mol. Spectrosc." 1974, 50  
N 1-3, 333 - 348 (англ.)



(см OCS; III)

Ф. 1974

N 10

1974

CH<sub>3</sub>I

Provitali C.M., Scatano J.C.

Rev. Latinoamer. Quim., 1974,  
5(2), 61-6.

2, 20, 1, 1

(see CH<sub>3</sub>F; III)

$\text{CH}_3\text{J}$

$\text{CS}_2$

$\text{C}_2\text{H}_2$

$\text{C}_2\text{H}_4$

1974

7 Д345. Вакуумная УФ- и фотоэлектронная спектроскопия; исторический обзор. Price W. C. Vacuum ultraviolet and photoelectron spectroscopy. Historical background and survey. «Chem. Spectroscopy and Photochem. Vacuum—Ultraviolet». Dordrecht—Boston, 1974, 1—11 (англ.)

Кратко изложена история развития вакуумной УФ- и фотоэлектронной спектроскопии в применении к исследованию многоатомных молекул. Приведены примеры ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ,  $\text{CH}_3\text{J}$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$  и др.), иллюстрирующие основные достижения этих методов. Библ. 20.

фотоэл. спектр

(+1) обш., фотоэл., сп.

Р 1976 N7



(+3)



CH<sub>3</sub>J

1974

14 Б200. Свойства молекулярных ридберговских состояний. Robin M. B. Aspects of molecular rydberg states. «Chem. Spectroscopy and Photochem. Vacuum—Ultraviolet». Dordrecht—Boston, 1974, 13—23 (англ.)

ридберг.  
состоян.  
Рассмотрены основные методы идентификации ридберговских серий полос в спектрах поглощения и в фотоэлектронных спектрах молекул: применение ф-лы Ридберга для частот полос, распределение интенсивности, влияние давления на форму полос и др. Обсуждена идентификация ридберговских серий бензола, CH<sub>3</sub>J, амидов, изоциановой к-ты и т. д. Построена диаграмма корреляции ридберговских состояний алкил- и фторзамещ. оксосоединений. М. Р. Алиев

X1976 N 14



идентифик.  
полос

(кратк. стеногр.)



1974

CH<sub>3</sub>J

7 Д349. Смесь УФ- и фотоэлектронных спектров иодидов. Salahub D. R., Boschi R. A. A potpourri of UV and PE spectra of iodides. «Chem. Spectroscopy and Photochem. Vacuum—Ultraviolet». Dordrecht—Boston, 1974, 191—195 (англ.)

фотоэлектронный спектр

Рассмотрены некоторые аспекты интерпретации УФ- и фотоэлектронных спектров иодидов. Показано, что по виду фотоэлектронного спектра винилиодида можно сразу установить порядок заполненных молекулярных орбиталей: ...л,  $n(a')$ ,  $n(a'')$ , где  $n(a')$  и  $n(a'')$  есть орбитали неподеленных пар атома иода, расположенные в плоскости молекулы и вне ее соответственно. Сравнение УФ-спектров поглощения CH<sub>3</sub>J и Хе позволяет идентифицировать одну из ридберговских серий молекулы CH<sub>3</sub>J как ns-серию, а также избавиться от неоднозначности раздельного определения  $n$  и  $\delta$  (для ns-серии в CH<sub>3</sub>J значение квантового дефекта принято равным  $\delta=4,24$ ). На основании сравнения фотоэлектронных спектров фторированных иодэтанов (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>J, CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>J и C<sub>2</sub>F<sub>5</sub>J) удается легко показать, что в C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>J энергия орбитали СН меньше энергии орбитали СС. Библ. 7.

(+3) ☒

р 1976 N7

В. С. Иванов

1974

CH<sub>3</sub> I

Tsai Bilin P,  
Baer Tomas

структур  
фотохимия

"J. Chem. Phys." 1974, 61, N5,  
2047-2049 (англ)

(англ. III)

ж. 1975. N 4

Me T  
CH<sub>3</sub> T

1974

Velesov F.T.

фотом.  
снелмр

Terisy Dokl. Merkhodov  
Konf. Opt. Rentgenovskikh  
Luchei Mikroanal. Fth  
1974, 7-8 (russ)

 (cu H<sub>2</sub>; III)

50416.1245

Ph, Ch, TC, NGU

CH<sub>3</sub>I

41125

1975

4009

Brodersen Svend, Rasmussen Finn,  
Hegelund Flemming. Rotation-vibrational  
states and transitions in  $C_{3v}$  molecules.  
"J. Mol. Spectrosc.", 1975, 54, N2, 285-295

(англ.)

0347 п.л.к

314

320

339

ВИНИТИ

1975

 $\text{CH}_3\text{J}$ 

9 Д344. Определение вращательной постоянной  $A_0$  для молекул  $\text{C}_{3v}$ . Полоса  $\nu_4$  в спектре комбинационного рассеяния метилиодида. Freedman P. A., Jones W. Jeremy. Determination of the  $A_0$  rotational constant for  $\text{C}_{3v}$  molecules. The  $\nu_4$  Raman band of methyl iodide. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 2, 71, № 3, 650—653 (англ.)

(и.и.) В спектре комб. рас при лазерном возбуждении исследована полоса  $\nu_4$   $\text{CH}_3\text{J}$ . В результате анализа полученных спектров определена вращательная постоянная  $A_0$   $\text{CH}_3\text{J}$ , величина которой хорошо согласуется с результатами, полученными другими методами. Библ. 10.

ф. 1975-19

CH<sub>3</sub>I

1975

(min)

19 Б226. Определение вращательной постоянной  $A_0$  молекул с симметрией  $C_{3v}$ . Полоса  $\nu_4$  спектра КР метилйодида. Freedman P. A., Jones W. Jeremy. Determination of the  $A_0$  rotational constant for  $C_{3v}$  molecules. The  $\nu_4$  Raman band of methyl iodide. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 2, 71, № 3, 650—653 (англ.)

Измерена вращательная структура полосы  $\nu_4$  спектра КР молекулы CH<sub>3</sub>I. Идентифицирована структура Q-ветвей и определены значения частоты центра полосы  $\nu_4$  ( $\nu_4^0 = 3060,22 \text{ см}^{-1}$ ), вращательной и центробежной постоянных ( $A_0 = 5,172$ ,  $D_k^0 = 11,2 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ ), кориолисовой постоянной ( $A\zeta_4 = 0,3421 \text{ см}^{-1}$  и суммы  $\alpha$ -постоянных колебательно-вращательного взаимодействия ( $\alpha_4^A + \alpha_4^B = 0,0291 \text{ см}^{-1}$ )).

М. Р. Алнев

№ 1975 N 19

60315.1208

Ch. TC. MGU

(в. раск. 1975)  
92073  
 $CH_3I$  (vi) \*4-11801

Fujiwara Kenji, Fukushima Kohji,  
Ikawa Sh<sup>u</sup>n-ichi, Kimura Masao. Infrared  
band shape of the C-I stretching vibra-  
tion of methyl iodide in solutions.

"Bull. Chem. Soc. Jap.", 1975, 48, N12, 3464-  
3468 (англ.)

0589 ммк

557 557

ВИНИТИ

CH<sub>3</sub>J

1975

(м.п.)

23 Б343. Отнесение субмиллиметровых лазерных линий молекулы CH<sub>3</sub>J. Gr a n e r G e o r g e s. Assignment of submillimeter laser lines in CH<sub>3</sub>J. «Opt. Commun», 1975, 14, № 1, 67—69 (англ.)

Из лит. данных по значениям молек. постоянных вычислены частоты вращательных переходов молекулы CH<sub>3</sub>J в различных колебательных состояниях. На основании результатов расчета дано отнесение субмиллиметровых линий генерации CH<sub>3</sub>J-лазера с накачкой от CO<sub>2</sub>-лазера. М. Р. Алнев

X1975 N23



60IU2.3I49

0I92I

(3)

1975

Ф, Х, ТС, МГУ

CH<sub>3</sub>Y

ЖУ-10856

Фотоионизационные процессы в метилгалогенидах  
у порога. Иванов В.С., Вилесов Ф.И.  
"Оптика и спектроскопия", 1975, 39, № 5,  
857-863

(сел. CH<sub>3</sub>Cl; III)

0522 пик

482 484 5 1 4

реф ВИНТИ

1975

$CH_3$   
 $CD_3$

Isotani S.

Chem. Abstr.

An. Acad. Bras. Cienc.,  
1975, 47(3-4), 381-6

(Chem.  $CFH_3$ ; III)

JCH<sub>3</sub>

1975

Isotani S.

em. noet

J. Mol Street 1975  
28(1) 61-76 (eng)

(em JCH<sub>3</sub>; III)

50514.7210  
Ch, Ph, TC, DB

CH<sub>3</sub>I

40892

1975

\*4-8929

Hochmann P., Templet P.H., Wang H.-t.,  
McGlynn S.P.

Molecular Rydberg transitions. I.

Low-energy Rydberg transitions

in methyl halides.

(см CH<sub>3</sub>Cl; III)

"J.Chem.Phys.", 1975, 62, N 7, 2588-2595

(англ.)

0364 мик

337 342 956

ВИНИТИ

I-CH<sub>3</sub>

OTT. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do) Handbook Chem. Phys.,  
55th Ed., 1974-75.

51118.8464

 $\text{CH}_3\text{I}$ 

41195

1975

Ch, Me1, Ph, TC

 $\text{CH}_2\text{I}_2$   $\text{CHI}_3$ 

\*9-10561

*Смесь 5-милл.*Kudschadker S.A., Kudschadker A.P.Ideal gas thermodynamic properties of  
the eight bromo- and iodomethanes."J. Phys. and Chem. Ref. Data", 1975, 4, N 2,  
457-470

(англ.)

0504 пик

471 473

ВИНИТИ

CH<sub>3</sub>J

#45 - 8322.

1975

Mann R. Wittel R.  
Monanty B.S.

примод. "Mol. Phys." 1975,  
центр. 29 №2, 485-500  
Список-прим. Кинематическ.

50129.9050

96615

02

1975

Ph, Ch, TC

CH<sub>3</sub>

X

4-8046

Müller A., Rai S.N.

Pseudo-exact force constants from cori-  
ols coupling constants. "J. Mol.  
Struct.", 1975, 24, N 1, 59-71

(англ.)

0291 пик

(см. CH<sub>3</sub>F; III)

261 263 2 0 3.

ВИНИТИ



$\text{CH}_3\text{I}$

Magyar J. it.

1975

(M. N.)

Diss. Abst. Int. B,  
1975, 8 35 (8), 4097

(cur.  $\text{CH}_3\text{F}$ ; III)

50514.1384

Ch, Ex-C, TC

40597

CH<sub>3</sub>I (20)

1975

\* 4 8838

Okafo Ernest N., Whittle Eric. Competitive study of the reactions  $\text{Br} + \text{R}_f\text{I} \rightarrow \text{IBr} + \text{R}_f$  and determination of bond dissociation energies  $D(\text{R}_f\text{-I})$  where  $\text{R}_f = \text{CF}_3, \text{C}_2\text{F}_5, n\text{-C}_3\text{F}_7, i\text{-C}_3\text{F}_7$ , and  $n\text{-C}_4\text{F}_9$ .

"Int. J. Chem. Kinet.", 1975, 7, N2, 287-300  
(англ.)

344

345

349

0357

пик ВИНТИ

1975

CH<sub>3</sub> I Overend T.

Vibr. Spectra and  
cncexp. Struct. Vol. 3., 1975,  
131-238.

● (cell HCN)<sub>III</sub>

CH<sub>3</sub>γ

XIV-6305

1975

Isol B.P., et al.,  
J. Phys. Chem., 1975, 79, (6),  
570-4.

(A.P)

(sol. CH<sub>3</sub>Br ; III)

50314.6702

96615

1975

Ex-C, TC, Ph, Ch

 $\text{CH}_3\text{I}$ 

3212

Whitmer John C., Lewis Brian D. Potential energy distributions and normal coordinates of methyl, methyl- $\text{d}_3$  and partially deuterated methyl chloride, bromide and iodide. "J. Mol. Struct.", 1975, 24, N 2, 317-324

(см.  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ; III)

(англ.) 0324 ПИК

297 299

316

ВИНИТИ

$\text{CH}_3\text{I}$

У-14696

1976

2 Д420. Вращательный спектр высокого разрешения молекулы метилиодида с использованием спектрометра с молекулярным пучком. Burie J., Boucher D., Demaison J., Dubrulle A. The high resolution rotational spectrum of methyl iodide using a molecular beam spectrometer. «Mol. Phys.», 1976, 32, № 1, 289—295 (англ.)

(м.п.)  
Сверхтонкая структура перехода  $J=5 \leftarrow 4$  вращательного спектра основного состояния молекулы  $\text{CH}_3\text{I}$  исследована с помощью спектроскопии молекулярных пучков. Результаты работы совместно с данными традиционной спектроскопии позволили определить с высокой точностью вращательную постоянную  $B$  основного состояния, ряд постоянных центробежного растяжения 4 и 6 порядков, две константы спин-вращатель-

ф. 1977. N2

ной связи, а также константу квадрупольного взаимодействия. Показана необходимость учета связи квадрупольного взаимодействия и центробежного растяжения. Значения констант спин-вращательного взаимодействия не согласуются с полученными ранее методом двойного резонанса. Различие отнесено за счет неучтенной ранее поправки 3-го порядка к квадрупольной энергии. Библ. 15.

70318.9190

Ex-C, Ch, TC

485410

CH<sub>3</sub>I

1976

art. 4941

Böhlig Heinz. Harmonische Kraft-  
felder mehratomiger Moleküle. "Z.  
Chem.", 1976, 16, N 11, 430-435  
(Hem.)

0833 III

791 792 8 2

ВНИИТИ



$\text{CH}_3\text{Y}$

оттиски 4396

1976

конст.  
центр. об.  
расшир.  
(м.п.)

Duncan J. L.,  
J. Mol. Spectrosc.,  
1976, 60, 225-38

● (см.  $\text{BF}_3$ ; III)

CH<sub>3</sub>I

1976

Dublish A.K. et al.

Indian J. Pure Appl. Phys.  
1976. 15(5), 356-9

(see. work.)

(all CH<sub>3</sub>I), III

60701.3376  
Ch, Ph, TC, MGU

41125

1976

CH<sub>3</sub>I

4-13627

Felps S., Hochmann P., Brint P.,  
McGlynn S.P.  
Molecular Rydberg transitions. The lo-  
west-energy Rydberg transitions of s-type  
in CH<sub>3</sub>X and CD<sub>3</sub>S, X=Cl, Br, and I.

"J. Mol. Spectrosc.", 1976, 50, N 3,  
355-379 (англ.)

0654 ЛМК

исл. CH<sub>3</sub>Cl, IV

625 632

646

ВИНИТИ

CH<sub>3</sub> J

XIV - 7709

1976

Isotoni S., et al.

J. Chim. phys. et  
plus-chim. biol. 1976,  
73, NS, 535-9

(all. uoc)

(all CH<sub>3</sub>F) III

70121.8750

Ph, TC

30063

CH<sub>3</sub>J

1976

4873

MacGillivray W. R.

The measurement of widths and pressure-induced shifts of rotational lines in the microwave region.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1976, 9,  
N 14, 2511-2520 (англ.)

0795 глук

7.87

741 755

ВИНИТИ

70126.6609

TO

58661

CH<sub>3</sub> J

1976

\* 4-16504

K p. N 70126.6601

Müller K., Kneubühl F. Coriolis  
coupling in symmetric-top molecules in  
liquids. "Helv. phys. acta", 1976, 49,  
N 5, 702-704 (англ.)

0799 нмк

745 749 7 9 1

ВИНИТИ

CH<sub>3</sub>J

1976

Nieto J. L., et al.

An. quim. Real Soc.  
esp. fís. y quim. 1976,  
72, N<sup>o</sup> 4, 339-44.

(pretextu  
cuer. ucuu)

(cuu CH<sub>3</sub>F) III

CJH<sub>3</sub>  
CJD<sub>3</sub>

\* 48 - 17356

1976

Thirugnanasambandam P.

Indian J. Phys, 1976,

50(5) 527-43 (eng)

(see CDH<sub>3</sub>;

u.n.



$\text{CH}_3^+$

1977

Chace F.J. et al.

Зеленон.  
спектр,  
ср. спектр

Phys. Ser. 1977, 16(5-6), 258-67,  
(Eng)

ср.  $\text{CH}_3\text{Cl}^+ - \text{III}$

CH<sub>3</sub>I

1947

Frost B.S. et al.

м. в. спектр  
квантитативн  
спектроанализ.  
метод

J. Phys. B: Atom and  
Mol. Phys. 1947, 10, N18,  
3649-3657

ам. ДСР-III

CH<sub>3</sub>I

Locum 5320/ 1974.

Gibson M. W.

Can. J. Chem. 1977,  
55, 2837-41.

(I)

70418.2143  
Ch, TC

92073

1977

CH<sub>3</sub>I (soln) \* 45-17799

Ikawa Shun-ichi, Fukushi Kohji,  
Fujiwara Kenji, Kimura Masao. The infrared  
band shapes of methyl iodide in solutions.  
"Bull. Chem. Soc. Jap.", 1977, 50, N1,  
60-64 (АНГЛ.)

0854

341 844

ВИНИТИ

CH<sub>3</sub>I

number 5695

1977

See, also, note.

Kaila R., Dixit L., Gupta P.L.  
Indian J. Pure and Appl. Phys.,  
1977, 15, 238-41.

CH<sub>3</sub>F

unseen 6304 1974

Karlsson L; et al.

Phys. Scr., 1974, 16, 225-34

Vibrational and vibronic  
structure in the ...

all. CH<sub>3</sub>F - III

$\text{CH}_3\text{J}$

$\text{CS}_2$

оттиски 5680

1974

4 Д386. Возмущения молекулярных экстравалентных переходов в плотных средах инертных газов. Messing Itzhak, Raz Baruch, Jortner Joshua. Perturbations of molecular extravalence excitations by rare-gas fluids. «Chem. Phys.», 1977, 25, № 1, 55—74 (англ.)

Описаны результаты эксперим. исследования вакуумных УФ-спектров поглощения «примесных» молекул  $\text{CH}_3\text{J}$  в  $\text{Ar}$  (при плотностях  $\rho = 0 \div 1,4 \text{ г/см}^3$ ) и  $\text{Kr}$  ( $\rho = 0 \div 2,3 \text{ г/см}^3$ ),  $\text{CS}_2$  в  $\text{Ar}$  ( $\rho = 0 \div 1,4 \text{ г/см}^3$ ) и  $\text{CH}_2\text{O}$  в  $\text{Ar}$  ( $\rho = 0 \div 125 \text{ г/см}^3$ ). Получена новая информация о возмущениях средой интравалентных, низших экстравалентных переходов и переходов в валентно-ридберговские состояния, которая может послужить основой для идентификации типа электронного возбуждения. Для низших экстравалентных молекулярных переходов наблюдается относительно большой голубой спектральный сдвиг при средних и высоких плотностях среды; переходы с возбуждением смешанных валентно-ридберговских конфигураций испытывают умеренный голубой

УФ-спектр

(71) B

Ф. 14. 1978

спектральный сдвиг, а интравалентные переходы практически нечувствительны к влиянию среды. Получена также новая информация об энергетике процессов ионизации молекул в плотных средах. Обнаружено, что ридберговские состояния молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$  с  $n=2\div 5$  испытывают большой красный сдвиг при средних плотностях  $\text{Ag}(\rho=0\div 0,5 \text{ г/см}^3)$ . Потенциал ионизации  $E_i$  и эффективная ридберговская постоянная  $G$  для  $\text{CH}_3\text{J}$  в  $\text{Ag}$  уменьшаются от  $G=13,6$  эв и  $E_i=9,55$  эв при  $\rho=0$  до  $G\approx 7,15$  эв и  $E_i=9,08$  эв при  $\rho=0,5 \text{ г/см}^3$ . Для  $\text{CH}_3\text{J}$  и  $\text{CH}_2\text{O}$  в жидком  $\text{Ag}$  идентифицированы состояния Ванье с  $n=2$ . Определены потенциалы ионизации молекул  $\text{CH}_3\text{J}$  и  $\text{CH}_2\text{O}$  в жидком  $\text{Ag}$ , равные  $\approx 8,6$  и  $\approx 10,2$  эв соответственно. Библи. 47. В. С. Иванов



$\text{CH}_3\text{I}$

$\text{H}_2\text{CO}$

Колесбат.  
спрчат.  
Ридберг. переходов

ф. 1978 №1

1978  
1 Д366. Влияние среды на колебательную структуру некоторых молекулярных ридберговских переходов. Messing Itzhak, Raz Baruch, Jortner Joshua. Medium effects on the vibrational structure of some molecular Rydberg excitation. «Chem. Phys.», 1977, 23, № 3, 351—355 (англ.)

ВУФ-спектры поглощения (1700—2000 Å) молекул  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{H}_2\text{CO}$  исследованы в Ar при плотностях 0—1,4 г/см<sup>3</sup>. С помощью статистич. теории рассчитаны формы возмущенных аргоном линий спектра. Показано, что независимые асимметрич. уширения индивидуальных вибронных компонент ответственны за видимые изменения распределения интенсивности в спектре при увеличении плотности среды.



$\text{CH}_3\text{J}^+$

1 Д367. Фотодиссоциация ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$  и  $\text{CD}_3\text{J}^+$ .  
McGilvery D. C.; Morrison J. D. Photodissocia-  
tion of  $\text{CH}_3\text{J}^+$  and  $\text{CD}_3\text{J}^+$ . «J. Chem. Phys.», 1977, 67,  
№ 1, 368—369 (англ.)

С помощью двойного квадрупольного масс-спектро-  
метра и перестраиваемого лазера на красителях полуече-  
ны кривые эффективности фотодиссоциации ионов  
 $\text{CH}_3\text{J}^+$  и  $\text{CD}_3\text{J}^+$  в области энергий квантов 1,8—2,8 эв.  
Энергия электронов, ионизующих молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$  ( $\text{CD}_3\text{J}$ ),  
всего на ~1 эв превышала пороговую, и следовательно,  
были заселены лишь низшие электронные состояния ис-  
ходных ионов. Идентифицированы фотодиссоциацион-  
ные переходы из основного ( $^2E_{3/2}$ ) и первого возбуж-  
денного ( $^2E_{1/2}$ ) состояний ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$  ( $\text{CD}_3\text{J}^+$ ): Резкая  
структура на кривых эффективности фотодиссоциации  
объяснена преддиссоциацией с высоких колебательных  
уровней в валентном колебании C—J состояния  $^2A_1$ .  
Относит. интенсивности колебательных полос заметно  
отличаются у  $\text{CH}_3\text{J}^+$  и  $\text{CD}_3\text{J}^+$ . Полосы резче, а колеба-  
тельные прогрессы короче для иона  $\text{CD}_3\text{J}^+$ . Асиммет-  
ричная форма колебательных полос приписана нераз-  
решенной вращательной структуре. В. С. Иванов

фотодиссо-  
циация

ф. 1978  
N 1

1977

CH<sub>3</sub>JCD<sub>3</sub>J

М. П.

8 Д343. Квадрупольные спектры молекул высокого разрешения. Осипов Б. Д. «Достижения спектроскопии. 18-й Съезд по спектроскопии, Горький, 1977, Ч. 1». М., 1978, 182—193

На основе принципа модулированного двойного резонанса построен микроволн. спектрометр с разрешением 1 Кгц для получения спектров переходов между компонентами квадрупольной сверхтонкой структуры вращательных уровней молекул: накачка ведется мощным клистроном в диапазоне 30—100 Ггц, а сигнальные спектры наблюдаются в диапазоне 100—500 Мгц. На этом спектрометре измерены квадрупольные спектры молекул CH<sub>3</sub>J, CH<sub>3</sub>Br, CD<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>Br. Определены значения постоянных квадрупольной связи  $eqQ$  и коэф. вращательной зависимости  $eqQ$ . М. Р. Алиев



Ф. 1979/18

$\text{CH}_3\text{J}$

1977

5 Д421. Магнитная сверхтонкая структура квадрупольного спектра молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$ . Осипов Б. Д. «Письма в ЖЭТФ», 1977, 25, № 1, 14—17

Создан новый импульсный спектрометр для наблюдения квадрупольных спектров молекул, разрешена магн. сверхтонкая структура квадрупольного спектра молекулы  $^{12}\text{CH}_3^{127}\text{J}$  и обнаружен резонанс Ферми между уровнями  $J=K=3$ ,  $F_1=9/2$  и  $F_1=7/2$ .

сверх-  
тонкая  
структ.

ф. 1977 №5

CH<sub>3</sub>I

Ommatic 5889 1977

Cis. noc.

Uomitus

Skaron S.A., et al.  
J. Amer. chem. Soc.,  
1977, 99, 5253-5261.

70531.3737  
Ch, Ph, TC, MGU

U.17. Rydberg,  
CH<sub>3</sub>I COCl<sub>2</sub>

1977  
\*8-18338

Spence David.

Prediction of low energy molecular Rydberg  
states from Feshbach resonance spectra.

"J. Chem. Phys.", 1977, 66, N 2, 669-674

(англ.)

0883 ппк

(см. Н.С.; III)

833 842 874

ВИНИТИ

CH<sub>3</sub>I

1977

Wang H. J.

"J. Chem. Phys." 1977, 67, 19,  
3940-3946 (англ.)

спектры  
помощи.

см. NY — III

CH<sub>3</sub>I

1977

12 Б232. Самоуширение и самосдвиг  $J=0 \rightarrow 1$  и  $J=1 \rightarrow 2$  вращательных переходов CH<sub>3</sub>Br и CH<sub>3</sub>I. Wen-  
sink W. A., Dijkerman H. A. Self-broadening and  
self-shifting of  $J=0 \rightarrow 1$  and  $J=1 \rightarrow 2$  rotational transitions  
of CH<sub>3</sub>Br and CH<sub>3</sub>I. «J. Phys. Atom and Mol. Phys.»,  
1977, B10, № 17, (англ.)

Самоушир  
самосдвиг

Экспериментально измерены сдвиги и уширения линий  
вращательных переходов: CH<sub>3</sub><sup>79</sup>Br,  $J=0 \rightarrow 1$ ,  $F=3/2 \rightarrow 5/2$ ;  
CH<sub>3</sub><sup>81</sup>Br,  $J=0 \rightarrow 1$ ,  $F=3/2 \rightarrow 5/2$ ; CH<sub>3</sub><sup>81</sup>Br,  $J=1 \rightarrow 2$ ,  $K=1$ ,  
 $J=1/2 \rightarrow 7/2$ , CH<sub>3</sub><sup>127</sup>I,  $J=0 \rightarrow 1$ ,  $F=5/2 \rightarrow 7/2$ , CH<sub>3</sub><sup>127</sup>I,  $J=$   
 $=1 \rightarrow 2$ ,  $K=1$ ,  $F=3/2 \rightarrow 1/2$ , вызванные столкновениями  
молекул. Определены зависимости параметров уширения  
и сдвига линий от температуры. Отмечена сильная  
зависимость параметра сдвига линии от квантовых чи-  
сел  $J, J'$  для молекул типа симметричного волчка.

Ю. Л. Малинкевич

2, 1978, N 12



1977

 $\text{CH}_3\text{J}$  $\text{CF}_3\text{J}$  $\text{CS}_2$ 

(γ)

(+2)

10 Д444. Интерпретация на основании экситонной модели длинноволновых ридберговских полос йодистого метила, трифторйодметана и сероуглерода, растворенных в сжиженных газах. Зеликина Г. Я., Мейстер Т. Г. «Оптика и спектроскопия», 1977, 42, № 6, 1080—1085

Полученные ранее эксперим. данные по поглощению растворов  $\text{CH}_3\text{J}$ ,  $\text{CF}_3\text{J}$  и  $\text{CS}_2$  в сжиженных аргоне, криптоне, ксене, метане и фреоне-14 интерпретированы с помощью модели связанного экситона для ридберговских полос при разных  $t$ -рах. Применение этой модели дает возможность определить потенциалы ионизации молекулы примеси, находящейся в данном растворителе, и выявить ряд других закономерностей. Резюме

ф. 1977 N 10

CH<sub>3</sub>I

summary 6451

1978

89: 51010y Radio-frequency spectroscopy inside a laser cavity; "pure" nuclear quadrupole resonance of gaseous

methyl iodide. Arimondo, E.; Glorieux, P.; Oka, Takeshi (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Phys. Rev. A* 1978, 17(4), 1375-93 (Eng). The highly sensitive method of IR-radio-frequency double resonance inside a laser cavity was applied to the observations of pure nuclear quadrupole resonances of gaseous MeI corresponding to the transitions  $\Delta J = 0$  and  $\Delta K = \pm 1$ . Radio-frequency signals with large signal-to-noise ratios ( $\sim 10^4$ ) were obsd. for many CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>O laser lines. The characteristic pattern of the radio-frequency spectrum specific to each rovibrational level permitted the

спектр -  
резонанс,  
сверх

C. A. 1978. 89 # 6

assignment of the rotational levels, the IR coincidences, and the assocd. far-IR laser transitions unambiguously. From the radio-frequency spectrum the accurate vibrational and rotational dependences of the nuclear-quadrupole coupling const. and the values of the spin-rotation coupling consts. were detd. Because of the high sensitivity of the method, it was possible to observe collision-induced radio-frequency resonances as satellites to main line. This effect not only increases the no. of observable quadrupole resonances, but also provides information on the detailed mechanism of rotational energy transfer. This method of observing pure quadrupole spectra of gases is applicable to any polar sym.-top mol. with hyperfine structure which has rotational levels with double parity.

CH<sub>3</sub>I

11 Д626. Вращательный спектр метилиодида, свободный от эффекта Доплера. Тензоры ядерной квадрупольной связи, спин-вращательного взаимодействия и ядерного экранирования йода. Boucher D., Burgie J., Dangoisse D., Demaison J., Dubrule A. Doppler-free rotational spectrum of methyl iodide. Nuclear quadrupole, spin-rotation and nuclear shielding tensors of iodine. «Chem. Phys.», 1978, 29, № 3, 323—330 (англ.)

1978

М.И.

На микроволн. спектрометре с молекулярным пучком методом лэмбовского провала измерен вращательный спектр молекулы CH<sub>3</sub>I в диапазоне 59—240 Ггц. Идентифицирована сверхтонкая структура линий вращательных переходов с  $J \leq 15$  в основном колебат. состоянии. Анализ спектра выполнен с учетом ядерной квадрупольной связи, спин-вращательного взаимодействия, кватичного и секстичного центробежного искажения и влияния центробежного искажения на квадрупольную связь. Определены значения констант этих взаимодействий:  $B=7501275,70$  кгц;  $D_J=6,3070$  и  $D_{JK}=$

Ф. 1978 N 11

$=98,762$  кгц;  $H_j = -0,0051$ ,  $H_{jk} = 0,04$  и  $H_{kj} = 4,51$  Гц;  
 $eqQ = -1934,136$  Мгц;  $C_{\perp} = -17,40$ ,  $C_{\parallel} = -19,4$ ,  $\chi_j =$   
 $= -1,41$ ,  $\chi_k = -38$  и  $\chi_d = 26,2$  кгц. Вычислены значения  
 компонентов тензора ядерного экранирования  $\sigma_{\alpha\alpha}$  яд-  
 ра J и сопоставлены с значениями  $\sigma_{\alpha\alpha}$  ядра J в  
 8 молекулах. М. Р. Алиев

1978

CH<sub>3</sub>I

M. S. Chiriac

88: 200365b Doppler-free rotational spectrum of methyl iodide. Nuclear quadrupole, spin-rotation and nuclear shielding tensors of iodine. Boucher, D.; Burie, J.; Dangoisse, D.; Demaison, J.; Dubrulle, A. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille I, Villeneuve d'Ascq, Fr.). *Chem. Phys.* 1978, 29(3), 323-30 (Eng). The ground-state microwave spectrum of MeI was remeasured between 59 and 240 GHz with a mol. beam spectrometer and by use of the Lamb dip method. The following mol. parameters were accurately detd.:  $B = 7501275.70(2)$  kHz;  $D_J = 6.3070(2)$  kHz;  $D_{JK} = 98.762(3)$  kHz;  $H_J = -0.0051(6)$  Hz;  $H_{JK} = 0.04(2)$  Hz;  $H_{KJ} = 4.51(3)$  hZ;  $Q = 1934.136(5)$  MHz;  $C_{\perp} = -17.40(6)$  kHz;  $C_{\parallel} = -19.4(5)$  kHz;  $\chi_J = -1.41(4)$  kHz;  $\chi_K = 38(1)$  kHz and  $\chi_d = 26.2(6)$  kHz. The last 3 consts. characterize the interaction of centrifugal distortion with quadrupole coupling. The data are used to det. the elements of the I nuclear magnetic shielding tensor. Comparisons of the shieldings are made for mols. which contain one I atom.



C.A. 1978 88, 126

$\text{CH}_3$  I

1948

содерж.  
в газе.

Hitchcock A.P. et al.  
"J. Electron Spectrosc.  
and Relat. Phenom."  
1948, 13, N3, 193-218 (area)



ср.  $\text{CH}_3\text{Cl}$  - II

$\text{CH}_3^+$

1978

спектр  
фотодисс.

(2Б132) Масс-спектрометр для изучения фотодиссоциации ионов, вызванной лазерным излучением. McGilvery D. C., Morrison J. D. A mass spectrometer for the study of laser-induced photodissociation of ions. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1978, 28, № 1, 81—92 (англ.)

Исследование процессов фотодиссоциации ионов, вызванной излучением перестраиваемого лазера на красителях, выполнено с помощью квадрупольного тандем-масс-спектрометра. В системе три квадруполя смонтированы последовательно, причем 1-й и 3-й используются, как масс-анализаторы, а центральный работает



ж. 1979 № 2



только с переменной составляющей. Монохроматич. излучение, настраиваемое в диапазоне 700—350 нм на 12 частот с интервалами порядка 50 нм, проходит вдоль оси системы навстречу движению ионов образованных в источнике с ионизацией электронным ударом. Управление системой и обработка данных осуществлено с помощью мини-ЭВМ по программе, обеспечивающей увеличение отношение сигнал — шум. Получены спектры фотодиссоциации  $\text{CH}_3\text{J}^+$  с образованием  $\text{CH}_3^+$ , при высоком разрешении по энергии фотонов (1,2 мэв) в области 670—440 нм. Спектры получены для пучка «чистых» ионов с эффективным парциальным давлением образца  $10^{-11}$  мм. Сечения фотодиссоциации измерены с точностью до  $10^{-23}$  см<sup>2</sup>, что значительно превышает пред. результаты. Метод может быть применен, как для молекулярных, так и для отдельных фрагментарных ионов образовавшихся в источнике. М. Туркина

CH<sub>3</sub>J

Ридберг.  
переходы

1948

12 Д415. Молекулярные ридберговские переходы: влияние полей на спектры поглощения в вакуумной УФ-области. Scott J. D., Felps W. S., McGlynn S. P. Molecular Rydberg transitions: field effects in the vacuum ultraviolet. «Nucl. Instrum. and Meth.», 1978, 152, № 1, 231—234 (англ.)

Изложены основы методов «магнитного циркулярного дихроизма» и «электрохромизма» (или электрического линейного дихроизма), а также описана аппаратура, позволяющая реализовать эти методы в вакуумной УФ-области спектра при исследовании природы ридберговских состояний молекул. Изложены возможности обоих методов. В иллюстрационных целях приведены результаты исследования указанными методами перехода  $5p \rightarrow 6s$  молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$ . В. С. Иванов

ф. 1948, N 12

$\text{CH}_3\text{J}$

1978

спектр  
попытки.

1 Д342. Ридберговские переходы в молекулах.  
Ч. XII. Магнитный круговой дихроизм йодистого метила.  
Scott John D., Felps W. Sid, Findley Gary L.,  
McGlynn Seán P. Molecular Rydberg transitions.  
XII. Magnetic circular dichroism of methyl iodide.  
«J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 10, 4678—4687 (англ.)

Получены спектры поглощения и спектры магнитного кругового дихроизма паров  $\text{CH}_3\text{J}$  в области 48000—59000  $\text{см}^{-1}$ . Давление паров изменялось в интервале 0,05—20 мм рт. ст. Предложен метод расчета магн. моментов молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$  в различных ридберговских электронных состояниях. Показано, что знание величин магн. моментов и знаков магнитного кругового дихроизма достаточно для надежной идентификации полос спектров. 4 полосы в исследованной области спектра сопоставлены переходам между основным состоянием молекул  $\text{CH}_3\text{J}$   $^1\Sigma^+$  и возбужденными состояниями  $^3\Pi_2$ ,  $^3\Pi_1$ ,  $^3\Pi_0^+$  и  $^1\Pi_1$ . Обсуждена симметрия высоковозбужденных состояний молекул  $\text{CH}_3\text{J}$ . См. Ч. XI. Wang H., et al., «J. Chem. Phys.», 1977, 67, 3940.

Ф. 1979, N 1

H<sub>3</sub>CY

summa 6773

1978

Scharfenberg P.  
Theor. chim. acta, 1978, 49,  
115-22.

Лавров  
Лавров  
Лавров

CH<sub>3</sub>I

Vallamattam A.J.

1978

Czech. J. Phys., 1978, B28, ~10,  
1157-1163 (review.)

curr. n.

curr. CH<sub>3</sub> Br III)

CH<sub>3</sub>J

М. И.

XIV-9289

2 Б268. Эксперименты по насыщенному поглощению на «одетой» молекуле. Применение к спектроскопии полосы  $\nu_6$  CH<sub>3</sub>J. Arimondo E., Glorieux P. Saturated absorption experiments on a dressed molecule: Application to the spectroscopy of the  $\nu_6$  band of CH<sub>3</sub>J. «Phys. Rev.», 1979, A19, № 3, 1067—1083 (англ.)

Методом внутрирезонаторной спектроскопии насыщ. поглощения (линии CO<sub>2</sub> и N<sub>2</sub>O лазеров в области 10 мкм) исследована полоса  $\nu_6$  молекулы CH<sub>3</sub>J. Наблюдались инвертированные лэмбовские провалы, связанные с ИК—РЧ двухфотонными и многофотонными процессами. Частоты многофотонных ИК—РЧ лэмбовских провалов зависят как от частоты РЧ-поля, так и от частоты лазера. Для описания РЧ-индуцированных резонансов насыщения использована модель «Одетой» молекулы, образованной собственно молекулой и РЧ-полем. В рамках такого формализма РЧ-поле квантуется и совокупность молекулы (или атома) и РЧ-поля рас-

1979

8406

Этмиса

X-1980.112

сматривается как одна квантовая система, гамильтони-  
 ан к-рой в неявной форме зависит от времени. Рассмотр-  
 ены двух-, трех- и четырехуровневые системы. В слу-  
 чае двухуровневой системы РЧ-поле взаимодействует с  
 постоянным дипольным моментом молекулы. В осталь-  
 ных случаях РЧ-поле является квазирезонантным с  
 электронно-разрешенным переходом, включающим один  
 из уровней, накачиваемых лазером. Проанализированы  
 данные по частотам линий насыщенного поглощения и  
 получены след. значения молек. постоянных  $^{12}\text{CH}_3\text{J}$   
 (в мгц):  $\nu_0 + A'(1-\xi)^2 - B' + \frac{3}{4}\eta_k = 26\,552\,195,2$ ,  $[A'(1-\xi) -$   
 $B' + \eta_k] = 231\,643$ ,  $(A' - B') - (A'' - B'') + \frac{3}{2}\eta_k = 1073,0$ ,  
 $B' = 7477,640$ ,  $D_I' = 6,34 \times 10^{-3}$ ,  $D_{Ik}' = 9,95 \times 10^{-2}$ ,  $D_k -$   
 $\frac{1}{4}\eta_k = 1,77$ ,  $D_k'' - \frac{1}{4}\eta_k = 1,68$  (предполагалось, что по-  
 стоянные  $H_I$ ,  $H_{Ik}$ ,  $H_{kI}$  в верхнем и нижнем состояниях  
 равны).

В. М. Ковба

CH<sub>3</sub> I

(number 82.34)

1979

Abbate S, et al.

Chem. Phys. 1979, 20 N3,  
985-95.

all

all. CH<sub>3</sub>Cl - III



CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>

CH<sub>3</sub>I

[number 8878]

1979

Andrews L. et al.

(i) J. Amer. Chem. Soc., 1979

(j) 101 (24), 7958-61

(eq. CH<sub>3</sub>I; III)

CH<sub>3</sub>J

1979

7 Д416. Исследование поглощения лазера CO<sub>2</sub> иодистым метилом. A study of the CO<sub>2</sub> laser absorption in methyl iodide. Alexandrescu Rodica, Velculescu V. G. «Rev. roum. phys.», 1979, 24, № 10, 979—982 (англ.; рез. франц.)

Изучена зависимость поглощения излучения CO<sub>2</sub>-лазера от давления газообразного CH<sub>3</sub>J на линиях генерации  $P(12)$ ,  $P(16)$  и  $P(18)$  полосы 10,6 мк. Наблюдаемое поглощение обусловлено линиями ветви  $^RQ_8(J)$  полосы  $\nu_6$  CH<sub>3</sub>J. По зависимости поглощения от давления газа в интервале 5—180 мм рт. ст. определены частота начала полосы, константа колебательно-вращательного взаимодействия  $\alpha_6^B$  и коэф. самоуширения. Библ. 12. М. Т.

М. Н.

ф. 1980. № 4

CH<sub>3</sub>I<sub>(me)</sub>

immec 8541

1979

Kluk E; et al.

Раман  
сирср  
Ji

Acta phys. polon.,  
1979, A56, (4), 121-128

CH<sub>3</sub> I

1979

Murray Terrence P.  
Bree Thomas.

promax.  
cncxup

Int. of Mass Spectrom.  
and Ion Phys. 1979,  
30, N2, 165-74.



cu. H2B-III

CH<sub>3</sub>I

1979

Mc Glynn S. P. et al

разберов.  
состав.

Spectrosc. Lett. 1979,  
12, N9, 631-35

сш. № - III

1973

 $\text{CH}_3 \text{ J}$  $\text{CH}_3 \text{ CH}_2 \text{ J}$  $\text{J}_i$ (+1)  $\square$ 

12 Д404. Параметры резонанса Ферми метилйодида,  $d_3$ -метилйодида и этилйодида. Fermireconanz-Parameter von Methyljodid, Methyljodid- $d_3$  und Äthyljodid. Nagel B., Binner R., Frunwert I. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1979, 260, № 2, 376—382 (нем.)

Измерены характеристики резонансного дублета Ферми — симметричного валентного колебания и 1 оборота на антисимметричного деформационного колебания группы  $\text{CH}_3(\text{CD}_2)$  метилйодида, дейтерированного метилйодида, и этилйодида в газе, жидкости и растворах в  $\text{CCl}_4$ , тетрахлорэтилене, хлороформе и сероуглероде. Рассчитаны невозмущенные частоты и интенсивности и параметры резонанса. Уточнение параметра резонанса проведено с учетом наложения колебания  $\nu_3 + \nu_5 + \nu_6$ .  
Библи. 12.  
О. В. С.



сп. 1979, № 12

1979

CH<sub>3</sub>J

23 Б229. Параметр ферми-резонансного взаимодействия в метилиодиде, метилиодиде- $d_3$  и этилиодиде. Nagel V. B., Binner R., Fruwert J. Fermiresonanz-Parameter von Methyljodid, Methyljodid- $d_3$  und Äthyljodid. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1979, 260, № 2, 376—382 (нем.)

Спектр  
ИК-поглощения

Изучена область симм. вал. кол.  $\nu_1$  групп CH<sub>3</sub> и CD<sub>3</sub> в спектрах ИК-поглощения CH<sub>3</sub>J, CD<sub>3</sub>J и CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>J в газ. и жидк. состоянии, а также в р-рах в CCl<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> и CHCl<sub>3</sub>. Переход от газа к жидкости и смена р-рителей приводят к изменению условий ферми-резонансного взаимодействия  $\nu_1$  с обертоном  $2\nu_5$  асимм. деф. кол. групп CH<sub>3</sub> и CD<sub>3</sub>. Из полученных данных рассчитаны значения невозмущенных частот, их интенсивности и параметр ферми-резонансного взаимодействия  $W_{ni}$ . Уточнены значения частот колебаний  $\nu_3 + \nu_5 + \nu_6$  и  $2\nu_5$ , попадающих в область ферми-резонансного дублета.

А. В. Бобров

④ CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>J.

☆

20.10.79, 123

$C_{11}H_3$  Y

OM. 8504

1979

Scharfentberg P.

момент.  
сигнал;  
кв. мех.  
факет

Chem. Phys. Lett.,  
1979, 65 (2), 304-309

(см. м.м. сигнал, 10)



СН<sub>3</sub>I

1979

5 Д354. Колебательная релаксация колебаний типа симметрии  $A_1$  в метилйодиде. Vibrational relaxation of the  $A_1$  modes in methyl iodide. Trisdale N., Schwartz M. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2—3, 461—464 (англ.)

Исследованы поляризационные спектры комб. рас. жидкого метилйодида (I) при т-рах 204—287° K. Определены корреляционные ф-ции колебательной релаксации для полос  $\nu_1$  вал. кол. связи C—H (2950 см<sup>-1</sup>), деф. кол.  $\nu_2$  группы C—H (1150 см<sup>-1</sup>) и вал. кол.  $\nu_3$  связи C—I (525 см<sup>-1</sup>). Вычислены значения колебательных моментов  $M_{2\nu}$  для перечисленных колебаний I. Обнаружено, что величины  $M_{2\nu}$  колебаний  $\nu_1$  и  $\nu_3$  практически не зависят от т-ры, тогда как значение  $M_{2\nu}$  колебания  $\nu_2$  существенно уменьшается с тем т-ры.

Si

ф. 1980 № 5

Времена изотропных релаксаций колебательных движений  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  и  $\nu_3$  увеличиваются при повышении  $T$ -ры, причем наиболее резкий рост отмечен для колебания  $\nu_2$ .  
I. Предположено, что процесс колебательной релаксации в I определяется обменным резонансным механизмом переноса энергии, тогда как взаимодействия дипольных моментов слабо влияют на эффективность релаксационных процессов. Показано, что дефазировка колебательных движений в I удовлетворительно описывается в рамках модели бинарных молекулярных столкновений Фишера—Лоберо. Библ. 16.

1980

CH<sub>3</sub>J

9 Д492. Определение постоянных  $l$ -удвоения для состояния  $\nu_6$  молекулы CH<sub>3</sub>J методом инфракрасно-радиочастотного двойного резонанса. Determination of the  $l$ -doubling constants in the  $\nu_6$  state of CH<sub>3</sub>J by an infrared radiofrequency double resonance experiment. Arimondo E., Glorieux P. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 559—561 (англ.)

по эмалевым

 $l$ -удвоени.

Методом двойного ИК-РЧ-резонанса с использованием CO<sub>2</sub>- и N<sub>2</sub>O-лазеров измерены частоты переходов между компонентами  $l$ -удвоения и квадрупольной сверхтонкой структуры ряда вращательных уровней 1-го возбужденного состояния колебания  $\nu_6$ . Определены значения постоянной  $l$ -удвоения состояния  $\nu_6=1$  ( $q_l = -5,914$  МГц) и приращения постоянной квадрупольной связи при возбуждении колебания  $\nu_6$  ( $eqQ\eta_6 = 4,86$  МГц).

М. Р. Алиев

ф. 1981 №9

1980

CH<sub>3</sub>J

18 Б293. ... Определение постоянных  $l$ -удвоения в состоянии  $\nu_6$  CH<sub>3</sub>J методом инфракрасно-радиочастотного двойного резонанса. Arimondo E., Glorieux P. Determination of the  $l$ -doubling constants in the  $\nu_6$  state of CH<sub>3</sub>J by an infrared radiofrequency double resonance experiment. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 559—561 (англ.)

М.И.

Методом ИК—РЧ двойного резонанса определены с высокой точностью постоянные  $l$ -удвоения в состоянии  $\nu_6$  метилиодида. Накачку CO<sub>2</sub> лазером (10,13 мкм Р (34) линия генерации) осуществляли только на уровень  $\nu_6=1$ ,  $J=2$ ,  $K=1$ ,  $A+F=5/2$  (RP(30)  $\nu_6 \leftarrow 0$  линия поглощения) CH<sub>3</sub>J. Наблюдены три РЧ-перехода с этого уровня, частоты к-рых измерены с точностью 50 кГц. Из измеренных частот и постоянных сверхтонкой СТС получены след. значения для постоянных  $l$ -удвоения:  $q_6 = -5,914 \pm 0,015$ ,  $eqQ\eta_6 = 4,86 \pm 0,60$  МГц. Проведено сравнение  $q_6$  и  $eqQ\eta_6$  для CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J, CH<sub>3</sub><sup>81</sup>Br, CH<sub>3</sub><sup>79</sup>Br. Отмечено, что для всех молекул постоянные  $l$ -удвоения имеют одинаковые знаки и один и тот же порядок величины.

В. М. Михайлов

Ж 1981 № 18

CH<sub>3</sub>I

1980

✓ 94: 55055t Determination of the l-doubling constants in the  $\nu_6$  state of iodomethane by an infrared radiofrequency double resonance experiment. Arimondo, E.; Glorieux, P. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 84(2), 559-61 (Eng). The l-doubling const. in the  $\nu_6$  state of MeI was detd. as  $q_6 = -5.914 \pm 0.015$  and the asym. term  $eqQq_6 = 4.86 \pm 0.60$  by using IR radiofrequency double resonance inside the cavity of the IR laser. The sign of  $q_6$  was detd. from the anal. of the double resonance signals in the same way as F. Herlemont et al. (1976) did from an IR microwave double resonance in MeBr. The energy diagram is given for the transitions excited by the laser and the radio frequency transitions obsd. in the double resonance expt.

( $\nu_6$ )

C.A. 1981:94, 28

CH<sub>3</sub>I. [Oimman 9960] 1980

Berthier F.

кв. мех.  
факет.

Israel J. Chem.

св. н. н. н.

1980, 19, 276-82

CH<sub>3</sub>I

ОММСК 10968

1980

7 Д502. Исследование спектра полосы  $\nu_6$   $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  с помощью диодного лазера. Diode laser spectroscopy of the  $\nu_6$  band of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$ . Das Palash P., Malathy Devi V., Narahari Rao K. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 1, 305—312 (англ.)

С помощью перестраиваемого полупроводн. лазера исследованы спектры ИК-поглощения газообразного  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  в области колебательно-вращательной полосы  $\nu_6$  (824—862  $\text{cm}^{-1}$ ). Разрешение при регистрации спектров составляло  $2 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ . Полученные спектры содержат около 300 линий. Анализ линий шести Q-ветвей, соответствующих переходам с вращательных подуровней  $J=3-8$  позволил получить точные значения молекулярных постоянных  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$ . В спектрах наблюдалось также ядерное квадрупольное расщепление, обусловленное спином ядер йода. Библ. 14.

И. К. Спектр  
поглощения

9.1981.167

CH<sub>3</sub>J

Омск 10968 1980

12 Б291. Спектроскопия полосы  $\nu_6$   $^{12}\text{CH}_3\text{J}$  с использованием полупроводникового лазера. Das P. P., Devi V. M., Narahabi Rao K. Diode laser spectroscopy of the  $\nu_6$  band of  $^{12}\text{CH}_3\text{J}$ . «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 1, 305—312 (англ.)

Используя перестраиваемый полупроводниковый лазерный спектрометр, измерен колебательно-вращательный спектр метилиодида в области полосы  $\nu_6$  ( $824\text{—}862\text{ см}^{-1}$ ). Проанализирована вращательная структура шести Q-ветвей:  $^pQ(I, 3)$  ( $I=7\text{—}34$ ),  $^pQ(I, 4)$  ( $I=6\text{—}30$ ),  $^pQ(I, 5)$  ( $I=7\text{—}42$ ),  $^pQ(I, 6)$  ( $I=8\text{—}35$ ),  $^pQ(I, 7)$  ( $I=8\text{—}55$ ),  $^pQ(I, 8)$  ( $I=9\text{—}44$ ) (приведены измеренные волновые числа линий вращательной структуры). Наблюдались также отдельные линии  $^pR(I, K)$  и  $^pR(I, K)$  ветвей. Полученные значения молек. постоянных  $^{12}\text{CH}_3\text{J}$  в состоянии  $\nu_6=1$  (в  $\text{см}^{-1}$ ):  $\nu_6 + (A\xi^2)_6 = 882,9108$ ,  $B_6 = 0,249431$ ,  $A_6 = 5,207589$ ,  $(A\xi)_6 = 1,097131$ ,  $D_6^I = 2,11970 \times 10^{-7}$ ,  $D_6^K = D_0^K$ ,  $H_6^{IKK} = H_0^{IKK}$ ,  $\eta_6^K = 7,227 \times 10^{-6}$ . Для нек-рых линий, при низких  $I$  и различных  $K$  наблюдалась ядерная квадратурная СТС.

В. М. Ковба

4.12

р. 1981. N/2



CH<sub>3</sub>I

summary 10968

1980

94: 9540z Diode laser spectroscopy of the  $\nu_6$  band of iodomethane (carbon-12). Das, Palash P.; Devi, V. Malathy; Rao, K. Narahari (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 84(1), 305-12 (Eng). The vibration-rotation spectrum of the  $\nu_6$  fundamental of MeI was recorded in the 824 to 862 cm<sup>-1</sup> region by using a tunable semiconductor diode laser spectrometer. The rotational anal. performed for 6 Q branches  $PQ(J,3)$ ,  $PQ(J,4)$ ,  $PQ(J,5)$ ,  $PQ(J,6)$ ,  $PQ(J,7)$ , and  $PQ(J,8)$  led to accurate values for several mol. consts. The nuclear quadrupole splitting arising from the spin of I was obsd. very clearly in the low  $J$  transitions and for various  $K$  val.

( $\nu_6$ )

Q. 4-1981-27, 152

CH<sub>3</sub>F

1980

Lakdar T. B. et al

Mol. Phys., 1980, 39, n 4,  
881-94

cell.  
noct.



Cell CH<sub>3</sub>F ; III

$\text{CH}_3\text{J}$

$\text{CD}_3\text{J}$

Ридберг.  
переходы

13 Б63. Ридберговы переходы молекул. XVIII. Вибронное удвоение в йодистом метиле. McGlynn S. P., Felps W. S., Scott J. D., Findley G. L. Molecular Rydberg transitions. XVIII. Vibronic doubling in methyl iodide. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 4925—4931 (англ.)

Экспериментально исследованы низшие по энергии s-ридберговы переходы  $\text{CH}_3\text{J}$  и  $\text{CD}_3\text{J}$ . Показано, что в спектре  $\text{CD}_3\text{J}$  наблюдается удвоение электронно-колебательных полос для переходов в состояния  $^3E_{(0)}$ ,  $^1E_{(1)}$ . Удвоение приписано динамич. эффекту Яна-Теллера, вызванному квазивыврождением этих состояний. Предложена простая модель взаимодействия, хорошо описывающая полученные эксперим. результаты и учитывающая сильное спин-орбитальное взаимодействие, характерное для йодидов. Б. И. Жилинский

Х. 1981. № 13

CH<sub>3</sub>I  
CD<sub>3</sub>I.

молекул.  
Ридберг.  
переходы

1980  
6 Д474. Молекулярные ридберговские переходы.  
XVIII. Вибронное удвоение в иодистом метиле. Molecular Rydberg transitions. XVIII. Vibronic doubling in methyl iodide. McGlynn S. P., Felps W. S., Scott J. D., Findley G. L. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 4925—4931 (англ.)

В четырех переходах  $^3E_{(2)}$ ,  $^3E_{(1)}$ ,  $^3E_{(0^+)}$ ,  $^1E_1 \rightarrow ^1A_1$  в молекулах CH<sub>3</sub>I (I) и CD<sub>3</sub>I (II) обнаружен динамич. эффект Яна — Теллера, величина которого для разных переходов меняется на 2—3 порядка и достигает максим. значения для s-ридберговского перехода в II. Предложена простая модель вибронного взаимодействия, дающая хорошее количеств. согласие с экспериментом. Обсуждены причины значительной величины эффекта при относительно малой величине матричного элемента оператора динамич. возмущения ( $\langle H \rangle \sim 15 \text{ см}^{-1}$ ). Отмечено отсутствие изотопного эффекта для величины  $\langle H \rangle$ . См. Ч. XVII. Scott J. D. et al. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, 4678.  
B. A. E.

Ф. 1981. № 6

1980

CH<sub>3</sub> ICD<sub>3</sub> IC<sub>2</sub>H<sub>5</sub> Iспектр  
метилоидов.  
моделирование

(42) ☑

X. 1980. № 10

10 Б168. Двухфотонная спектроскопия МФИ алкил-йодидов. Parker D. H., Pandolfi R., Standard P. R., El-Sayed M. A. Two-photon MPI spectroscopy of alkyl iodides. «Chem. Phys.», 1980, 45, № 1, 27—37 (англ.)

С использованием лазера на красителях с перестраиваемой частотой излучения исследованы двухфотонные спектры многофотонной ионизации (МФИ) метилиодида (I), метилиодида — d<sub>3</sub>, этилиодида, пропилиодида и бутилиодида в области 49 000—55 000 см<sup>-1</sup>. Показано, что у всех изученных молекул в этой области наблюдается несколько электронных переходов. С помощью методики поляризац. анализа подтверждено предложенное ранее отнесение этих полос поглощения к переходам с 5p<sub>π</sub> валентной орбитали йода на ридберговскую 6S орбиталь этого же атома. Дана интерпретация наблюдаемой колебательной структуре полос поглощения. В исследованном спектре I наибольшую интенсивность имеет переход  $\Sigma^+ \rightarrow \Sigma^+$  к-рый в однофотонных спектрах погло-

шения не наблюдается. Переход  $\Sigma^+ \rightarrow \Delta$ , к-рый согласно лит. данным должен лежать в исследованной области, обнаружить не удалось. Это связано либо с малым сечением двухфотонного поглощения, либо с малой вероятностью его регистрации путем ионизации, либо с комбинацией обеих этих причин. Используя приближение жесткого ротатора рассчитан вращательный контур наблюдаемых полос поглощения, получено хорошее согласие с экспериментом при определенных величинах геометрич. параметров I. Из этих данных определено изменение геометрии I при возбуждении; полученные

результаты свидетельствуют о том, что эти изменения весьма велики. Для перехода  $\Sigma^+ \rightarrow \Sigma^+$  в I происходит существенное увеличение длин валентных связей C—N или угла H—C—N в метильной группе. К. Я. Бурштейн

CH<sub>3</sub>I

семинар 11705 1980

Thyagarajan G., Subbedar  
M.K.

ссылка. Indian J. Pure and

Appl. Phys., 1980, 18,

392 - 395.

CH<sub>3</sub>I. [ammua 10550]. 1980.

Weiszner W.A; et al.

Самодура. J. Phys. B: Atom. and  
энерг. иониз. Mol. Phys, 1980, 13,  
4007-4020.



CH<sub>3</sub>J

CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>

J<sup>+</sup> E<sub>i</sub>, спектр

Омиск 11050

1981

15 Б196. Квазиатомные ридберговские состояния сложных молекул. CH<sub>3</sub>J. Baig M. A., Connera de J. P., Dagata J., McGlynn S. P. Quasi-atomic Rydberg states of a complex molecule: CH<sub>3</sub>J. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 2, L25—L29 (англ.)

С высоким разрешением (0,003 Å) измерен спектр поглощения молекулы CH<sub>3</sub>J в области 1800—1130 Å. Использован 500 МэВ источник синхротронного излучения. В спектре наблюдаются развитые ридберговские ns, np и nd серии полос, сходящихся к состояниям <sup>2</sup>E<sub>3/2</sub>, <sup>2</sup>E<sub>1/2</sub> (пределы серий соотв. 76930,0±1 см<sup>-1</sup> и 81979,0±1 см<sup>-1</sup>) и <sup>2</sup>E<sub>1/2</sub> (v'=1) CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>. Графически проиллюстрировано сходство в положении членов ридберговских серий (<sup>2</sup>Σ<sub>1/2</sub>) ns, (<sup>2</sup>Σ<sub>1/2</sub>) nd и (<sup>2</sup>E<sub>3/2</sub>) nd CH<sub>3</sub>J и Xe.  
В. М. Ковба

2-1281.1615

CH<sub>3</sub>J

Оттиски 11050

1981

8 Д535. Квазиатомные ридберговские состояния сложной молекулы: CH<sub>3</sub>J. Quasi-atomic Rydberg states of a complex molecule: CH<sub>3</sub>J. Baig M. A., Connerade J. P., Dagata J., McGlynn S. P. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 2, L25—L29 (англ.)

Ридберг.  
состояния;  
( $\epsilon_i$ )

В области длин волн 1130—1800 Å с дисперсией 0,63 Å/мм получены спектры поглощения для CH<sub>3</sub>J при давлении 10<sup>-3</sup>—10<sup>-4</sup> мм рт. ст. В спектрах идентифицированы ридберговские серии, сходящиеся к <sup>2</sup>E<sub>1/2</sub>- и <sup>2</sup>E<sub>3/2</sub>-состояниям иона CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>. Показано, что сходимость ридберговских серий в CH<sub>3</sub>J к пределам <sup>2</sup>E<sub>1/2</sub> и <sup>2</sup>E<sub>3/2</sub> и сходимость *ns*, *np* и *nd* ридберговских серий в атоме Хе к пределам <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub> и <sup>2</sup>P<sub>3/2</sub> описывается одинаковой количеств. закономерностью. Отмечено, что предельные наблюдаемые *n* в спектрах поглощения для CH<sub>3</sub>J (*n*~30) выше чем для Хе (*n*=18).

А. Ф. Шестаков

Ф.1981N8

CH<sub>3</sub>I

1981

$\nu_3$ ;

/ 95:178188s Rotational correlation function in methyl iodide. Bansal, M. L.; Deb, S. K.; Roy, A. P. (Nucl. Phys. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400085 India). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 83(1), 83-6 (Eng). The rotational correlation function for MeI was detd. from a Raman measurement of the  $\nu_3(A_1)$  band profile at 296 K. The spectral data satisfy the 2nd-moment criterion. The torque acting on the mol. was obtained.

C.A. 1981, 95, v20

$\text{CF}_3 \text{ } ^+\gamma$

Otmuck 13655

1982

мультиме-  
фотон.  
диссоци-  
ация

Bornbach R., Dannacher F.,  
et al.,

-Chem: Phys., 1982, 66,  
N 3, 403-408.

CH37

1981

Breuerl Y., et al

v<sub>i</sub>

J. chim. phys. et phys.-chim.  
biol., 1981, 78, n 2, 119-125

● (cell H<sub>2</sub>) III

CH<sub>3</sub>J

Оттиск 13813

1981

15 Б177. Ридберговские переходы в молекулах.  
Многоканальные подходы к электронным состояниям:  
CH<sub>3</sub>J. Dagata J. A., Findley G. L., McGlynn S. P.,  
Connegade J.-P., Baig M. A. Molecular Rydberg  
transitions. Multichannel approaches to electronic states:  
CH<sub>3</sub>J. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1981, 24, № 5, 2485—  
2490 (англ.)

Проведен анализ ВУФ-спектра высокого разрешения  
молекулы CH<sub>3</sub>J в энергетич. области ниже 1-го предела  
ионизации на основе теории многоканального квантово-

М. П.

Х. 1982, 19, N 15.

го дефекта (МКДТ). В основу того подхода положено расширенное толкование подтвержденного опытом положения, что ридберговские ( $R$ ) состояния  $\text{CH}_3\text{J}$  могут рассматриваться как слегка возмущенные аналоги  $R$  состояний  $\text{Xe}$ . Дано обоснование использования МКДТ для анализа взаимодействий чисто электронных молек. каналов, по крайней мере, для молекул с высоко локализованными  $R$  хромофорами. Новые  $d$  серии, именно  $nd_{5/2}$  ( $I_1$ ), обнаружены и отнесены в результате МКДТ анализа. Построенные диаграммы Лу-Фано показали, что отнесение, выполненное ранее в спектрах низкого разрешения согласуется с проведенным отнесением в спектре высокого разрешения.

В. М. Михайлов

CH<sub>3</sub>J

Оттиск 13613 1981

7 Д430. Молекулярные ридберговские переходы. Многоканальные приближения для электронных состояний: CH<sub>3</sub>J Molecular Rydberg transitions. Multichannel approaches to electronic states: CH<sub>3</sub>J. Daga-ta J. A., Findley G. L., McGlynn S. P., Con-nerade J.-P., Baig M. A. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1981, 24, № 5, 2485—2490 (англ.):

М.П.

В рамках многоканальной теории квантового дефек-та выполнен анализ ВУФ-спектров поглощения высо-кого разрешения молекул CH<sub>3</sub>J в области энергий до первого потенциала ионизации. При анализе использо-ваны аналогии между молекулой CF<sub>3</sub>J и атомом Хе, т. е. сделано предположение о том, что взаимодейст-вуют лишь чисто электронные молекулярные каналы. Идентифицированы новые *d*-серии, находящиеся к пер-вому потенциалу ионизации молекулы. Библ. 16.

В. С. Иванов

ф. 1982, 18, № 7.



CH<sub>3</sub>J

от. 11622

1981

10 Д403. Спектроскопия с диодным лазером полосы  $\nu_6$ <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>J и полосы  $\nu_6''$ <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ. Diode laser spectroscopy of the  $\nu_6$  band of <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>I and the  $\nu_6''$  band of <sup>12</sup>CH<sub>3</sub>DI. Das Palash P., Malathy Devi V., Narahari Rao K. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 202—208 (англ.)

и.к. спектр,

и.п.

С помощью диодного лазера получены спектры ИК-поглощения паров <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>J и <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ при давл. 0,2—0,5 мм рт. ст. в слое 15—20 м в области 820—866 см<sup>-1</sup>. Приведены частоты линий, измеренные с точностью 0,002 см<sup>-1</sup>, определяемой точностью калибровочных линий OCS, и их отнесение к колебательно-вращательным переходам ветвей <sup>p</sup>Q(J, K) с K=2÷8 и <sup>p</sup>P(J, K), <sup>p</sup>R(I, K) с K=1÷8 полосы  $\nu_6$ <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>J и более сильной компоненты  $\nu_6''$  расщепившейся полосы <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ, линий компоненты  $\nu_6'$  не наблюдалось. Анализ спектра этой молекулы выполнен с учетом ее асимметрии. Приведены колебательные частоты полос, вращательные постоянные и константы центробежной деформации вплоть до Н. Библ. 13.

М. Б. Т.

Р.10.1981

CH<sub>3</sub>J

от. 11622

1981

20 Б218. Диодная лазерная спектроскопия полосы  $\nu_6$  <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>J и полосы  $\nu_6''$  <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ. Das P. P., Devi V. M., Rao K. N. Diode laser spectroscopy of the  $\nu_6$  band of <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>J and the  $\nu_6''$  band <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 1, 202—208 (англ.)

ИК-полосы  $\nu_6$  <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>J и  $\nu_6''$  <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ записаны с разрешением ограниченным доплеровским уширением в области 820—866 см<sup>-1</sup> на перестраиваемом диодном лазерном спектрометре, описание к-рого дано в работе авторов («Appl. Opt.», 1979, 18, 1350—1354). Волновые числа наблюдаемых линий измерены с точностью порядка  $\pm 0,0005$  см<sup>-1</sup>. В ИК-спектре CH<sub>3</sub>J 361 линий отнесены к семи <sup>PQ</sup>(J, K) ветвям с K=2—8 и много линий отнесены к <sup>PP</sup>(J, K) и <sup>PR</sup>(J, K) ветвям с K от 1 до 9. В результате анализа определены спектроскопич. постоянные для состояния  $\nu_6$  CH<sub>3</sub>J. Полученные значения для кватерных центробежных постоянных D<sup>J</sup> и D<sup>JK</sup> хорошо согласуются с вычисленными для модели гармонич. силового поля йодистого метила. В молекуле <sup>12</sup>CH<sub>2</sub>DJ эффект изотопозамещения Н/Д приводит к тому, что вырожденное  $\nu_6$  колебание в CH<sub>3</sub>J расщепляется на  $\nu_6'$  и  $\nu_6''$  колебания, первое типа А/В

CH<sub>3</sub>J; J<sub>i</sub>

X.20.1981

(плоское) и второе типа С (неплоское). Изучены  $PQ(J, K)$  подветви полосы  $\nu_6''$   $\text{CH}_2\text{DJ}$  с  $K$  от 1 до 6. Наблюдено, что для  $J > 30$  линии  $PJ(J, 4)$  подветви расщепляются на две компоненты с неравными интенсивностями. Обработка наблюдаемых частот переходов проведена с помощью приведенного вращательного гамильтониана в форме Уотсона. Из анализа шести  $PQ(J, K)$  подветвей определены спектроскопич. постоянные в гамильтониане Уотсона для состояния  $\nu_6''$ . Установлено, что найденные квартичные центробежные постоянные для состояния  $\nu_6''$  отличаются от квартичных центробежных постоянных для основного колебательного состояния  $\text{CH}_2\text{DJ}$ .

В. М. Михайлов



CH<sub>3</sub>I

Emmura 12364 1981.

Dubreille A., et al

U. S. Census,  
A. 17.

J. Mol. Spectrosc;  
1981, 88, 394-401.

CH<sub>3</sub>J

1981

12 Д492. Исследование спектра поглощения молекулы CH<sub>3</sub>J с помощью перестраиваемого стабилизированного CO<sub>2</sub>-лазера. Гайко О. Л., Лешенюк Н. С., Невдах В. В., Некрашевич Я. И., Орлов Л. Н. «Ж. прикл. спектроскопии», 1981, 35, № 1, 33—37 (рез. англ.)

спектр  
поглощен.

Описана методика и приведены результаты эксперим. исследования спектра поглощения молекулы CH<sub>3</sub>J с помощью перестраиваемого стабилизированного CO<sub>2</sub>-лазера. Измерены коэф. поглощения для различных колебательно-вращательных переходов моды  $\nu_6$  при давл. 65 Па, а также величины отстройки максимумов поглощения от частоты генерации отдельных колебательно-вращательных переходов CO<sub>2</sub>-лазера. Описанная в работе методика позволяет исследовать спектры поглощения различных полусложных молекул с целью поиска новых активных сред для молекулярных лазеров с оптич. накачкой.

Автореферат

Ф. 1981, 18, N 12.

CH<sub>3</sub>I

1981

( $\nu_6$ )

[ 95:105757s Study of the absorption spectrum of the iodomethane molecule using a tunable stabilized carbon dioxide laser. Gaiko, O. L.; Leshenyuk, N. S.; Nevdakh, V. V.; Nekrashevich, Ya. I.; Orlov, L. N. (USSR). *Zh. Prikl. Spektrosk.* 1981, 35(1), 33-7 (Russ). A technique is described and results are presented of exptl. investigation of the MeI mol. absorption spectrum using the tunable stabilized CO<sub>2</sub>-laser. Absorption coeffs. were measured for various vibrational-rotational transitions of the mode  $\nu_6$  under the pressure of 65 Pa, and also the values of absorption max. tuning using generation frequency of sep. vibrational-rotational transitions of the CO<sub>2</sub> laser. The technique described makes possible the investigation of absorption spectra of various semi-complex mols. aiming at discovery of new active media for mol. lasers with optical pumping.

C.A. 1981, 95, v12

CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>

1981

4 Б1684. Исследование индуцированной лазером фотодиссоциации CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup> и CD<sub>3</sub>J<sup>+</sup> при высоком разрешении. Goss S. P., Morrison J. D., Smith D. L. A laser-induced photodissociation study of CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup> and CD<sub>3</sub>J<sup>+</sup> at high resolution. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 2, 757—762 (англ.)

Спектры записаны с разрешением 0,3—0,1 см<sup>-1</sup> (37—12 мкэВ) благодаря наличию эталона Фабри — Перо внутри резонатора. Использовали импульсный перестраиваемый лазер на красителях со световой накачкой и тройной квадрупольный масс-спектрометр, состоящий из двойного анализатора масс и фокусирующего квадруполь на переменном токе. Для калибровки использовали спектр поглощения йода, записываемый одновременно со спектром фотодиссоциации. Давл. в источнике 2·10<sup>-2</sup> Па, ионизационный ток 1 мА, энергия электронов 13 эВ. Для перехода CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>  $\bar{A} \leftarrow \bar{X}E_{3/2}$

Vi,

А  
(H)

X. 1982, 19, N4.

записаны полосы  $(0,1,7) \leftarrow (0,0,0)$  при  $16\,940\text{ см}^{-1}$  и  $(0,0,11) \leftarrow (0,0,0)$  при  $16\,830\text{ см}^{-1}$ . Для  $\text{CD}_3\text{J}^+$  приведен  $(0,0,12) \leftarrow (0,0,0)$  колебательный переход. Обсуждаются методы численной обработки результатов измерения для увеличения разрешения.

Л. И. Лившин





$\text{CH}_3\text{J}^+$ ,  $\text{CD}_3\text{J}^+$

1981

2 Д752. Исследования индуцированной лазером фотодиссоциации ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$  и  $\text{CD}_3\text{J}^+$  с высоким разрешением. A laser-induced photodissociation study of  $\text{CH}_3\text{J}^+$  and  $\text{CD}_3\text{J}^+$  at high resolution. Goss S. P., Morrison J. D., Smith D. L. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 2, 757—762 (англ.)

Спектры фотодиссоциации ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$  и  $\text{CD}_3\text{J}^+$  получены с разрешением  $\sim 0,03 \text{ см}^{-1}$  с использованием тройного квадрупольного масс-спектрометра и перестраиваемого лазера на красителе. Для калибровки шкалы длин волн использован спектр поглощения паров  $\text{J}_2$ . В спектрах ионов частично разрешена вращательная структура. Приведены спектрограммы и результаты предварительного анализа. Библ. 26.

В. С. Иванов

дл. П;

ф. 1982, 18, №2.

$\text{CH}_3\text{J}^+$   
 $\text{CD}_3\text{J}^+$

Оттиск 12275 | 1981

2 Д747. Фотодиссоциация некоторых катионов алкилиодидов. The photodissociation of some alkyl iodide cations. Goss S. P., McGilvery D. C., Morrison J. D., Smith D. L. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 4, 1820—1828 (англ.)

С использованием перестраиваемого лазера на красителе и квадрупольного масс-спектрометра исследована фотодиссоциация (ФД) молекулярных ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$ ,  $\text{CD}_3\text{J}^+$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}^+$ ,  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{J}^+$  и ион-радикала  $\text{CH}_2\text{J}^+$ . Спектры выхода ФД  $\text{CH}_3\text{J}^+$  и  $\text{CD}_3\text{J}^+$  имеют линейчатую структуру, обусловленную преддиссоциацией. Это позволило определить колебательные частоты состояния А этих ионов. Спектры выхода ФД  $\text{C}_2\text{H}_5\text{J}^+$ ,  $n\text{-C}_3\text{H}_7\text{J}^+$  и  $\text{CH}_2\text{J}^+$  состоят из широких безструктурных полос. Высказаны соображения о природе этих бесструктурных полос. Библ. 31. В. А. Ф.

спектры

74

Ф. 1982, 18, №2 .

CH<sub>3</sub>I

1981

Jacques A, Glorieux P.

Laser Spectrosc. 5. Proc.

chemp,

w.n.

5 Int. Conf., Jasper, 29 June-

3 July, 1981. Berlin e.a.,

1981, 140-145.

(cur.  $D_2CO$ ; III)

CD<sub>3</sub>I

1981

1) 8 Б251. Инфракрасный спектр и колебательно-вращательный анализ полосы  $\nu_1$  метилйодида- $d_3$ . Matsuga H., Murata H. Infrared spectrum and vibration-rotation analysis of the  $\nu_1$  band of methyl- $d_3$  iodide. «Chem. Lett.», 1981, № 11, 1609—1612 (англ.)

м.п.,  $\nu_1$ ;

Измерен спектр поглощения полосы  $\nu_1$ -CD<sub>3</sub>I в области 2120—2190 см<sup>-1</sup> на фурье-спектрометре с разрешением 0,08 см<sup>-1</sup>. Наблюдено ~350 линий колебательно-вращательных переходов, большинство из которых оказалось состоящими из двух или более линий. Из анализа спектра, выполненного с учетом скалярных колебательно-вращательных взаимодействий, получены след. спектроскопич. постоянные CD<sub>3</sub>I для основного и возбужденного  $\nu_1$  колебательных состояний.

В. М. Михайлов

Х. 1982, 19, № 8.

СМ<sub>3</sub>I

1981

Pietro W. J., et al.

структурный,  
теоретический,  
расчетный.

Inorg. Chem. 1981, 20,  
(11), 3650 - 3654.

(см. Своден. РВ ; III)

CH<sub>3</sub>J

1981

7 Б1488. Фотофрагментация CH<sub>3</sub>J. Колебательное распределение осколков CH<sub>3</sub>. Sparks R. K., Shobatake K., Carlson L. R., Lee Y. T. Photofragmentation of CH<sub>3</sub>J: Vibrational distribution of the CH<sub>3</sub> fragment. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 8, 3838—3846 (англ.)

Do,

Методом фотофрагментной спектроскопии высокого разрешения изучена фотодиссоциация CH<sub>3</sub>J в газодинамич. молек. пучке в газе-носителе He излучением 266 нм твердотельного лазера. Рассеянные под углом 127° продукты ионизовали электронным ударом и детектировали квадрупольным масс-спектрометром. В канале фотодиссоциации на  $J^*(^2P_{1/2}) + CH_3$  определена заселенность уровней зонтичных колебаний CH<sub>3</sub>. Ширина распределения вращательной энергии в этом канале не превышает 600 см<sup>-1</sup> для каждого колебательного состояния. Для энергии диссоциации связи C—J получено значение  $53,3 \pm 0,7$  ккал/моль. Обсуждаются причины расхождения с модельным расчетом, в к-ром CH<sub>3</sub>J аппроксимируется линейной коллинеарной системой.

Н. И. Бутковская

X. 1982, 19, 47

1981

CH<sub>3</sub>J

11 Б264. CH<sub>3</sub>J: Изотопный сдвиг для <sup>129</sup>I в полосе  
 Wahlen Martin, Tucker George. CH<sub>3</sub>J: iso-  
 tope shift for <sup>129</sup>J in the ν<sub>6</sub> band. «Opt. Commun.», 1981,  
 36, № 1, 39—42 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера на красителе  
 с высоким разрешением измерены изотопные сдвиги  
 вращательных линий в полосе ν<sub>6</sub> CH<sub>3</sub>J по радиоактив-  
 ному изотопу <sup>129</sup>J (время полураспада 1,6·10<sup>7</sup> лет).  
 По результатам широкого сканирования в области вет-  
 вей RQ(I, 3) (909,2 см<sup>-1</sup>) и RQ(I, 4) (917,1 см<sup>-1</sup>) вы-

M, N.

x. 1981. N 11

брано 30 неперекрывающихся линий для измерения  
 изотопных сдвигов для  $\text{CH}_3^{129}\text{J}$ . Средний изотопный  
 сдвиг составляет  $-0,0135 \pm 0,0006 \text{ см}^{-1}$ . Найдена ли-  
 нейная корреляция между измеренными разностями  
 частот  $\Delta\nu_{I,K} = \nu[{}^R Q(I+1, K)] - \nu[{}^R Q(I, K)]$  для  
 соотв-щих пар линий двух изотопных модификаций.  
 Отношение  $^{129}\text{J}/^{127}\text{J}$  в исследуемой газовой смеси опре-  
 делено по линии  ${}^R Q(16,3)$  и найдено равным  $0,032 \pm$   
 $\pm 0,003$ , что хорошо согласуется с масс-спектрометрич.  
 данными. Определены силы линий  ${}^R Q(16,3)$ , равные  
 $2,0 \pm 0,2 \cdot 10^{-21} \text{ см}^{-1} \text{ мол}^{-1} \text{ см}^2$  как для  $\text{CH}_3^{127}\text{J}$ , так и  
 для  $\text{CH}_3^{129}\text{J}$ . Коэффициент самоуширения, измеренный в  
 интервале давлений 4—50 мм, составляет  $32 \pm 2 \text{ МГц/мм}$   
 для линии  ${}^R R(6,0)$ . Из измерений полуширины этой же  
 линии в смеси  $\text{CH}_3^{127}\text{J}$  с воздухом определен коэффи-  
 циент уширения давлением воздуха, равный  $10,4 \pm$   
 $\pm 1,3 \text{ МГц/мм}^{-1}$ . Несмотря на уширение линий, их  
 профиль близок к гауссовскому.

С. Б. Осин



CH<sub>3</sub>J

1981

6 Д446. CH<sub>3</sub>J: изотопный сдвиг для <sup>129</sup>J полосы  $\nu_6$  с помощью перестраиваемого диодного лазера. CH<sub>3</sub>J:

isotope shift for <sup>129</sup>I in the  $\nu_6$  band. Wahlen Martin, Tucker George. «Opt. Commun.», 1981, 36, № 1, 39—42 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения паров CH<sub>3</sub>J с изотопами <sup>127</sup>J и <sup>129</sup>J в слое 3,32 м при давлении ~1 м рт. ст. области полосы  $\nu_6$ . По частотам 30 колебательно-вращательных линий ветвей <sup>R</sup>Q(J, 3) и <sup>R</sup>Q(J, 4) определен изотопный сдвиг, равный 0,0135 см<sup>-1</sup>. Найденное по спектрам содержание радиоактивного йода в природном образце согласуется с результатами масс-спектрометрич. анализа. Определены интенсивности линий <sup>R</sup>Q(16,3) для обеих изотопич. молекул, эти величины совпадают в пределах точности измерений. Измерены коэф. самоуширения и уширения воздухом изолированной линии <sup>R</sup>R(6,0). Библ. 10.

М. В. Т.

И. К. Скелер  
помаи.

ф. 1981. N 6

CH<sub>3</sub>I  
CD<sub>3</sub>I

Ommuck 13320

1981

meopem.  
pacem  
cua. nocm.

96: 112441h On the vibrational structure of methyl iodide.  
I. Cubic and quartic normal mode coupling constants.  
Zygan-Maus, R.; Fischer, Sighart F. (Phys. Dep., Tech. Univ.  
Muenchen, 8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1981,  
63(3), 475-S3 (Eng). A semiempirical model was derived to calc.  
the anharmonic force field to 4th order in the normal mode  
coordinates. The model starts from a generalized harmonic force  
field and incorporates anharmonicities in the form of a Morse  
type potential for valence bonds, van der Waals interaction of H  
atoms and the nonlinear character of the transformation between  
valence and normal modes. Applications to MeI show good  
agreement with exptl. data.

C.A. 1982, 96, N14.

CH<sub>3</sub>I

Омск 13320 1981

6 Д57. О колебательном спектре метилиодида.  
1. Кубические и квартичные константы взаимодействия нормальных колебаний. On the vibrational structure of methyl iodide. I. Cubic and quartic normal mode coupling constants. Zygan-Maus R., Fischer-Sigwart F. «Chem. Phys.», 1981, 63, № 3, 475—483 (англ.)

М.А., Vi

Рассмотрено применение полуэмпирич. подхода к определению кубических и квартичных ангармонических силовых констант многоатомных молекул. Приведены общие выражения ангармонических силовых констант в норм. координатах через гармонич. и ангармонич. силовые константы в нелинейных внутренних колебательных координатах, а также выражения ангармонич.  $x$ -констант в колебательной энергии через частоты колебаний и ангармонич. константы в норм. координатах для молекул с симметрией  $C_{3v}$ . Эти соотношения применены к молекулам CH<sub>3</sub>I и CD<sub>3</sub>I. Для вычисления ангармонич. констант в внутренних координатах исполь-

Ф. 1982, 18, № 6.

(H) X

зована упрощенная модель, в которой потенци. энергия молекулы представляется в виде суммы ф-ций Морза для валентных связей и ф-ций Букингама для взаимодействия несвязанных атомов. Вычисленные таким путем значения  $\chi$ -постоянных существенно отличаются от их эксперим. значений. Тем не менее используемая упрощенная модель позволяет выявлять наличие Ферми-резонанса между возбужденными колебательными состояниями.

М. Р. Алиев.

CH<sub>3</sub>I

1981

$\nu_1$ ;

[ 96: 112442j On the vibrational structure of methyl iodide:  
II. Relaxation pathways in the 3000 cm<sup>-1</sup> energy regime.  
Zygan-Maus, R.; Fischer, Sigbert F. (Phys. Dep., Tech. Univ.  
Muenchen, 8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1981,  
63(3), 485-90 (Eng). Model calens. for state collision induced  
vibrational relaxation rates were performed. The model includes  
intramol. couplings to 4th order. Fermi resonance interactions  
between the  $\nu_1$  CH-stretching mode and overtones or higher  
order combination tones are essential to understand the rapid  
energy relaxation into these states.

C. A. 1982, 96, N 14.

CH<sub>3</sub>J

1982

4 Д591. Определение константы резонансного диполь-дипольного взаимодействия по полосе  $2\nu_2$  жидкого йодистого метила. Estimation of the liquid-state transition dipole interaction constant from the  $2\nu_2$  mode of methyl iodide. Bagiln F. G., Wilkes L. M. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 19, 3793—3796 (англ.)

$\nu_i$ , спектр

Получены спектры комб. рас. жидкого CH<sub>3</sub>J и его раствора в CD<sub>3</sub>J в области полос  $\nu_2=1249\text{ см}^{-1}$  и  $2\nu_2=2470\text{ см}^{-1}$ . При записи полосы  $2\nu_2$  производилось накопление сигнала при многократном (до 600 раз) сканировании полосы. Для исключения аппаратурных искажений выполнена деконволюция спектра, и из полученных осциллирующих кривых с помощью ЭВМ найдены контуры полос, оптимально описывающие центральную часть полосы или ее крылья. Эффект изотопич. разбавления, проявляющийся в полученных т. обр. параметрах полос, интерпретирован авторами как результат изменения возмущения колебания  $2\nu_2$  резонансными диполь-дипольными взаимодействиями в чистой жидкости. Библ. 28.

М. В. Т.

ф. 1983, 18, № 4.

CH<sub>3</sub>I

1982

( $\nu_3$ )

97: 63386d Rotational and angular momentum correlation functions in methyl iodide. Bansal, M. L.; Deb, S. K.; Roy, A. P. (Nucl. Phys. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *Proc. Nucl. Phys. Solid State Phys. Symp.* 1981 (Pub. 1982). 24 C, 125-6 (Eng). Raman measurement of the  $\nu_3(A_1)$  vibration-rotation band profile in MeI is presented. The data suggest that there is an interval of time for which the angular momentum correlation function is neg. This feature cannot be explained by extended diffusion models.

C. A. 1982, 97, N8.

CH<sub>3</sub>J

1982

2 Д520. Исследование температурной зависимости переориентации молекул CH<sub>3</sub>J по спектрам комбинационного рассеяния. Study of temperature dependence of reorientational motion in CH<sub>3</sub>J by Raman scattering. Bansal M. L., Deb S. K., Roy A. P. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8 Int. Conf., Bordeaux, 6—11 Sept., 1982». Chichester e. a., 1982, 351—352 (англ.)

спектр

Исследована форма вращательного контура полосы  $\nu_3$  в спектре комб. рас. жидкого CH<sub>3</sub>J в интервале  $t$ -р 296—217 К. Рассчитаны 2-й момент полосы, среднеквадратичный тормозящий момент, вращательная корреляционная ф-ция, время вращательной релаксации и корреляционная ф-ция углового момента молекулы  $A_J(t)$ . На некотором интервале времени ф-ция  $A_J(t)$  отрицательна, что не реализуется в диффузионной модели. Возможность изменения направления углового момента подтверждается расчетами по методу статистич. моделирования жидкости. М. В. Т.

ср. 1983, 18,  
112



CH<sub>3</sub>I  
CD<sub>3</sub>I

1982

№ 16 Б1179. Многофотонная ионизация йодистого метила и селективная ступенчатая ионизация метильного радикала. Dapton J., Zacharias H., Rottke H., Welge K. H. Multiphoton ionization of methyl iodide and selective stepwise ionization of methyl radicals. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 5, 2399—2406 (англ.)

Исследовали бесстолкновительную многофотонную ионизацию (МФИ) изотопов CH<sub>3</sub>I и CD<sub>3</sub>I. Использовали только 4-ю гармонику 266 нм излучения лазера на иттрийалюминиевом гранате, активированном неодимом, длительность импульса 6—7 нс, энергии до 10 мДж, или эту же гармонику совместно со 2-й гармоникой излучения импульсного лазера на красителе со сдвигом с помощью ВКР в сжатом H<sub>2</sub> в область 215 нм, где CH<sub>3</sub> и CD<sub>3</sub> резонансно поглощают свет в полосе перехода (O, O) (B<sup>2</sup>A<sub>1</sub> ← X<sup>2</sup>A<sub>2</sub>''). Энергия импульсов до 30 мкДж, длительность 5 нс. Лазеры синхронизованы. Сняты масс-спектры ионов в зависимости от мощности, давл. и частоты. Обсуждается механизм МФИ. Л. И. Лившин

Многофотон-  
ионизация

✓  
(+1)

х. 1982, 19, N 16.

CH<sub>3</sub>, CD<sub>3</sub> (ступенчат.  
ионизация)

CH<sub>3</sub>Y

10mmuck 16011/ 1982

лазерный  
спектр

Eng R. S., Ku R. T.,  
Spectrosc. Lett., 1982,  
15, N10-11, 803-929.

CH<sub>3</sub> J  
CD<sub>3</sub> J

1982

12 Д738. Спектр многофотонной ионизации метил-иодида с промежуточным резонансом в области полосы А. The methyl iodide multiphoton ionization spectrum with intermediate resonance in the A-band region. Gedanken A., Robin M. B., Yafet Y. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4798—4808 (англ.)

С использованием различных перестраиваемых лазеров на красителях получены спектры многофотонной ионизации газообразных молекул CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J. Промежуточные уровни локализованы в областях переходов 5рл→σ\* (полоса А, 30 000—45 000 см<sup>-1</sup>), 5рл→6s (~50 000 см<sup>-1</sup>), 5рл→6р (57 000—65 000 см<sup>-1</sup>). Большинство компонент спектров многофотонной ионизации идентифицированы. Установлена роль фрагментов молекулы (CH<sub>3</sub>, J) в процессах возбуждения молекулы при различном числе поглощенных квантов. Авторы отмечают, что им удалось получить новую спектроскопическую информацию о важной для фотохимии молекуле и установить природу системы переходов n→σ\*А. Библ. 24.

спектр, *V*

ср. 1982, 18, N 12

CH<sub>3</sub> I  
CD<sub>3</sub> I

1982

22 Б165. Спектр многофотонной ионизации иоди-  
стого метила с промежуточным резонансом в области  
А-полосы. Gedanken A., Robin M. B., Yafet Y.  
The methyl iodide multiphoton ionization spectrum with  
intermediate resonance in the A-band region. «J. Chem.  
Phys.», 1982, 76, № 10, 4798—4808 (англ.)

С помощью время-пролетного масс-спектрометра из-  
мерены спектры многофотонной ионизации МФИ газ.  
(0,1 Торр) CH<sub>3</sub>I (I) и CD<sub>3</sub>I (II) через промежут. резо-  
нанс в области «А-полосы» перехода  $5p_{1/2} \rightarrow 6s$  (28 000—  
32 000 см<sup>-1</sup>) с последующим переходом в  $6p$  — ридбер-  
говские состояния и ионизацией электрич. полем,  
200 В/см. Использовался перестраиваемый в области  
14 100—17 400 см<sup>-1</sup> лазер на красителе. При удвоении  
частоты излучения лазера (28 000—32 000 см<sup>-1</sup>) резо-  
нансное поглощение молекул I, II заменялось узкими  
резонансами, связанными с  $^2P_{1/2}$  и  $^2P_{3/2}$  уровнями атома  
иода и резонансами метильного радикала, аналогично.

спектры

Х. 1982, 19, N 22.

известному однофотонному промежуточ. резонансу в области «А-полосы» I. Начиная с частоты накачки  $16\,000\text{ см}^{-1}$ , переход  $5p\pi \rightarrow 6p$  в I, II наблюдался как результат четырехфотонного  $(2+2)$  поглощения. Сделаны отнесения максимумов вибронной структуры при двухфотонном поглощении в области «А-полосы». Различия в интенсивности спектров МФИ при однофотонном и двухфотонном резонансе в области «А-полосы» объясняются возбуждением непосредственно в диссоциат. уровне состояний  $A_1$  или  $E$  в первом и в связанное  $A_2$ -состояние во втором случае. А. Н. Курский

CH<sub>3</sub>Y

1982

CD<sub>3</sub>Y

Gompf J., Versmold H.,  
et al.

Vi;

Ber. Bunsenges. Phys. Chem.,  
1982, 86, N 12, 1114-1123.

(cor. CH<sub>3</sub>Cl; III)

CH<sub>3</sub>I

1982

12 Д706. Динамика фотофрагментации молекул CH<sub>3</sub>I на длинах волн 248 и 266 нм: колебательные распределения в «зонтичном» колебании  $\nu_2$  групп CH<sub>3</sub>. Photofragmentation dynamics of CH<sub>3</sub>I at 248 and 266 nm: Vibrational distributions in the CH<sub>3</sub> ( $\nu_2$ ) «umbrella» mode. Hermann Heinz W., Leone Stephen R. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4766—4774 (англ.)

Спектр

Получены спектры ИК-излучения ( $600-1200\text{ см}^{-1}$ ) продуктов фотодиссоциации молекул CH<sub>3</sub>I (I) под действием световых импульсов 4-й гармоники неодимового лазера и эксимерного KrF-лазера ( $\lambda=266$  и 248 нм соответственно,  $P=20-40$  мДж,  $\Delta t=20$  нс). Проведен анализ распределения населенности колебательных подуровней неплоского деф. колебания  $\nu_2$  групп CH<sub>3</sub> I. Отмечено, что избыток энергии в метильных группах после фотодиссоциации I распределяется

р. 1982, 18, № 12

по 10 подуровням колебания  $\nu_2$ , причем макс. населенность зарегистрирована для подуровня  $n=2$ . Обсуждены теоретич. модели распределения энергии по колебательным подуровням метильного радикала. Показано, что возбуждение других колебаний I при фотодиссоциации не происходит, а заселенности вращательных состояний I и метильного радикала идентичны. Библ. 15  
И. В. А.



JCH<sub>3</sub>

1982

Isotani Sadao, Alix

Alain J.P., et al.

Vi An. Acad. Brasil. Cienc.,  
1982, 54, N1, 41-57.

( C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>FC<sub>2</sub>H<sub>3</sub>; III)

CH<sub>3</sub>I

1982

9 Д291. Точное временное распространение волнового пакета. Применение к фотодиссоциации метилиодида. Exact time-dependent wave packet propagation. Application to the photodissociation of methyl iodide. Lee Soo-Y., Heller Eric J. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 6, 3035—3044 (англ.)

расчет сече-  
ний фото-  
диссоциации

Процедура вычисления распространения полуклассич. волн пакета гауссовой формы обобщена на квантовый случай путем использования зависящего от времени ортогонального базиса для разложения временной ф-ции. Подход применен для расчета полных и парциальных сечений фотодиссоциации молекулы CH<sub>3</sub>I в псевдотриатомном приближении (H<sub>3</sub>—C—I). Полученные результаты по парциальным сечениям расходятся с данными вычислений в стационарном подходе, проведенных с теми же самыми поверхностями потенц. энергии. Библ. 25.

А. Ф. Шестаков

ср. 1982, 18, № 9

$\text{CH}_3$  I

1982

Miller J. C., Compton R. N.  
et al.

Laser Techn. Extreme Ultra-  
violet Spectrosc. Meet., Boul-  
der, Colo, March 8-10, 1982.

срелмр

New York, 1982, 368-377.

(сч. Бензол.  $\text{C}_6\text{H}_6$  ; III)

CH<sub>3</sub>Y

1982

Nicolaïsen Flemming M.,  
Hansen J. Stokkebro.

Chem.

noem.

Mol. Phys. 1982, 47(6),  
1265-75.

(Chem. CH<sub>4</sub>; III)

CH<sub>3</sub>I

Ommuck 14108

1982

Niessen W., Asbrink L,  
Bieri G.,

спотозелкюр.

чекюр. J. Electron. Spectrosc.  
and Relat Phenom,  
1982, ● 26, N 2, 173-201

C.A. 1978, 89, N26,

CH<sub>3</sub>I

1982

' 97: 30584p Far infrared and microwave spectral studies on the molecular dynamics and interactions of methyl iodide in carbon disulfide solution. O'Neill, G. P.; Khuen, A.; Yarwood, J.; Birch, J. R.; Price, A. H. (Dep. Chem., Univ. Durham, Durham, UK DH1 3LE). *J. Mol. Struct.* 1982, 80, 383-8 (Eng). The far-IR and microwave spectra of MeI in dil. soln. in CS<sub>2</sub> was used to measure the relaxation times and correlation function for dipole reorientation in this particular medium: Rotation is faster than in the liq. phase due to removal of intermol. correlations. The short time part of the correlation function is distinctly nonexponential, and this part of the power spectrum is fitted to a model which enables the intermol. mean square torque to be detd. The spectral 2nd moment agrees well with that calcd. using the classical rotational energy indicating that induced dipole absorption is not of major importance in this soln.

UK Chemist

C.A. 1982, 97, N4

CH<sub>3</sub>I

Оттиск 14393

1982

12 Д635. Спектр поглощения CH<sub>3</sub>I в ВУФ области.  
The absorption spectrum of CH<sub>3</sub>I in the extreme VUV.  
O'Sullivan G. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.»,  
1982, 15, № 9, L327—L330 (англ.)

Сфотографирован спектр поглощения CH<sub>3</sub>I в области  
80—270 Å. В спектре доминируют переходы с возбуж-  
дением подболочки 4d йода. Идентифицированы диск-  
ретные переходы  $^1A_1 \rightarrow ^1A_1$ ,  $^1E$  и континуум  $4d \rightarrow ef$ .  
В результате анализа спектра определено значение  
спин-орбитального расщепления  $4d_{3/2} - 4d_{5/2}$  в атоме  
йода:  $(1,72 \pm 0,05)$  эВ.

В. С. Иванов

М.П.

ор. 1982, 18, N 12



CH<sub>3</sub>I

[Ommuck 14393] 1982

' 97: 63425r The absorption spectrum of methyl iodide in the extreme VUV. O'Sullivan, G. (Phys. Dep., Univ. Coll., Dublin, Ire. 4). *J. Phys. B* 1982, 15(9), L327-L330, 1 plate (Eng). The absorption spectrum of Me iodide was photographed in the wavelength region 80-270 Å. Photoexcitation of the I 4d subshell dominated the spectrum, giving rise to discrete  $1A_1 \rightarrow 1A_1$ ,  $1E$  transitions and a giant  $4d \rightarrow \epsilon f$  continuum resonance. An anal. of the transitions is given and a value of 1.72 eV deduced for the  $4d_{3/2}-4d_{5/2}$  spin-orbit splitting in the I atom.

check mp  
now 10/11/82.

C. A. 1982, 97, N8.

CH<sub>3</sub>J

(Оттиск 14393) 1982

24 Б201. Спектр поглощения CH<sub>3</sub>J в крайней ВУФ-области. O'Sullivan G. The absorption spectrum of CH<sub>3</sub>J in the extreme VUV. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 9, L327—L330 (англ.)

Сфотографирован спектр поглощения йодистого метила в области 80—270 Å. Наблюдали две дискретные серии с участием спин-расщепленных 4d основных уровней йода (4d→a<sub>1</sub><sup>\*</sup>, 6pe, 6pa<sub>1</sub>, 4p, 200—250 Å) и резонансный континуум 4d→δf (100—170 Å). Пределы серий — 56,66 и 58,3 эВ, величина спин-орбитального расщепления 4d<sub>3/2</sub>—4d<sub>5/2</sub> — 1,72±0,05 эВ. Энергии уровней 4d<sub>5/2</sub>, 4d<sub>3/2</sub>, 5p, 6s, 6p, 5d, 7p; эффективные квантовые числа серий 4d→np (n=5—7) для CH<sub>3</sub>J сопоставляются с аналогичного рода данными для атомарного ксенона и молекул J<sub>2</sub>.

В. М. Ковба

спектр,  
м.п., &i;

X. 1982, 19, N24

$\text{CH}_3\text{I}^+$

[Оммуек 14480]

1982

фотонпре-  
диссоциа-  
ция,  
 $\nu_i$ , пара-  
метры  
спектрал.  
расщеплен.

Tadjeddine M., Bou-  
choux F., et al.,

Chem. Phys., 1982, 69,  
N 1-2, 229-246.

СНЗУ

Дм. 16649

1983

8 Д582. Изучение колебания  $\nu_2$  молекул метилйодида методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Spectroscopic studies of the  $\nu_2$  mode of methyl iodide by Raman spectroscopy. Baglin F. G., Versmold H. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, № 6, 656—657 (англ.)

Получены поляризационные спектры комб. рас. ( $1190-1280\text{ см}^{-1}$ ) молекул метилйодида (I) в газовой фазе при возбуждении лазерной линией  $514,5\text{ нм}$  мощностью  $0,8\text{ Вт}$ . Обнаружено существенное уменьшение полуширины поляризованной линии комб. рас.  $1240\text{ см}^{-1}$  колебания  $\nu_2$  этих молекул при уменьшении давления газа I. В дипольном приближении проведен теоретич. анализ процесса дефазировки колебания  $\nu_2$  I для кубич. плотнейшей упаковки молекул I в конденсированной фазе и взаимодействия молекул I на расстоянии  $r$  по закону  $1/r^6$ . Предположено, что наблюдаемая полуширина линии комб. рас.  $\nu_2$  I на  $\approx 75\%$  определяется процессами дефазировки при взаимодействии наведенных диполей и на  $\approx 25\%$  — процессами бинарных столкновений и обменными механизмами.

И. В. А.

спектр,  $\nu_2$ 9.1983, 18,  
N 8

CH<sub>3</sub>I

Ом. 16649 1983

17 Б290. Изучение колебания  $\nu_2$  метилиодида методом спектроскопии комбинационного рассеяния. Spectroscopic studies of the  $\nu_2$  mode of methyl iodide by Raman spectroscopy. Baglin F. G., Versmold H. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, № 6, 656—657 (англ.)

При 30° и давл. 1 и 1600 бар с разрешением 0,5 см<sup>-1</sup> измерены поляризац. спектры КР CH<sub>3</sub>I (I) в области полосы деф. кол.  $\nu_2$ (CH<sub>3</sub>). При 1 и 1600 бар значение частоты в максимуме полосы  $\nu_2$  составляло 1240,9 см<sup>-1</sup>, степень деполяризации 0,06, полуширина 5,4 и 7,1 см<sup>-1</sup>, соотв. В приближении кубич. плотной упаковки и потенциала взаимодействия  $1/r^6$  с использованием данных о плотности I при 1 и 1600 бар рассчитано изменение в величине диполь-дипольного взаимодействия между молекулами I в жидкости, составившее 18%, что согласуется с барич. изменением полуширины полосы  $\nu_2$ . Сделан вывод, что дефазировка колебаний за счет диполь-дипольного взаимодействия примерно на 3/4 определяет ширину полосы  $\nu_2$  в I, что согласуется с пред. данными авторов, полученными с использованием изотопного разбавления.

А. Н. Курский

$\nu_2$

X. 1983, 19,  
N 17

$\text{CH}_3\text{J}^+$

Om. 16295 1983

7 Д563. Фотодиссоциационные спектры ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$ , полученные методом многофотонной ионизации. Photo-dissociation spectrum of  $\text{CH}_3\text{I}^+$  prepared by multiphoton ionization. Chupka William A., Colson Steven D., Seaver Mark S., Woodward Anne M. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 95, № 3, 171—176 (англ.)

Описан метод, в котором многофотонная лазерная ионизация молекулярного пучка или сверхзвуковой газовой струи использована для получения ионов с контролируемым электронным и колебательным состоянием с заданным или холодным распределением по вращательным уровням. Сканирование длины волны излучения второго лазера позволяло снимать фотодиссоциационные спектры полученных ионов, определяемые по интенсивности ионного сигнала осколков фотодиссоциации с конкретным массовым числом. Исследования проведены для пучков молекул  $\text{CH}_3\text{J}$  и их смесей с He. Полученные спектры указывают на существование по-

М.П;

оп. 1983, 18, № 7

рога для фотодиссоциации, равного  $12,244 \pm 0,009$  эВ, и обладают существенной простотой в сравнении с фотодиссоциационными спектрами, полученными другими методами, что позволило обнаружить ряд новых полос. Анализ показал, что требуется пересмотр существующих спектроскопич. постоянных  $\text{CH}_3\text{J}^+$ .

А. П. Зуев



$\text{CH}_3\text{J}^+$

DM - 16295

1983

14 Б128. Фотодиссоциационный спектр  $\text{CH}_3\text{J}^+$ , образованных в процессе многофотонной ионизации. Photo-dissociation spectrum of  $\text{CH}_3\text{J}^+$  prepared by multiphoton ionization. Chupka W. A., Colson S. D., Seaver M. S., Woodward A. M. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 95, № 3, 171—176 (англ.)

С помощью время-пролетной масс-спектрометрии измерены фотодиссоциац. спектры (ФДС) ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$ . Для приготовления последних в выбранных электронных, колебательных и вращательных состояниях исходный пучок нейтральных молекул  $\text{CH}_3\text{J}$  облучался лазером с подстраиваемой длиной волны ( $\lambda$ ) в области 364,8—367 нм двухфотонной резонансной ионизации. Вращательная температура пучка  $\text{CH}_3\text{J}$  понижалась путем использования в системе напуска газа сверхзвукового сопла и примешиванием гелия к исследуемому газу. Образующиеся таким образом ионы  $\text{CH}_3\text{J}^+$  затем диссоциировали под действием 2-го лазера с  $\lambda$  из диапазона 573,2—599,4 нм. Выявлен ряд ранее скрытых линий в ФДС, с высокой точностью (0,009 эВ) определен порог диссоциации  $\text{CH}_3$ —12,244 эВ, исправлены найденные ранее значения колебательных констант для  $^2\pi_{1/2}$  состояния иона  $\text{CH}_3\text{J}^+$ .

О. А. Басченко

М.П.;

Х. 1983, 19, 114.



СНЗ

1983

№ 8 Л167. Магнитный колебательный круговой дихроизм растворов метил-галогенидов. Magnetic vibrational circular dichroism of methyl halides in solution. Devine T. R., Keiderling T. A. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 12, 5796—5801 (англ.)

Получены спектры магнитного колебательного кругового дихроизма (МККД) растворов ряда метил-галогенидов ( $\text{CH}_3\text{J}$ ,  $\text{CH}_3\text{Br}$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{CH}_3\text{F}$ ) в  $\text{CCl}_4$ . Отмечено, что вопреки имеющимся теоретич. моделям МККД для валентных колебаний  $\text{C—H}$  типов  $A_1$  и  $E$  обнаружен преимущественно  $B$ -терм. Установлено, что сигнал МККД этих двух мод противоположен по знаку для каждого из исследованных метил-галогенидов, а относит. интенсивность сигнала зависит от галогена. Подчеркнуто, что аналогичные результаты обнаружены и в области деформац. колебаний  $\text{CH}_3$ . Для сравнения представлены сигналы МККД валентной моды  $\text{N—H}$  в  $\text{NH}_3$ . Библ. 15.

Е. В. Викторова

43

ф. 1984, 18, № 8

CH<sub>3</sub>J

от. 19217

1983

1 Л173. Резонансы, индуцированные столкновениями молекул, в радиочастотной спектроскопии внутри резонатора инфракрасного лазера. Collision-induced resonances in radio-frequency spectroscopy inside the cavity of an infrared laser. Glorieux P., Arimondo E., Oka T. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 12, 2133—2141 (англ.)

резонанс.  
переходы

Методом двойного ИК-РЧ-резонанса внутри резонатора CO<sub>2</sub>-лазера исследованы боковые сателлиты на сигналах двойного резонанса, соответствующие РЧ-переходам между компонентами квадрупольной структуры вращательных уровней молекул CH<sub>3</sub>J и CH<sub>3</sub>Br, а также переходам между компонентами асимметричного К-удвоения уровней H<sub>2</sub>CO, ND<sub>2</sub>CO и HCOOH. Боковые сателлиты наблюдаются на линии генерации лазера при РЧ-накачке исследуемых переходов за счет столкнов.

(+4) X

о.р. 1984, 18, n1

тельного переноса заселенности к ИК-переходам. Обнаружены сателлиты, соответствующие столкновительным переходам с  $\Delta J \leq 9$ . Показано, что переходы с  $\Delta J > 1$  являются в основном каскадными. Анализ результатов проведен с использованием кинетич. ур-ний и показано, что скорость молекул при столкновениях практически не изменяется, т. е. столкновительные переходы происходят при сохранении внутренней энергии.

М. Р. Алиев

CH<sub>3</sub>I

1983

CD<sub>3</sub>I

Harada Kensuke, Tanaka Keiichi, et al.

Pierson;

J. Mol. Spectrosc.,  
1983, 98, N2, 349-374.

(see CD<sub>3</sub>Br; III)

CH<sub>3</sub>I  
CD<sub>3</sub>I

1983

7 Д564. Фотофрагментация молекул CH<sub>3</sub>I, CD<sub>3</sub>I и CF<sub>3</sub>I. Photofragmentation of CH<sub>3</sub>I, CD<sub>3</sub>I and CF<sub>3</sub>I. Formation of I(<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>) as a function of wavelength. Hunter Tom F., Lunt Stuart, Kristjansson Kristjan S. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1983, Part 2, 79, № 2, 303—316 (англ.)

Методом оптоакустич. спектроскопии, с использованием отдельных линий в области 247,5—312,5 нм, получены спектральные зависимости квантовых выходов фоторазложения паров CH<sub>3</sub>I, CD<sub>3</sub>I и CF<sub>3</sub>I с образованием атомов J(<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>, <sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>). По эксперим. данным вычислены соответствующие коэф. ветвления. Для каждой из исследованных молекул обнаружены три полосы поглощения  $n \rightarrow \pi^*$ . Результаты сопоставлены с данными других авторов. Показано, что эксперименты с диспергированным, спектрально-узким возбуждающим излучением позволяют существенно повысить информативность оптоакустич. методики. Библ. 44. М. Т.

спектр

41

гр. 1983, 18, № 7 CF<sub>3</sub>I

CH<sub>3</sub>J

От. 17920

1983

5 Б1223. Проверка значения вращательной постоянной  $A_0$  иодистого метила на основе зависимости диагонального кориолисова взаимодействия от вращения. Matsuura H., Murata H. Examination of the rotational constant  $A_0$  for methyl iodide on the basis of rotational dependence of diagonal Coriolis coupling. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 2, 449—450 (англ.)

Путем анализа лит. эксперим. данных по зависимости кориолисова взаимодействия 1-го порядка от вращения определены значения вращательной постоянной  $A_0$  и постоянной центробежного искажения  $(D_k)_0$  молекулы CH<sub>3</sub>J (I). Полученное значение для  $A_0$  сопоставлено с соотв-щим значением, найденным из анализа комбинационных разностей для полосы  $\nu_4$  в спектре КР молекулы I. Обсуждена точность полученного значения вращательной постоянной  $A_0$ . Отмечена более высокая точность определения  $A_0$  из анализа зависимости кориолисова взаимодействия от вращения.

Ю. Н. Панченко

М.Н;

X. 1984, 19, NS

СНЗ

От. 17920

1983

3 д48. Определение вращательной постоянной  $A_0$  молекулы метилюдида с использованием коэффициентов вращательной зависимости диагонального кориолисова взаимодействия. Examination of the rotational constant  $A_0$  for methyl iodide on the basis of rotational dependence of diagonal Coriolis coupling. Matsuura Hiroatsu, Murata Hiromu. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 2, 449—450 (англ.)

С использованием эксперим. данных для коэф. вращательной зависимости диагонального кориолисова взаимодействия и правила сумм для этих констант найдено значение центробежной константы  $D_K = (0,70 \pm \pm 0,28) \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ , которое вместе с эксперим. значением комбинации  $A_0 - 29D_K = 5,17082 \text{ см}^{-1}$  дает величину вращательной постоянной  $A_0 = 5,17285 \text{ см}^{-1} \text{ CH}_3\text{I}$ .

М. Р. Алиев

ср. 1984, 18, №3

CH<sub>3</sub>I

Om. 17920 1983

99: 130579a Examination of the rotational constant  $A_0$  for methyl iodide on the basis of rotational dependence of diagonal Coriolis coupling. Matsuura, Hiroatsu; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan 730). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 100(2), 449-50 (Eng). The rotational const. of MeI was detd. as  $A_0 = 5.17285 \pm 0.0008 \text{ cm}^{-1}$  on the basis of rotational dependence of diagonal Coriolis coupling. This value is in excellent agreement with  $5.1728 \pm 0.002 \text{ cm}^{-1}$  detd. from the anal. of the  $\nu_4$  Raman band. A further improvement of  $A_0$  is promising, provided that a more precise vibration-rotation anal. of the  $\nu_4$  band is made.

Французский  
построение

C. A. 1983, 99, 116



CH<sub>3</sub>I

Дм. 17094

1983

1 Л206. Колебательно-вращательный ИК-спектр  
йодистого метила в области полосы  $\nu_2$ . Кориолисово  
взаимодействие с  $\nu_5$ . Vibration-rotation infrared spect-  
rum of  $\nu_2$  of methyl iodide. Coriolis interaction with  $\nu_5$ .  
Matsuura Hiroatsu, Kamikawa Kohsuke,  
Murata Hiromu. «Spectrochim. acta», 1983, A39,  
№ 6, 551—553 (англ.)

Получен спектр паров CH<sub>3</sub>I при давлении 5 мм рт. ст.  
в области 1200—1300  $\text{см}^{-1}$  с разрешением 0,08  $\text{см}^{-1}$ .  
Измерены частоты и выполнено отнесение 550 колеба-  
тельно-вращательных линий полосы  $\nu_2$  в *P*- и *R*-ветвях  
и компоненты *K*-структуры *Q*-ветви. Анализ полосы вы-  
полнен с учетом кориолисова взаимодействия  $\nu_2$  и  $\nu_5$   
и резонанса Ферми  $\nu_2$  с  $\nu_3 + \nu_6$ . Определена колеба-  
тельная частота  $\nu_2 = 1251,193 \text{ см}^{-1}$ , вращательные постоян-  
ные и константы центробежной деформации молекулы  
в состоянии  $\nu_2$ . М. В. Т.

ик спектр,  $\nu_2$ ;

фр. 1984, 18, 21

УСНЗ

От 17094 1983

23 Б274. Колебательно-вращательный инфракрасный спектр полосы  $\nu_2$  метилиодида — кориолисово взаимодействие с  $\nu_5$ . Vibration-rotation infrared spectrum of  $\nu_2$  of methyl iodide — Coriolis interaction with  $\nu_5$ . Matsuga Hiroatsu, Kamikawa Kohsuke, Murata Hiromu. «Spectrochim. acta», 1983, A39, № 6, 551—553 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра с разрешением  $0,08 \text{ см}^{-1}$  измерен колебательно-вращательный спектр  $\text{JCH}_3$  в области полосы  $\nu_2$   $1285\text{—}1205 \text{ см}^{-1}$ . Наблюдено около 550 линий, отнесенных к переходам  $P_K(I)$  с  $K=1, 3, 4, 5$  и  $6$  и  $P_K(I)$  с  $K=1, 3$  и  $4$ . С использованием лит. данных по молек. постоянным основного состояния  $\text{CH}_3\text{J}$  рассчитаны эфф. спектроскопич. постоянные для состояния  $\nu_2$ . Показано, что описание кориолисова взаимодействия  $x_u$ -типа только с помощью теории возмущений второго порядка в данном случае не является вполне адекватным. Новый анализ вращатель-

$\nu_2, \text{м.п.}$

Х. 1983, 19, № 23

ной структуры полосы  $\nu_2$  выполнен с учетом  $xu$ -корню-  
 лисова взаимодействия между состояниями  $\nu_2$  и  $\nu_5$  и  
 резонанса Ферми между  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ . Дана приведен-  
 ная матрица эрмитиана 5-го порядка. Рассчитаны след.  
 спектроскопич. параметры для полосы  $\nu_2$   $\text{CH}_3\text{J}$  ( $\text{см}^{-1}$ )  
 $(\nu_0)_2 = 1251,193$ ,  $A_2 - A_0 = 0,02030$ ,  $B_2 = 0,24935$ ,  $(D_I)_2 =$   
 $= 2,08) \cdot 10^{-7}$ ,  $(D_{IK})_2 = 3,2 \times 10^{-6}$ ,  $\xi_{2,5a} \nu = -0,630$ . Полу-  
 ченные значения сравниваются с имеющимися лит.  
 данными. Отмечается, что отличие в  $(\nu_0)_2$  связано с не-  
 верным отнесением по  $I$ , выполненным ранее. С. Б. Осин

CH<sub>3</sub>I

Om. 17094

1983

/ 99: 166104f Vibration-rotation infrared spectrum of  $\nu_2$  of methyl iodide: Coriolis interaction with  $\nu_5$ . Matsuura, Hiroatsu; Kamikawa, Kohsuke; Murata, Hiromu (Dep. Chem., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan 730). *Spectrochim. Acta, Part A* 1983, 39A(6), 551-3 (Eng). Vibration-rotation IR spectrum of  $\nu_2$  of MeI was measured with a resolu. of 0.08 cm<sup>-1</sup>. The spectrum was analyzed by taking account of an xy-type Coriolis interaction between  $\nu_2$  and  $\nu_5$  and a Fermi resonance between  $\nu_5$  and  $\nu_3 + \nu_6$ .

( $\nu_2$ , UK)

C.A. 1983, 99, N20

CH<sub>3</sub>I

1983

Di, novos-  
puzay, UK  
enekmp

Ovaska Martti, Rivi-  
ner Antti, et al.

J. Mol. Struct. 1983,  
98 (1-2), 19-26.

(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>; III)

СНЗУ

1983

1 Л294. Изучение динамики молекулярного зонда (метилйодида) в углеводородных растворителях методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. Raman spectroscopic studies on the dynamics of a molecular «Probe» (methyl iodide) in hydrocarbon solvents. Р а с у н к о W. F., Y a r w o o d J., G a r d i n e r D. J. «Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 319—322 (англ.)

спектр

Изучены поляризационные спектры комб. рас. (400—600  $\text{см}^{-1}$ ) молекул метилйодида (I), растворенных в жидких *n*-алканах с числом атомов углерода от 6 до 16 и в жидком углеводородном топливе. Обсуждены изменения полуширины линий комб. рас. при вариации типа растворителя и концентрации I в растворе. Выполнена оценка корреляционных функций вращательных движений I в растворе. Предположено, что динамика вращательных движений I обусловлена микроструктурой растворителя. Отмечено, что молекулы I совершают практически свободные вращения в растворителях с малыми

ср. 1984, 18, №1

длинами углеводородных цепей. Установлены соотношения между временем реориентационных движений молекул I в растворе и молярным объемом, занимаемым этими молекулами. Сделан вывод о возможности исследования микроструктуры жидкого топлива методом молекулярного зонда по данным спектров комб. рас. растворенных молекул.

И. В. А.

CH<sub>3</sub>J

DM. 18125 1983

4 Л170. Анализ полосы  $\nu_1$  в CH<sub>3</sub>J. Analysis of the  $\nu_1$  band fo CH<sub>3</sub>I. Paso R., Horneman V.-M., Anttila R. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 193—198 (англ.)

При комнатной т-ре с помощью вакуумного дифракционного спектрометра с фокусным расстоянием 4,5 м исследованы спектры поглощения CH<sub>3</sub>J в газовой фазе в области полосы  $\nu_1$  2970 см<sup>-1</sup>. Разрешение при регистрации спектров было не хуже 0,04 см<sup>-1</sup>. В области шириной 55 см<sup>-1</sup> зарегистрированы 470 линий колебательно-вращательной структуры. Проведена интерпретация спектров с учетом проявления дополнительных линий, обусловленных составными колебаниями  $\nu_2 + 2\nu_6$ . Определены молекулярные постоянные, характеризующие вращательную структуру полосы  $\nu_1$ . Библ. 13. К. Э. М.

$\nu_1$ , см.<sup>-1</sup>.

ср. 1984, 18, №4



CH<sub>3</sub>I

(Om. 18/25) 1983

99:166143t Analysis of the  $\nu_1$  band of iodomethane. Paso, R.; Horneman, V. M.; Anttila, R. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, 57 Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 101(1), 193-8 (Eng). The rotational structure of the IR band  $\nu_1$  of MeI was studied at a resolu. of 0.04 cm<sup>-1</sup> by using a grating spectrometer. In the anal. including 470 lines, a resonance, explained to be caused by  $\nu_2 + 2\nu_6 \pm 2$ , was taken into account. The mol. consts. derived include, e.g.,  $\alpha_1^A = 0.051129(14)$  cm<sup>-1</sup> and  $\alpha_1^B = 0.0983(9) \times 10^{-3}$  cm<sup>-1</sup>.

( $\nu_i$ )

C.A. 1983, 99, N20

CH<sub>3</sub>J

от 18125 1983

7 Б1211. Анализ полосы  $\nu_1$  CH<sub>3</sub>J. Analysis of the  $\nu_1$  band of CH<sub>3</sub>J. Paso R., Horneman V.-M., Anttila R. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 193—198 (англ.)

С использованием вакуумного дифракционного спектрометра с разрешением  $0,04 \text{ см}^{-1}$  измерены ИК-спектры поглощения молекул CH<sub>3</sub>J в многоходовой кювете ( $l=3 \text{ м}$ ,  $P=1 \text{ мм}$ ) в области  $\nu_1$ . Наблюдено и идентифицировано около 500 линий вращательной структуры полосы с  $K=0-6$  (в ряде случаев до 9) и  $J'' \leq 55$ . Анализ вращательной структуры полосы  $\nu_1$  показал, что она плохо описывается в рамках модели, не учитывающей возмущений, даже если явно возмущенные линии в ветви  $P_4(J)$  исключаются из рассмотрения. Предположено, что наблюдаемые возмущения вызваны резонансным корриolisовым взаимодействием состояний  $\nu_1$  и  $\nu_2+2\nu_6 \pm 2$ . При фиксированных значениях молек. постоянных для основного колебательного состояния CH<sub>3</sub>J, определенных ранее, рассчитаны молекулярные постоянные в состоянии  $\nu_1$  ( $\text{см}^{-1}$ ):  $\nu_0=2971,2473$ ,  $A=5,122271$ ,  $B=0,2501173$ ,  $D_J=0,2216 \times$

М.П.,

J<sub>1</sub>

X. 1984, 19, № 7

$\times 10^{-6}$ ,  $D_{JK} = 2,689 \times 10^{-6}$ ,  $\alpha_1^A = 5,1129 \cdot 10^{-2}$ ,  $\alpha_1^B =$   
 $= 0,0983 \cdot 10^{-3}$  и в состоянии  $\nu_2 + 2\nu_6^{\pm 2} - \nu_0 = 3017,68$ ,  $B =$   
 $= 0,24736$ . Обсуждены отличия нек-рых полученных па-  
 раметров от имеющихя в литературе. С. Б. Осин

CD<sub>3</sub>J

1983

19 Б275. Определение  $A_0$  и  $D_K$  для молекулы CD<sub>3</sub>J из полос  $\nu_4$  в спектре комбинационного рассеяния и в инфракрасном спектре поглощения. Determination of  $A_0$  and  $D_K$  for CD<sub>3</sub>J from the  $\nu_4$  Raman and IR bands. Poulsen Carsten, Brodersen Svend. «J. Raman Spectrosc.», 1983, 14, № 2, 77—82 (англ.)

Измерен спектр КР с разрешением  $0,28 \text{ см}^{-1}$  молекулы CD<sub>3</sub>J (I) в области наиболее интенсивной полосы вырожденного колебания  $\nu_4$ . Проведена совместная обработка полученных эксперим. данных и лит. данных по ИК-спектру полосы  $\nu_4$  с помощью метода наименьших квадратов. Получены постоянные для основного состояния молекулы I ( $\text{см}^{-1}$ ):  $A_0 = 2,59608(10)$ ,  $D_K = 1,98(10) \cdot 10^{-5}$ ,  $\nu_0 = 2298,55(1)$ ,  $(A_c)_4 = 0,4635(1)$ ,  $\Delta A = -1,357(3) \cdot 10^{-2}$  и  $\Delta B = -7,9(2) \cdot 10^{-5}$ . Сделан вывод, что уровень  $\nu_4$  невозмущен. Из лит. данных по постоянным  $\alpha^A$  рассчитано значение  $A_e = 2,6200(8) \text{ см}^{-1}$  и значение  $r_e = 1,03192(15) \text{ \AA}$  для расстояния между атомами дейтерия и осью симметрии. Ю. Н. Панченко

М.П.

X. 1983, 19, N 19

CD<sub>3</sub>I

1983

[ 98: 224515h Determination of  $A_0$  and  $D_K$  for iodomethane-D<sub>3</sub> from the  $\nu_4$  Raman and IR bands. Poulsen, Carsten; Brodersen, Svend (Dep. Chem., Univ. Aarhus, Aarhus, DK 8000 Den.). *J. Raman Spectrosc.* 1983, 14(2), 77-82 (Eng). The  $\nu_4$  Raman band of CD<sub>3</sub>I was recorded at a resolu. of 0.28 cm<sup>-1</sup>. A weighted least-squares anal., including data from the  $\nu_4$  IR band gave  $A_0 = 2.59608 \pm 0.00010$  cm<sup>-1</sup> and  $D_K = (1.98 \pm 0.10) \times 10^{-5}$  cm<sup>-1</sup> in addn. to values for  $\nu_0$ ,  $(A_0)_4$ ,  $\Delta A$  and  $\Delta B$ . The  $\nu_4$  state is essentially unperturbed. By using literature values for the  $\alpha^4$  consta.,  $A_r$  was  $2.6200 \pm 0.0008$  cm<sup>-1</sup>, indicating a value of  $r_r = 1.03192 \pm 0.00015$  Å for the distance of the D atoms from the figure axis.

( $\nu_4$ , n.n.)

C.A. 1983, 98, N 26

CD<sub>3</sub>I

1983

11 Д622. Определение  $A_0$  и  $D_K$  для CD<sub>3</sub>I по полосе  $\gamma_4$  в комбинационном рассеянии и ИК-поглощении. Determination of  $A_0$  and  $D_K$  for CD<sub>3</sub>I from the  $\gamma_4$  Raman and IR bands. Poulsen Carsten, Brodersen Svend. «J. Raman Spectrosc.», 1983, 14, № 2, 77—82 (англ.)

Получены спектры комб. рас. газообразного CD<sub>3</sub>I при давл. 150 мм рт. ст. в области полосы  $\gamma_4$  типа  $E$  с разрешением  $0,14 \text{ см}^{-1}$ . Использована фотографич. регистрация и микрофотометрирование. Приведен наблюдаемый и рассчитанный спектры, их сравнением выполнена интерпретация. Дана таблица частот максимумов  $Q$ -ветвей полосы для  $K''$  от  $-18$  до  $+18$ . Эти результаты вместе с литературными данными по ИК-поглощению использованы для определения констант основного состояния  $A_0$  и  $D_K$  молекулы CD<sub>3</sub>I. Библ. 23. М. В. Т.

М.П.

ср. 1983, 18, N 11

$\text{CH}_3\text{I}^+$

1983

7 Д267. Мономолекулярная диссоциация катионов иодистого метила, селективированных по электронным состояниям. The unimolecular dissociation of electronic state-selected methyl iodide cations. Powis I. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 3, 421—432 (англ.)

Методом фотоэлектрон-фотоионного совпадения исследована мономолекулярная диссоциация катионов иодистого метила, приготовленных в  $\tilde{A}^2A_1$ - и  $\tilde{B}^2E$ -электронных состояниях с известным значением колебательной энергии. Определены отношения вероятностей распада по различным каналам и распределения по кинетич. энергии для диссоциации на  $\text{CH}_3^+ + \text{I}^-$  и  $\text{CH}_2\text{I}^+ + \text{H}^-$ .

спектр

ср. 1983, 18, № 7

фрагменты. Последние позволяют сделать выводы о механизме распада: фрагменты  $\text{CH}_2\text{J}^+$  образуются исключительно из  $B^2E$ -состояния исходного иона, а  $\text{CH}_3^+$ -фрагмент образуется как из  $\tilde{B}^2E$ -, так и из  $A^2A_1$ -состояний. Для распада из обоих состояний характерно статистич. перераспределение энергии. Отмечается возможность образования возбужденных спин-орбитальных состояний иона  $\text{J}^+$  при распаде  $B^2E$ -состояния на  $\text{CH}_3$  и  $\text{J}^+$ .

А. А. Зембеков



CD<sub>3</sub>J

1983

15 Б217. Инфракрасная дефазировка вырожденных основных тонов: мода  $\nu_6$  жидкого CD<sub>3</sub>J. Infrared dephasing of degenerate fundamentals. The  $\nu_6$  mode of liquid CD<sub>3</sub>J. Rothschild Walter G., Soussen-Jacob Janine, Vincent-Geisse Josette. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, № 1, 43—46 (англ.)

(Vi)

X. 1983, 19,  
N 15

Указывается на ограниченность обычного способа модельного разделения спектральных вкладов релаксац. каналов колебательного и вращательного уширения линий. Взамен предлагается рассматривать соотв-щую контуру ИК-поглощения в жидк. фазе корреляц. ф-цию полного матричного элемента колебательно-вращательного перехода. Ориентац. уширение считается несущественным, а основным механизмом модуляции — либрац. движение молекул в ячейке жидкости. Спектр жидкого CD<sub>3</sub>J при 25°C и 1 атм был получен на станд. спектрометре в диапазоне 300 см<sup>-1</sup> (~20 полуширин), после чего были численно найдены его средн. частота, 2-й момент и фурье-преобразование. Для мо-

делирования использовалась простейшая корреляц. ф-ция заторможенного гармонич. осциллятора, подстановка к-рой в кумулянтное разл. вместе с предположением о гауссовости флуктуаций позволила получить выражение для корреляц. функции соотв-щей спектральному контуру. Подгонка двух свободных параметров модели — коэф. затухания и средней частоты либраций — дала удовлетворительное согласие с экспериментом, а определенная т. обр. частота практически совпала с частотой линии жидк.  $\text{CD}_3\text{J}$  в длинноволновой ИК-области. По мнению авторов, последний факт является сильным аргументом в пользу либрац. природы процесса колебательной дефазировки. С. Темкин

CD<sub>3</sub>J

1983

9 Д472. Дефазировка для вырожденных основных ИК-полос. Колебание  $\nu_6$  жидкого CD<sub>3</sub>J. Infrared dephasing of degenerate fundamentals. The  $\nu_6$  mode of liquid CD<sub>3</sub>J. Rothschild Walter G., Soussen-Jacob Janine, Vincent-Geisse Josette. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 96, № 1, 43—46 (англ.)

Изучен контур полосы  $\nu_6$  ИК-поглощения жидкого CD<sub>3</sub>J при комнатной т-ре. Крылья полосы, напоминающие размытые вращательные ветви  $P$  и  $R$ , связаны с проявлением либрационного движения в жидкой фазе, модулирующего колебательное. Гипотеза подтверждается усилением модуляционных процессов при понижении т-ры и формой временной корреляционной ф-ции, рассчитанной по этой полосе. Предложена модель молекулярного движения, включающая как вращательное, так и либрационное движение, на ее основе рассчитана корреляционная ф-ция, содержащая в качестве параметров коэф. затухания и частоту либраций. Эти величины найдены из сравнения модельной ф-ции с результатом эксперимента. Полученные значения ча-

( $\nu_i$ )

ор. 1983, 18, № 9

стоты либрации  $53 \text{ см}^{-1}$  близко к наблюдаемому в  
спектрах длинноволн. ИК-поглощения.

М. В. Т.

CH<sub>3</sub>I

1984

10 Б1265. Центробежное искажение в квадрупольных спектрах молекул  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{CH}_3\text{Br}$ . Теория и эксперимент. Centrifugal distortion in quadrupole spectra of  $\text{CH}_3\text{I}$  and  $\text{CH}_3\text{Br}$ . Theory and experiment. Aliiev M. R., Grabois M. N., Osipov B. D. «Proc. 8th Int. Conf. High Resolut. Infrared Spectrosc., Liblice near Prague, Sept. 3—7, 1984. Progr. Sess.: Abstr. Pap.» Prague, s. a., 87 (англ.)

Методом двойного РЧ—МВ резонанса измерены квадрупольные спектры молекул  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$ ,  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$ ,  $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$  и  $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$  в области 80—500 МГц с точностью 100 Гц. Определены значения постоянных квадрупольного взаимодействия ядер брома и йода, параметров ( $\chi$ ) центробежного искажения в квадрупольном взаимодействии ядер и постоянных магнитных сверхтонких взаимодействий. Определенные комбинации  $\chi$ -параметров удовлетворяют вновь полученным изотопич. соотношениям.

Е. В. Алиева

спектр,  
м.п.

⊗ (71)

Х. 1985, 19, № 10

CH<sub>3</sub>I

1984

19 Б4480. Субмиллиметровые лазеры на иодистом метиле и его изотопных разновидностях. Submillimeter lasers in methyl iodide and its isotopic species. Arimondo E. «Rev. Infrar. and Millimeter Waves. Vol. 2». New York; London, 1984, 81—103 (англ.)

Обзор. Рассмотрена субмиллиметровая лазерная генерация на молекулах <sup>12,13</sup>CH<sub>3</sub>I при оптич. накачке CO<sub>2</sub>-лазерами. Приведены таблицы характеристик 73 лазерных линий, а также молек. постоянные CH<sub>3</sub>I. Библ. 43. Ф. Ш.

Ф. Ш., обзор

Х. 1984, 19, № 19

$\text{CH}_3\text{I}$

1984

Aron J., Bunnell J., et al.

cell. J. Mol. Struct., 1984, 110,  
noce. N 3-4, Suppl.: Theochem.,  
19, N 3-4, 361-379.

(cell.  $\text{CH}_3\text{F}$ ; III)

CH<sub>3</sub>J

1984

1 J262. Динамика фотофрагментации CH<sub>3</sub>J при 248 нм. Photofragmentation dynamics of CH<sub>3</sub>J at 248 nm. Barry M. D., Gorry P. A. «Mol. Phys.», 1984, 52, № 2, 461—473 (англ.)

фотодиссоц.

Методом времяпролетной спектроскопии получены распределения по углу и кинетич. энергии атомов  $J^2P_{1/2}$  и  $^2P_{3/2}$ , образующихся при фотодиссоциации CH<sub>3</sub>J под действием лазерного излучения 248 нм. Показано, что фотораспад CH<sub>3</sub>J происходит за время  $\sim 10^{13}$  с в результате прямой фотодиссоциации. Отдельно для адиабатического ( $J^2P_{1/2}$ ) и неадиабатич. ( $J^2P_{3/2}$ ) каналов фотодиссоциации вычислены распределения заселенностей по колебательным уровням моды  $\nu_2$  («зонтичное» колебание) другого фрагмента-радикала CH<sub>3</sub>. Полученные распределения хорошо согласуются с результатами измерений другими методами. Е. Н. Т.

ф. 1985, 18, №1



CH<sub>3</sub>I (K)  
CD<sub>3</sub>I

1984

/ 102: 102671m Raman and infrared spectra of crystalline methyl iodide. Binbrek, O. S.; Anderson, A.; Andrews, B.; Torrie, B. H. (Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Raman Spectrosc.* 1984, 15(6), 406-10 (Eng). Raman and IR spectra of polycryst. samples of CH<sub>3</sub>I and CD<sub>3</sub>I were recorded at temps. between 20 K and the m.p., 209 K. No evidence for a solid-state phase transition was found. New splittings of the internal modes and more complete lattice spectra were obsd. at lower temps. An assignment of all principal bands is proposed, based on the known mol. and crystal structures.

(CKP, UK, Vi)

c. A. 1985, 102, N 12

$\text{CH}_3\text{I}$

1984.

Carlson Thomas A.,  
Fahlman Anders, et al

фотоэлектрон. J. Chem. Phys.,  
спектр. 1984, 80, N 8, 3521 -  
- 3524.

●  
(сер. HJ; III)

CH39 (CM-22226)-20111) 1984

Dhanalakshmi A., Lalit

ka M.,

вращат.  
постоян.,  
теор.  
расчет.

Indian J. Phys., 1984,

B58, N 4-5, 421-426.

CH<sub>3</sub>Y

1984  
Raesdorf S., Schönkense G.,  
et al.

Vac. UV violet Radiat. Phys.,  
VUV VII. Proc. 7 Int. Conf.,

exemp

Jerusalem, Aug. 8-12, 1983.  
Vol. 6. Bristol; Jerusalem;  
1984, 179-181.

(ex. Br<sub>2</sub>; III)

CH<sub>3</sub>J

im-20525 1984

9 Б1054. Обращение потенциала молекулы CH<sub>3</sub>I (X<sup>1</sup>A<sub>1</sub>) методом оператора дискретной координаты. Inversion of the CH<sub>3</sub>I(X<sup>1</sup>A<sub>1</sub>) potential by the discrete position operator method. Kanfer S., Shapiro M. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 18, 3964—3968 (англ.)

Развит подход к решению обратной задачи восстановления Пт по эксперим. данным, основанный на использовании представления дискретной координаты для системы диф. ур-ний многоканальной теории рассеяния. Представление дискретной координаты получается с помощью унитарного оператора, диагонализующего матрицу оператора положения в подпространстве внутр. координат системы в базисе собственных ф-ций мишени. Метод применен к вычислению уровней энергии двух связанных ангармонич. осцилляторов и к восстановле-

Di, M. A.,  
потенц.  
кривые

X. 1985, 19, 29.

нию потенциальной Пв основного электронного состояния молекулы  $\text{CH}_3\text{I}$  по эксперим. данным. Развитый подход резко сокращает число подгоночных параметров при решении обр. задачи. Полученная с его помощью потенциальная Пв приводит к уровням энергии, хорошо согласующимися с экспериментальными.

В. Б. Павлов-Веревкин

CH<sub>3</sub>J

DM. 20585

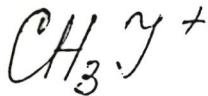
1984

6 Л204. Обращение потенциала  $\text{CH}_3\text{J}(\tilde{X}^1A_1)$  методом оператора дискретной координаты. Inversion of the  $\text{CH}_3\text{J}(\tilde{X}^1A_1)$  potential by the discrete position operator method. Kanfer S., Shapiro M. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 18, 3964—3968 (англ.)

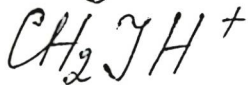
Описан метод восстановления потенц. поверхностей многоатомных молекул по эксперим. данным о сечениях рассеяния и энергиях связанных состояний, являющийся развитием предложенного недавно метода дискретной координаты (Lill J. V. et al. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, 483) и отличающийся от последнего рациональным выбором координатных узлов квадратурных ф-л. Метод использован для нахождения потенц. ф-ции основного состояния метилйодида. Колебательный спектр в области высоких обертонов, рассчитанный с восстановленной потенц. ф-цией, хорошо согласуется с эксперим. спектром флуоресценции. Е. П. Смирнов

М.А.

ф. 1985, 18, № 6.



1984



Maquie Francis,  
Stahl Daniel, et al.

J. Chem. Soc. Chem.  
Commun., 1984, N8,  
504—506.

( $\text{CH}_3\text{F}^+$ ; III)



CH<sub>3</sub>I (20897) (Om. 20783) 1984

102: 122323c Analysis of the  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $\nu_2$  band system of methyl iodide by solving explicit energy matrixes. Matsuura, Hiroatsu; Kamikawa, Kohsuke (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan 730). *J. Sci. Hiroshima Univ., Ser. A: Phys. Chem.* 1984, 48(3), 123-52 (Eng). The Fermi- and Coriolis-coupled band system of  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $\nu_2$  of MeI was analyzed by solving secular equations of energy matrixes, in which all of the interactions involved in the band system were explicitly taken into account. The important interactions are a Fermi resonance between  $\nu_3$  and  $\nu_3 + \nu_6$ , an xy-type Coriolis interaction between  $\nu_5$  and  $\nu_3 + \nu_6$ , and an xy-type Coriolis interaction between  $\nu_2$  and  $\nu_5$ . In the anal., 1279 vibration-rotation transitions and 9 rotation transitions in the excited vibrational states were utilized for detg. the spectroscopic parameters for the  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $\nu_2$  states and those for the interactions. The present anal. indicated that some constraints of the parameters were required in the least-squares calcs., for lack of sufficient exptl. data to fix them.

( $\nu_5$ ,  $\nu_2$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ )

C. A. 1985, 102, N 14.

CH<sub>3</sub>I

DM 20783

1984

14. B1261. Анализ системы полос  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$  и  $\nu_2$  молекулы метилиодида методом точной диагонализации матрицы энергии. Analysis of the  $\nu_5$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $\nu_2$  band system of methyl iodide by solving explicit energy matrices. Matsuura H., Kamikawa K. «J. Sci. Hiroshima Univ.», 1984, A48, № 3, 123—152 (англ.)

С учетом резонанса Ферми между колебаниями  $\nu_5(E)$  и  $\nu_3 + \nu_6(E)$ , резонанса кориолиса 1-го порядка между  $\nu_2(A_1)$  и  $\nu_5(E)$  и резонанса кориолиса 2-го порядка между  $\nu_5(E)$  и  $\nu_3 + \nu_6(E)$ , а также диагональных поправок квартичного центробежного искажения и колебат.-вращат. взаимодействия вплоть до 3-го порядка, построена матрица колебательной вращат. энергии для молекул с симметрией  $C_{3v}$ . Эта матрица применена к анализу вращат. структуры ИК-полос  $\nu_2$ ,  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$  молекулы CH<sub>3</sub>I. Из частот 1279 колебательно-вращат. и 9 вращат. переходов МНК вычислены значения 35 молек. констант. Приведены таблицы частот переходов.

Е. В. Алиева

Di, M. N;

X. 1985, 19, N 14

CH<sub>3</sub> Y

[Ocr. 20133]

1984

CD<sub>3</sub> Y

Mercari N., Aroca R.,

Robinson E.A., et al.

J. Comput. Chem., 1984,

5, ● N 5, 427-440.

сум. посыл.  
волнов.

чисел,  
и. п.,

среднее  
амплитуды.  
колеб.

CH<sub>3</sub>J

1984

20 Б1085. О расчете зависящего от давления уширения линий в молекулах типа симметричного волчка с использованием модифицированной теории Андерсона. On the calculation of pressure-broadened linewidths for symmetric-top molecules using the modified Anderson theory. Messer J. K., Roberts J. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 2, 308—314 (англ.)

В рамках теории Андерсона выписаны ф-лы для столкновительного уширения спектральных линий. Теория применена к молекулам типа симм. волчка для того случая, когда диполь-дипольное взаимодействие является доминирующим, но необходимо также учитывать и квадруполь-дипольные и квадруполь-квадрупольные вклады. Результаты расчетов представлены для молекул CH<sub>3</sub>J и CH<sub>3</sub>Cl. Найдено, что поправки от высших мультипольных членов (по сравнению с диполь-дипольным) достаточно велики, особенно для CH<sub>3</sub>J. Сопоставление с эксперим. данными позволяет оценить погрешности наиболее удачного приближения в 0,5%. Расчеты подтверждают большее влияние почти резонансных столкновений на величину уширения по сравнению с нерезонансными столкновениями.

расчет М.П.

41

(41)

х. 1984, 19,  
N 20

А. В. Немухин

CH<sub>3</sub>Y

[cm. 22195 | 20112 | 1984]

Prasad M.R.V., Ravir-  
dranath K., et al,

Pracem

UK UM-  
memcib-  
Mocmei.

Indian J. Phys., 1984,  
1358, N4-5, 409-412.

CH<sub>3</sub>F

1984

Swarna Kumari G.,  
Rajeswara Rao N.

crekmp

J. Mol. Spectrosc.,  
1984, 106, 21, 1-11.

( $\bullet$  CH<sub>3</sub>F; III)

CH<sub>3</sub> J

1984

11 Л367. Возбуждение зонтичной моды молекул CH<sub>3</sub> и CD<sub>3</sub>, образованных при фотодиссоциации CH<sub>3</sub>I и CD<sub>3</sub>I при  $\lambda=248$  нм. The excitation of the umbrella mode of CH<sub>3</sub> and CD<sub>3</sub> formed from photodissociation of CH<sub>3</sub>I and CD<sub>3</sub>I at 248 nm. Van Veen G. N. A., Baller T., DeVries A. E., Van Veen N. J. A. «Chem. Phys.», 1984, 87, № 3, 405—417. (англ.)

Изучена фотодиссоциация молекул CH<sub>3</sub>I и CD<sub>3</sub>I в пучке при облучении светом с  $\lambda=248$  нм на фрагменты CH<sub>3</sub>(CD<sub>3</sub>) и J(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>) или J(<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>). Показано, что у полученных при фотодиссоциации CH<sub>3</sub> и CD<sub>3</sub> возбуждены зонтичные колебательные моды, причем максимум заселенности для CH<sub>3</sub> соответствует колебательному квантовому числу  $v=2$ , как при образовании J(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>), так и J(<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>). В случае CD<sub>3</sub>I колебательное

Do,

(H) X CD<sub>3</sub> J ●

ср. 1984, 18, № 11

распределение фрагмента  $\text{CD}_3$  имеет максимум при  $v=3$  для канала  $J(^2P_{1/2})$  и около  $v=5$  для канала  $J(^2P_{3/2})$ . Предложены простые модели, описывающие возбуждения зонтичных мод радикалов  $\text{CH}_3$  и  $\text{CD}_3$  в каналах с образованием  $J(^2P_{1/2})$  и  $J(^2P_{3/2})$ . Исследовано угловое распределение фрагментов фотодиссоциации. Экспериментально получены значения энергий C-J связей в  $\text{CH}_3\text{J}$  и  $\text{CD}_3\text{J}$  ( $2,30 \pm 0,01$  и  $2,33 \pm 0,01$  эВ).

Резюме



CH<sub>3</sub> - y

CD<sub>3</sub> - y

1984

22 Б1182. Возбуждение зонтиковых колебаний CH<sub>3</sub> и CD<sub>3</sub> образующихся при фотодиссоциации CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J при 248 нм. The excitation of the umbrella made of CH<sub>3</sub> and CD<sub>3</sub> formed from photodissociation of CH<sub>3</sub>J and CD<sub>3</sub>J at 248 nm. Veen G. N. A. Van, Baller T., De Vries A. E., Van Veen N. J. A. «Chem. Phys.», 1984, 87, № 3, 405—417 (англ.)

Исследована фотодиссоциация CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J в импульсных молек. пучках под действием УФ-излучения эксимерного лазера ( $\lambda=248$  нм). Фотодиссоциация протекает по двум каналам, CH<sub>3</sub>J(CD<sub>3</sub>J) → CH<sub>3</sub>(CD<sub>3</sub>) + J(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>) или J\*(<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>) (I и II соотв.). Величина квантового выхода образования J\* составляет 0,71 для CH<sub>3</sub>J и 0,81 для CD<sub>3</sub>J. Фрагменты CH<sub>3</sub>(CD<sub>3</sub>) получались в колебательно возбужденных (зонтиковое колебание) состояниях ( $\nu$ ). В случае CH<sub>3</sub>J максимум распределения по  $\nu$  соответствует  $\nu=2$  для I и II, причем для I распределение имеет более широкий характер ( $\nu \leq 7$ ). В случае CD<sub>3</sub>J максимум распределения при

Do;

X. 1984, 19, № 22

$v=3$  для II и  $v \approx 5$  для I. Разработаны простые модели удовлетворительно описывающие процесс возбуждения и распределение по  $v$   $\text{CH}_3$  и  $\text{CD}_3$  (I, II). Значения параметров анизотропии ( $\beta$ ) углового распределения фотофрагментов:  $\text{CH}_3 - \beta$  (I) = 0,72,  $\beta$  (II) = 0,76;  $\text{CD}_3 - \beta$  (I) = 0,77,  $\beta$  (II) = 0,83. Поглощение и фотодиссоциация по схеме II связано с переходом  $^1A_1 \rightarrow ^3Q_0$ , фотодиссоциация по схеме I обусловлена пересечением потенциальных поверхностей возбужденных состояний молекул  $^3Q_0$  и  $^1Q$  при  $r$  (C—J)  $\sim 3,0$  А. Получены точные значения  $D_0(\text{CH}_3\text{—J}) = 2,30 \pm 0,01$  эВ и  $D_0(\text{CD}_3\text{—J}) = 2,33 \pm 0,01$ .

В. М. Ковба

CH<sub>3</sub>I

1985

Chau F. T., McDowell C. A.

Chem. Notes,

I, re;

J. Mol. Struct.

1985, 129(1-2), 169-  
-73.

( $\bullet$   $F_2$ ; III)

CH<sub>3</sub>J

DM 21983

1985

3 Б1297. Диодный лазерный спектр полосы  $\nu_6$  CH<sub>3</sub>J с использованием нового эталона для калибровки. Diode laser spectrum of the  $\nu_6$  band of CH<sub>3</sub>I using a novel etalon as a calibration scale: Clar H.-J., Reich M., Schieder R., Winnewisser G., Yamada K. M. T. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 2, 447—458 (англ.)

С использованием диодного лазерного спектрометра с высоким разрешением в обл. 900—925 см<sup>-1</sup> (переходы  $\Delta K = \Delta l = +1$ ) измерены спектры поглощения полосы  $\nu_6$  молекулы CH<sub>3</sub>J (длина погл. слоя ~70 см, давл. ~100 Па). Для калибровки использован конфокальный эталон Фабри—Перо с областью свободной дисперсии ~0,00945 см<sup>-1</sup>. Вычислены уточненные значения спектроскопич. постоянных в состоянии  $\nu_6$  CH<sub>3</sub>J (см<sup>-1</sup>):  $\nu_0 + A\xi^2 = 882,91742(4)$ ;  $A = 5,2080824(12)$ ,  $B = 0,24942796(8)$ ,  $D_I = 2,11893(25) \cdot 10^{-7}$ ,  $D_{IK} = 3,29436$  (фикс)  $\cdot 10^{-6}$ ,  $D_K = 9,282(19) \cdot 10^{-5}$ ,  $H_{KI} = 1,424 \cdot 10^{-10}$

M. N., Di;

X. 1986, 19, N3

(фикс),  $A\xi = 1,952473(34)$ ,  $\eta_I = 6,7162(48) \cdot 10^{-6}$ ,  $\eta_K = 1,4351(24) \cdot 10^{-4}$ ,  $q = 1,9538(50) \cdot 10^{-4}$ . Полученные значения хорошо воспроизводят наблюдаемые положения линий и, кроме того, указывают на источник расхождения (неверное значение  $D_K$  в возбужденном состоянии) в постоянных, предложенных разными авторами ранее. С. Б. Осни

CH<sub>3</sub>J

DM 21983

1985

2 Л195. Спектр CH<sub>3</sub>J в области полосы  $\nu_6$ , полученный с использованием диодного лазера и нового эталона для калибровки частот. Diode laser spectrum of the  $\nu_6$  band of CH<sub>3</sub>J using a novel etalon as a calibration scale. Clar H.-J., Reich M., Schieder R., Winnewisser G., Yamada Koichi M. T. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 2, 447—458 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения паров CH<sub>3</sub>J при давлении ниже 1 мм рт. ст. вблизи 900 см<sup>-1</sup>. Для регистрации использован диодный лазер и новый эталон Фабри—Перо, образованный двумя конфокальными сферич. зеркалами с золотым покрытием, расположенными на расстоянии 25 см. Между зеркалами вставлен светоделитель NaCl. Элементы эталона фиксированы кварцевыми стержнями, благодаря чему не требуется стабилизации т-ры. Постоянная эталона 0,00945 см<sup>-1</sup> измерена по частотам линий NH<sub>3</sub> с точностью 0,002%. Приведены измеренные и заимствованные из литературы частоты линий CH<sub>3</sub>J. Эти данные использованы для определения молекулярных постоянных состояния  $\nu_6$  вплоть до секстичных, константы кориолисова взаимодействия и l-удвоения.

М. В. Т.

М.П.

ср. 1986, 18, №2

CH<sub>3</sub>I

(Om. 21983)

1985

103: 131473z Diode laser spectrum of the  $\nu_6$  band of methyl iodide using a novel etalon as a calibration scale. Clar, H. J.; Reich, M.; Schieder, R.; Winnewisser, G.; Yamada, Koichi M. T. (Erstes Phys. Inst., Univ. Koln, 5000 Cologne, 41 Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 112(2), 447-58 (Eng). The  $\Delta K = \Delta l = +1$  transitions of the  $\nu_6$  band of MeI were measured by a tunable diode laser spectrometer. A newly designed Fabry-Perot etalon with a free spectral range of  $0.00945 \text{ cm}^{-1}$  was used to calibrate the line position very precisely. The present data were analyzed together with the previously reported transition wavenumbers, and precise mol. consts. were obtained.

( $\nu_6$ )

C. A. 1985, 103, N16.

CH<sub>3</sub>Y

Am. 21363

1985

Kaetzdorf S., Schönhense B.,  
et al.,

помог.  
чекмр

Phys. Rev. Lett., 1985, 54, N 9,  
885-888.





CH<sub>3</sub>J

1985

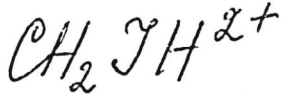
4 Л304. Приложение метода Вигнера к фотодиссоциации CH<sub>3</sub>I. The Wigner method applied to the photodissociation of CH<sub>3</sub>I. Henriksen Niels Engholm. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 121, № 1—2, 139—142 (англ.)

Метод Вигнера использован при расчетах сечения фотодиссоциационных переходов молекулы CH<sub>3</sub>I в рамках модели Шапиро — Берсона («J. Chem. Phys.», 1980, 73, 3810.) Парциальные сечения фотодиссоциационного поглощения, полученные этим квазиклассич. методом, хорошо согласуются с результатами «точных» квантово-механич. расчетов. Показано также, что гармонич. приближение для описания колебаний в основном состоянии CH<sub>3</sub>S неадекватно при рассмотрении процесса фотодиссоциации.

В. С. Иванов

фотодиссоц.

ср. 1986, 18, 14



1985

Rock Wolfram,  
Maquin F., et al.

открыт.,  
реценз.  
(обзор)

Chimia, 1985, 39,  
N 12, 376-384.



$^{13}\text{CH}_3\text{I}$

(D.M. 22 134)

1985

103: 131432k Laser-radiofrequency double-resonance spectroscopy of  $^{13}\text{C}$ -iodomethane. Man, H. T.; Butcher, R. J. (Cavendish Lab., Cambridge, UK CB3 0HE). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 113(1), 54-62 (Eng). Pure quadrupole resonances of the  $^{127}\text{I}$  nucleus of  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$  were obsd. by using laser-radiofrequency double resonance. Quadrupole coupling consts. are reported for the ground,  $\nu_3$ ,  $2\nu_3$ ,  $\nu_6$ ,  $2\nu_6$ ,  $\nu_3 + \nu_6$ , and  $2\nu_3 + \nu_6$  states. Smaller hyperfine consts. are also reported for the ground and  $\nu_6$  states.

спектр  
высокого  
разрешения

C. A. 1985, 103, N16.

CH<sub>3</sub>J

От. 22134

1985

З Б1306. Спектры двойного лазерно-радиочастотного резонанса для молекулы  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Laser-radiofrequency double-resonance spectroscopy of  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Man H.-T., Butcher R. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 1, 54—62 (англ.)

Методом двойного ИК—РЧ-резонанса с использованием  $^{12}\text{CO}_2$ -,  $^{13}\text{CO}_2$ - и  $\text{N}_2\text{O}$ -лазеров и РЧ-клистронов с мощностью 1—10 Вт измерены частоты 90 переходов между подуровнями СТС уровней с различными  $J$  и  $K$  в основном колебат. состоянии и в возбужденных состояниях  $\nu_3$ ,  $\nu_6$ ,  $2\nu_3$ ,  $2\nu_6$ ,  $\nu_3 + \nu_6$  и  $2\nu_3 + \nu_6$  молекулы  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ ; магн. СТС, связанная со спинами ядер  $^{13}\text{C}$  и  $\text{H}$ , не разрешена (точность измерений 30—100 кГц). Анализ спектра выполнен с учетом спин-вращат. взаимодействия и центробежной поправки к квадрупольному взаимодействию ядра йода. Определены значения по-

М.А., Д.С.

X. 1986, 19, № 3

стоянной квадрупольной связи ядра йода ( $eqQ$ ) для всех перечисленных состояний, параметров центробежной поправки в квадрупольном взаимодействии и постоянных спин-вращат. взаимодействия для основного и возбужденного  $\nu_6$ -состояния. Зависимость  $eqQ$  от кол. квантового числа  $\nu_3$  очень слабая (около 0,1 МГц), а при возбуждении колебания  $\nu_6$   $eqQ$  изменяется от —1934,12 до —1941,29 МГц. Е. В. Алиева

СНЗУ

ОМ 22 184

1985

1 Л188. Спектроскопия лазерно-радиочастотного двойного резонанса молекулы  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Laser-radiofrequency double-resonance spectroscopy of  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Man H.-T., Butcher R. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 1, 54—62 (англ.)

Методом двойного ИК-РЧ-резонанса с использованием  $^{12}\text{CO}_2$ ,  $^{13}\text{CO}_2\text{-N}_2\text{O}$ -лазеров исследована квадрупольная СТС вращательных уровней основного и ряда возбужденных (вблизи 10 мкм) колебат. состояний молекулы  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Идентифицировано около 90 квадрупольных резонансов, относящихся к основному и возбужденным ( $\nu_3$ ,  $\nu_6$ ,  $2\nu_3$ ,  $2\nu_6$ ,  $\nu_3+\nu_6$ ,  $2\nu_3+\nu_6$ ) состояниям. Определены значения постоянной квадрупольной связи ядра йода ( $eqQ$ ) для всех указанных состояний, центробежных параметров квадрупольного взаимодействия и постоянных спин-вращательного взаимодействия для основного и для  $\nu_6=1$ -состояния. Показано, что зависимость  $eqQ$  от квантового числа  $\nu_3$  очень слабая, а при возбуждении колебаний  $\nu_6$   $eqQ$  изменяется от  $-1934,12$  до  $-1941,29$  МГц.

М. Р. Алиев

В.И. М.Н.

ср. 1986, 18, n1

CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>

Ом. 21782 1985

18 Б1303. Анализ вращательной структуры перехода  $\tilde{A}^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow X^2E_{1/2}(0,0,0)$  иона CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>. Rotational analysis of the  $\tilde{A}^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow X^2E_{1/2}(0,0,0)$  transition in CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>. McLoughlin R. G., Morrison J. D., Smith D. L., Wahrhaftig A. L. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 3, 1237—1241 (англ.)

Выполнен теоретич. анализ частично разрешенной вращат. структуры перехода  $\tilde{A}^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow \tilde{X}^2E_{1/2}(0,0,0)$  фотодиссоциац. спектра молек. иона CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>. Наблюдаемая серия полос отнесена к прогрессии Р-ветвей. На основании сравнения измеренного вращат. контура с вычисленным для случая Гунда (с) найдены значения вращат. постоянных возбужденного электронного состояния  $A' = 5,07 \pm 0,05$ ,  $B' = 0,1848 \pm 0,0005$  см<sup>-1</sup> и вибронного углового момента  $\zeta_e' = 0,5$ . Показано, что случай Гунда (с) хорошо описывает как основное, так и возбужденное электронное состояния иона CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>.

Е. В. Алиева

М.П.

Х. 1985, 19, № 18.

CH<sub>3</sub><sup>+</sup>

DM 21782

1985

102: 140050r Rotational analysis of the  $\bar{A}^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow \bar{X}^2E_{1/2}(0,0,0)$  transition in iodomethane( $I^+$ ) ion. McLoughlin, Russell G.; Morrison, James D.; Smith, Dianne L.; Wahrhaftig, Austin L. (Dep. Phys. Chem., La Trobe Univ., Bundoora, 3083 Australia). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(3), 1237-41 (Eng). A computer simulation of the partially resolved rotational structure obsd. in the photodissocn. spectrum of  $MeI^+$  (I) was undertaken to det. the extent of rovibronic interaction in this polyat. ion. From a series of calcs., a set of rotational const. was derived which give a simulated spectrum strongly resembling that obtained exptl. for the  $\bar{A}^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow \bar{X}^2E_{1/2}(0,0,0)$  band of I. The series of prominent peaks obsd. in the exptl. spectrum are reproduced in the simulated spectrum and are due to P branch progressions, within the q subbands, which nearly coincide in energy. The corresponding R branch lines are weak by comparison and are lost in the surrounding unresolved rotational lines. The encouraging fit obtained when Hund's case (c) coupling is assumed for the A state is indicative of strong spin-orbit coupling in the A state, caused by interaction between the A and B states of the ion. The rotational const. obtained from the simulated spectrum are:  $A' = 5.07 \pm 0.05 \text{ cm}^{-1}$ ,  $B' = 0.1848 \pm 0.0005 \text{ cm}^{-1}$ . The nonquantized component of electronic angular momentum along the symmetry axis for the A state of I is  $\xi' = 0.5$  and the rotational temp. of the ions at the point of photon interaction is  $350 \pm 50 \text{ K}$ .

Krausam. chem. p.

( $A^2\Sigma_{1/2} - X^2E_{1/2}$ )

C. A. 1985, 102, N 16.



$\text{CH}_3\text{J}^+$

(Om. 21782) 1985

9 Д82. Вращательный анализ перехода  $A^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow X^2E_{1/2}(0,0,0)$  в  $\text{CH}_3\text{J}^+$ . Rotational analysis of the  $A^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow X^2E_{1/2}(0,0,0)$  transition in  $\text{CH}_3\text{J}^+$ . McLoughlin Russell G., Morrison James D., Smith Dianne L., Wahrhaftig Austin L. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 3, 1237—1241 (англ.)

Для исследования колебательно-вращательного взаимодействия в многоатомном ионе метилйодида ( $\text{CH}_3\text{J}^+$ ) проведено моделирование на ЭВМ частично разрешенной вращательной структуры, наблюдаемой в фотодиссоциационном спектре иона. Найденный в расчетах набор вращательных постоянных позволил получить моделированный спектр, близко приближающийся к наблюдаемому экспериментально для полосы  $A^2E_{1/2}(0,1,7) \leftarrow X^2E_{1/2}(0,0,0)$ . В моделированном спектре хорошо воспроизводятся линии Р-ветви. Соответствующие «линии» R-ветви имеют слабую интенсивность по

М.П.

ф. 1985, 18, №9.

сравнению с предыдущими и перекрываются окружающими неразрешенными вращательными линиями. Согласно с экспериментом получено в предположении связи, соответствующей случаю Хунда, для состояния  $\bar{A}$ , что свидетельствует о сильной спин-орбитальной связи в этом состоянии, обусловленной взаимодействием между состояниями  $\bar{A}$  и  $\bar{B}$  иона. При моделировании найдены следующие значения вращательных постоянных  $A_v' = 5,07 \pm 0,05$ ;  $B_v' = 0,1848 \pm 0,0005$  см<sup>-1</sup>. Неквантованная компонента электронного момента импульса вдоль оси симметрии для состояния  $\bar{A}$ :  $\zeta_e' = 0,5$ . Вращательная т-ра ионов для точки взаимодействия с фотонами равна  $350 \pm 50$  К. Резюме



CH<sub>3</sub>J

1985

19 Б1356. Сверхтонкая магнитная структура и центробежное искажение в квадрупольных спектрах  $^{12}\text{CH}_3\text{J}$  и  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Magnetic hyperfine structure and centrifugal distortion in quadrupole spectra of  $^{12}\text{CH}_3\text{J}$  and  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$ . Osipov B. D., Grabois M. N. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 2, 344—351 (англ.)

На уникальном спектрометре ВЧ-микроволнового двойного резонанса (Osipov B. D., Pis'ma JETP, 1977, 25, 14) с разрешением 1—2 кГц измерены квадрупольные спектры для вращат. переходов  $J \leq 7$   $^{12}\text{CH}_3\text{J}$  (I) и  $^{13}\text{CH}_3\text{J}$  (II) в основном колебат. состоянии. Магн. структура квадрупольных спектров проанализирована с учетом спин-спинового и спин-вращат. взаимодействий. Для I и II соотв. определены постоянные квадрупольного взаимодействия  $eqQ_0 = -1934130,22$  (39) и  $-1934232,71$  (34) кГц и центробежные поправки к ним, хорошо удовлетворяющие соотношениям, инвариантным относительно изотопич. замещения.

С. Н. Мурзин

(M. A., Pi)

X. 1986, 19, N 19

CH<sub>3</sub>I

1985

11 Л167. Магнитная сверхтонкая структура и центробежная деформация в квадрупольных спектрах  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  и  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$ . Magnetic hyperfine structure and centrifugal distortion in quadrupole spectra of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  and  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$ . Osipov B. D., Grabois Michael N. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 2, 344—351 (англ.)

Методом двойного радиочастотного-микроволн. резонанса получены квадрупольные спектры  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  и  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$  в основном колебательном состоянии с разрешением 1—2 кГц. Разрешена магн. структура квадрупольных переходов. Приведены частоты линий и их отнесение. Описан использованный для анализа гамильтониан, включающий квадрупольные взаимодействия с учетом центробежного возмущения, спин-спиновые и спин-вращательные взаимодействия. В анализе использованы найденные ранее константы  $B_0$ ,  $D_J$  и  $D_{JK}$   $^{12}\text{CH}_3\text{I}$ . Определены константы  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$ , их величины хорошо удовлетворяют теоретич. изотопным соотношениям. М. В. Т.

(М.П.)

Ф. 1986, 18, N 11.

<sup>12</sup>CH<sub>3</sub>Y [DM-23507] 1985

<sup>13</sup>CH<sub>3</sub>Y Osipov B.D., Brabois M.N.,

спектр, J. Mol. Spectrosc., 1985,  
111, N 2, 344-351.

М.Н.,  
сверхтонкая  
структура

СН<sub>3</sub>Г

1985

11 Л166. Квадрупольные спектры высокого разрешения и молекулярные константы  $\text{CH}_3\text{J}$  и  $\text{CH}_3\text{Br}$ . Осипов Б. Д., Грабойс М. Н. «Оптика и спектроскопия», 1985, 58, № 5, 1150—1152

Получены спектры двойного микроволново-радиочастотного резонанса  $\text{CH}_3\text{J}$ ,  $\text{CH}_3^{79}\text{Br}$  и  $\text{CH}_3^{81}\text{Br}$  с разрешением 1—4 кГц. Наблюдены линии 36 квадрупольных переходов  $\text{CH}_3\text{J}$  и 11' —  $\text{CH}_3\text{Br}$ . По частотам линий определены константы молекул в основном состоянии. В гамильтониане сверхтонкого расщепления кроме квадрупольных и магн. взаимодействий ядер  $\text{J}(\text{Br})$  с полем молекулы учтены взаимодействия протонов с вращением, друг с другом и со спином ядра  $\text{J}(\text{Br})$ . Приведены выражения, описывающие эти взаимодействия. Точность найденных молекулярных констант на 1—2 порядка выше известных ранее, константы  $\text{CH}_3\text{Br}$  хорошо удовлетворяют изотопич. соотношениям. М. В. Т.

спектры,

м.п.

(4) 18

ср. 1985, 18, N 11

CH<sub>3</sub> I

1985

103: 76363m Quadrupole high-resolution spectra and molecular constants of methyl iodide and methyl bromide. Osipov, B. D.; Grabois, M. N. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1985, 58(5), 1150-2 (Russ). The hyperfine structure was studied of the rotational energy levels of MeI and MeBr. The quadrupole moments are given.

(u.n.)

(71) CH<sub>3</sub> Br

C. A. 1985, 103, N 10:

CH<sub>3</sub>I

1985

Paso Risto.

Acta univ. ouluensis,  
ser. n., vi; 1985, A, N 168, 1-49.

(coll. CD<sub>3</sub>Br; III)



CH<sub>3</sub>I

1985

Santhanam V.,  
Sobhanadri Y.

Рачет  
динометр.  
элемент.

Pramana. Y. Phys.,  
1985, 24, N5, 737-741.

(см.  $\text{CF}_3\text{I}$ ; III)

СН<sub>3</sub>J

1985

5 Б1190. Анализ экспериментов по фотодиссоциации ионов  $\text{CH}_3\text{J}^+$ ; приближенная интерпретация с помощью неэмпирических молекулярных расчетов, включая спин-орбитальное взаимодействие. Analysis of photodissociation experiments on  $\text{CH}_3\text{P}^+$  ions; tentative interpretation by means of ab initio molecular calculations including spin-orbit coupling. Tadjeddine M., Flament J. P., Teichtell C. «X Int. Symp. Mol. Beams, Cannes, June 3—7, 1985». S. 1., [1985], V—M1/V—M4 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении релятивистских орбитальных Пт с учетом спин-орбитального взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые, соотв. каналам диссоциации иона  $\text{CH}_3\text{J}^+$  на  $\text{CH}_3 + \text{J}^+ (^3P_1, ^3P_0, \text{или } ^3P_2)$  и  $\text{CH}_3^+ + \text{J} (^2P_{1/2} \text{ или } ^2P_{3/2})$ . На основании результатов расчетов интерпретированы эксперименты по фотодиссоциации  $\text{CH}_3\text{J}^+$ . Сделан вывод, что при фотодиссоциации поглощение фотона происходит меж-

М.А.

Х. 1988, 19, N5

ду первыми двумя состояниями  $E_{1/2}$ , к-рые являются чистыми по симметрии ( $E$  или  $A_1$ ). При этом момент перехода перпендикулярен главной оси. Фотонный переход сопровождается внутр. конверсией или преддиссоциацией в состоянии 1  $E_{1/2}$  при расстоянии  $R(\text{C—J}) < 3,25$  А. Во время диссоциации ион  $\text{CH}_3\text{J}^+$  находится в состоянии 1  $E_{1/2}$ , доминирующая симметрия к-рого изменяется от  $X^2E$  до  $A^2A_1$  при  $R > 5$  А. И. А. Тополь

СНЗУ

1985

22 Б4011. Преддиссоциация заданных колебательных состояний  $\text{CH}_3\text{J}$  при возбуждении в области 193,7 нм. Predissoociation of specific vibrational states in  $\text{CH}_3\text{J}$  upon excitation around 193.3 nm. Veen G. N. A. van, Baller T., de Vries A. E. «Chem. Phys.», 1985, 97, № 1, 179—186 (англ.)

Исследован фотофрагментац. спектр молекулы  $\text{CH}_3\text{J}$  и времяпролетный спектр радикала  $\text{CH}_3$  при фотолизе в области длин волн  $\lambda \approx 193,7$  нм. Эксперименты проведены в условиях пересечения пучка  $\text{CH}_3\text{J}$  лучом лазера и детектированием  $\text{CH}_3$  в направлении, перпендикулярном к плоскости пучка и луча. Зависимость интенсивности рассеяния от поляризации света указывает на перпендикулярный характер полосы поглощения, угловая зависимость к-рой (имеется в виду угол, фиксирующий направление вектора поляризации к пучку) размыта вследствие вращения диссоциирующей молекулы. Конечное время жизни при фотодиссоциации связано с

преддиссоциация заданных колебательных состояний

Х. 1985, 19, № 22.

эффектом предиссоциации: молекула вначале возбуждается в одно из связанных состояний терма  $(E, 1) \{2\}$ , а затем переходит на отталкиват. терм  $(E, 1)$ , коррелирующий с основным электронным состоянием  $\text{CH}_3$  и возбужденным электронным состоянием  $J(^2P_{3/2})$ . Время-пролетный спектр  $\text{CH}_3$ , изученный с использованием ионизационного детектора, характеризуется бимодальным распределением с максимумами неплоского колебания  $\text{CH}_3$  при квантовых числах  $v=2$  и  $v=5,6$ . Полученные результаты удовлетворительно объясняются в рамках франк-кондоновского приближения в предположении одного активного (зонтичного) колебания  $\text{CH}_3$ .

Е. Е. Никитин

CF<sub>3</sub>J

1985

7 Л189. Лазерные спектры высокого разрешения полосы  $\nu_4$  в молекулах  $^{12}\text{CF}_3\text{J}$  и  $^{13}\text{CF}_3\text{J}$ . High-resolution diode laser spectra of the  $\nu_4$  mode of  $^{12}\text{CF}_3\text{J}$  and  $^{13}\text{CF}_3\text{J}$ . Wahi P. K., Job V. A., Kartha V. B. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 2, 305—320 (англ.)

При  $t = 163$  К с помощью лазерного диодного спектрометра получены спектры поглощения полосы  $\nu_4$  ( $1190 \text{ см}^{-1}$ ), в естественных образцах  $\text{CF}_3\text{J}$  (содержание изотопов  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  989/11). Измерения проведены в кювете с длиной оптич. пути 4,5 м при давлении 0,1 мм рт. ст. Проведен анализ положения  $\sim 1200$  линий, образующих Р и R ветви колебательно-вращательной полосы  $\nu_4$ . Анализ существенно упростился благодаря проведению измерений при низких  $t$ -рах. С использованием метода наименьших квадратов проведено точное определение вращательных постоянных. К. Э. М.

М. П.

Ф. 1986, 18, № 7.

CH<sub>3</sub>I

1985

10 Б1228. Статистический анализ полос  $\nu_2$  и  $\nu_3$  метилйодида. A statistical analysis of the  $\nu_2$  and  $\nu_3$  modes of methyl iodide. Wilde R. E., Zyung T. «Mol. Phys.», 1985, 55, № 4, 809—826 (англ.)

Измерены контуры  $I(\omega)$  полос  $\nu_2$  и  $\nu_3$  молекулы CH<sub>3</sub>I в жидк. фазе при различных  $t$ -рах. Из нормированной разности  $I_{vv}(\omega) - \frac{1}{3}I_{vn}(\omega)$  интенсивностей поляризованного ( $vv$ ) и деполаризованного КР фурье — преобразованием найдены соотв. автокорреляц. ф-ции. Измерения и анализ выполнены также для р-ров CH<sub>3</sub>I в CD<sub>3</sub>I, CH<sub>3</sub>F, CS<sub>2</sub> и н-пентане. Определены вторые моменты полос  $M_2$ , к-рые зависят от  $t$ -ры, но эта зависимость

спектр,  $\nu_i$ ,

Х. 1986, 19, N 10

слабее теоретически ожидаемой. Проведен статистич. анализ корреляционных ф-ций и показано, что 1) процессы переориентации молекул и колебат. дефазировки статистически зависимы, 2) резонансные  $\nu$ — $\nu$ -процессы уширяют обе полосы  $\nu_2$  и  $\nu_3$  и дают существенный вклад в  $M_2$ , 3) вклад дипольных взаимодействий в  $M_2$  составляет 15÷30%, 4) вклад статич. неоднородности в  $M_2$  составляет 8—10  $\text{см}^{-2}$  и не зависит от температуры.

Е. В. Алиева



CH<sub>3</sub>J

1985

7 Л167. Микроволновые измерения и расчеты эффектов квадрупольной связи в молекулах CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J. Microwave measurements and calculations of quadrupole coupling effects in CH<sub>3</sub>J and CD<sub>3</sub>J. Young S. H., Kukolich S. G. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 2, 483—493 (англ.)

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией исследована ядерная СТС линий вращательных переходов с  $J=1 \leftarrow 0$ ,  $2 \leftarrow 1$  ( $K=0$ ) и  $2 \leftarrow 1$  ( $K=1$ ) молекул CH<sub>3</sub>J вблизи 15 и 30 ГГц и CD<sub>3</sub>J вблизи 12 и 24 ГГц в основном колебат. состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом квадрупольной связи и спин-вращательного взаимодействия ядра йода и центробежных поправок к энергии квадрупольной связи. Рассмотрено вычисление констант, характеризующих зависимость постоянной квадрупольной связи  $eqQ$  от вращательного состояния методом возмущений второго порядка. Из измеренных значений этих констант вычислены част-

М.П.

ф. 1986, 18, N 7.

ные производные компонентов тензора градиентов  
электрич. поля  $q_{\alpha\beta}$  у ядра йода по внутренним коле-  
бат. координатам. Полученные значения  $\partial q_{\alpha\alpha}/\partial R_1$  ( $\alpha =$   
 $= x, y, z$ ;  $R_1$  — координата растяжения связи C—J) на  
1—3 порядка больше значений остальных производных.  
М. Р. Алиев



CH<sub>3</sub>J

OM. 23209

1985

15 B1246. Микроволновые измерения и расчет эффектов квадрупольного взаимодействия в CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J. Microwave measurements and calculations of quadrupole coupling effects in CH<sub>3</sub>I and CD<sub>3</sub>J. Young S. H., Kukolich S. G. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 2, 483—493 (англ.)

На штарковском микроволновом (МВ) спектрометре в обл. частот 11—31 ГГц с точностью 10 кГц измерена СТС вращат. переходов  $J=1-0$ ,  $K=0$ ;  $J=2-1$ ,  $K=0$  и  $J=2-1$ ,  $K=1$  CH<sub>3</sub>J (I) и CD<sub>3</sub>J (II) в основном колебат. состоянии. Анализ спектров выполнен с использованием уточненного гамильтониана Хоугена с включением эффектов кватричного центробежного искажения, квадрупольного и спин-вращат. взаимодействий с учетом недиагональных членов и центробежных поправок к сверхтонкому взаимодействию. Для I и II соотв. определены вращат. постоянные  $B=7501,274(2)$  и  $6040,298(7)$  МГц и постоянные квадрупольного взаимодействия  $eQq_0=-1934,11(2)$  и  $-1928,95(4)$  МГц.

С. Н. Мурзин

м.п., волметр,  
структура

X. 1986, 19, N 15.

CH<sub>3</sub>I

Am 23209

1985

104:58660x Microwave measurements and calculations of quadrupole coupling effects in methyl iodide and methyl-d<sub>3</sub> iodide. Young, S. H.; Kukolich, S. G. (Dep. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 114(2), 483-93 (Eng). The transitions  $J = 1 - 0, K = 0; J = 2 - 1, K = 0$ ; and  $J = 2 - 1, K = 1$  of MeI and CD<sub>3</sub>I were measured by using a Stark-modulated microwave spectrometer. I quadrupole coupling strengths were analyzed to det. variations with D substitution on the Me group and variations with centrifugal distortion. Quadrupole coupling strengths were described by the expression  $eQq_0 + aJ(J+1) + bK^2 + cK^4/J(J+1)$ . Explicit expressions are given for  $a$ ,  $b$ , and  $c$  for a systematic top in terms of mol. parameters. For MeI,  $eQq_0 = -1934.11 \pm 0.02$  MHz and for CD<sub>3</sub>I  $eQq_0 = -1928.95 \pm 0.04$  MHz. Rotational consts. obtained are  $B(\text{MeI}) = 7501.274 \pm 0.002$  MHz and  $B(\text{CD}_3\text{I}) = 6040.298 \pm 0.007$  MHz. The obsd. fractional change in halogen quadrupole coupling of 0.0027 is related to previous results for Me chloride and Me bromide.

46 cexmp,  
Brausam  
nocmoet.

⊕ CD<sub>3</sub>I ●

c.A. 1986, 104, N 8

CH<sub>3</sub> Y

[Om. 25683]

1986

Anttila R., Paso R.,  
Guelachvili G.,

(V<sub>4</sub>)

J. Mol. Spectrosc., 1986,  
119, N1, 190-200.

CH<sub>3</sub>I

1986

105: 123234y A high-resolution infrared study of the  $\nu_4$  band of iodomethane. Anttila, R.; Paso, R.; Guelachvili, G. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(1), 190-200 (Eng). The IR spectrum of the  $\nu_4$  band of MeI at  $\sim 3060$  cm<sup>-1</sup> was studied at a resolu. of  $5.4 \times 10^{-3}$  cm<sup>-1</sup>. About 1850 transitions were assigned. The  $K$  range was  $K\Delta K = -7 \rightarrow +9$  and the highest  $J$  values were  $\sim 75$ . The anomalous rotational structures obsd. in the subbands  $PQ_6$  and  $RQ_5-RQ_7$  were explained as a consequence of Coriolis and Fermi resonances with combination levels. The std. deviation of the least-squares fit with 19 parameters was 0.00083 cm<sup>-1</sup>. The hot band  $\nu_3 + \nu_4 - \nu_3$  was also studied.

(UK chemp,  
 $\nu_4$ )

C.A. 1986, 105, N 14

СНЗУ

1986

1 2 Д66. Ядерная сверхтонкая структура вращательных уровней молекул, содержащих три тождественных дейтрона. Алиев М. Р., Грабойс М. Н. «Оптика и спектроскопия», 1986, 61, № 4, 740—744

Получены общие выражения для матричных элементов полного гамильтониана сверхтонких взаимодействий аксиально-симметричной молекулы, содержащей 3 квадрупольных ядра со спином 1 вне оси симметрии и одно квадрупольное ядро с произвольным спином на оси симметрии. Выведены ф-лы для всех приведенных матричных элементов. Результаты применены к анализу сверхтонкой структуры квадрупольного спектра молекулы  $\text{CD}_3\text{J}$ , измеренного в диапазоне 95—500 МГц. Найден полный набор констант сверхтонких взаимодействий, удовлетворяющих — изотопич. соотношениям.

Резюме

ф. 1987, 18, № 2

(М.Н.)

CH<sub>3</sub>I

1986

105: 161265s Spin uncoupling in the 6s Rydberg states of methyl iodide. Rotational subband structure in one-photon absorption. Dagata, J. A.; Felps, W. S.; McGlynn, S. P. (Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA 70803 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(5), 2483-8 (Eng). Mol. consts. of electronic states, all origins as well as some vibronic bands, derived from the lowest-energy Rydberg configuration of MeI, are reported. Values of the internal angular momentum parameter  $\xi_{\text{eff}}$ , which is a measure of the strength of Coriolis and vibronic coupling, indicate that the spin of the Rydberg electron is effectively uncoupled from the mol. axis in the pure electronic states and that dynamic interactions between elec., rotational, and vibrational motions completely quench the internal angular momentum in some vibronic levels. The parameters  $\xi_{\text{eff}}$ , as obtained from 1-photon absorption spectra, are approx. those of the alternate levels,  $^2E_{3/2}$  and  $^2E_{1/2}$ , of the MeI<sup>+</sup> ion-core ground configuration X.

(Pugsep. concn.)

c.A. 1986, 105, N/8



$\text{ICl}_2\text{H}(\text{D})^+$

1986

Fulara Jan, Klapstein  
Dieter, et al.

J. Phys. Chem., 1986,  
90, N10, 2061-2067.

(see  $\bullet$   $\text{BrCl}_2\text{H}(\text{D})^+$ ; III)

CH<sub>3</sub>I

(om. 24406)

1986

González M., Lago's R.,

КР. мех.  
расчет

Chem. Phys., 1986, 104,  
N 1, 49 - 56.

CH<sub>3</sub>J

1986

6 Б1263. Эмиссионная спектроскопия фотодиссоциирующих молекул CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J. Emission spectroscopy of photodissociating CH<sub>3</sub>J and CD<sub>3</sub>J. Hale Michael O., Galica Gary E., Glogover Stella G., Kinsey James L. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 21, 4997—5000 (англ.)

Исследованы спектры флуоресценции молекул CH<sub>3</sub>J и CD<sub>3</sub>J, возбуждаемые 4-й гармоникой Nd:YAG-лазера. Идентифицирована колебат. структура спектров, в к-рой преобладают серии полос  $\nu_3$  вал. кол. C—J-связи, но проявляется также полоса составного колебания  $\nu_2 + \nu_3$ . Вычислено распределение интенсивности полос для диссоциирующего по координате C—J-связи возбужденного состояния и получено удовлетворит. согласие с экспериментом. Указано на необходимость учета резонанса Ферми между колебаниями  $2\nu_3$  и  $\nu_2$ .

Е. В. Алиева

М. П.  
X (7)

X. 1987, 19, № 6

СН<sub>3</sub>У

1986

2 Д218. Диссоциативное электронное прилипание к  $\text{CF}_3\text{J}$ . Пример полностью нестатистического распределения избыточной энергии. Dissociative electron attachment to  $\text{CF}_3\text{J}$ : An example of a completely unbalanced excess energy distribution. Henri Martin, Illenberger Eugen. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 131, № 4—5, 314—318 (англ.)

Диссоциативное прилипание электронов к  $\text{CF}_3\text{J}$  исследовано с использованием квадрупольного масс-анализатора и времяпролетной методики для измерений распределений ионов по поступательной энергии. Наблюдались отрицат. ионы  $\text{J}^-$ ,  $\text{F}^-$ ,  $\text{CF}_3^-$  и  $\text{FJ}^-$ . Анализ распределений ионов по поступательным энергиям показывает, что в случае  $\text{CF}_3^-$  вся избыточная энергия возбуждения передается продуктам диссоциации  $\text{CF}^-$  и  $\text{J}$ . Образование других ионов происходит при диссоциации с участием большого числа степеней свободы в перераспределении энергии. По эксперим. данным получена оценка для сродства к электрону  $A(\text{FJ}) = 1,0 \pm \pm 0,2$  эВ.

Г. В. Карачевцев

(Ac)

ср. 1987, 18, № 2

CH<sub>3</sub>I

1986

У 12 Б1301. Исследование высокоразрешенного инфракрасного спектра полосы  $\nu_4$  молекулы CH<sub>3</sub>I. A high-resolution infrared study of the  $\nu_4$  band of CH<sub>3</sub>I. Passo R., Anttila R., Guelachvili G. «Proc. 9th Int. Conf. High Resolut. Infrared Spectrosc., Liblice near Prague, Sept. 8—12, 1986: Progr. Sess. Abstr. Pap.» Prague, s. a., 1986, 74 (англ.)

М.П.

Исследован ИК-спектр поглощения с разрешением 0,0054 см<sup>-1</sup> полосы  $\nu_4$  молекулы CH<sub>3</sub>I в обл. 3060 см<sup>-1</sup>. Отнесено 1850 переходов, включая 350 линий типа Q<sub>K</sub>(I). Изучена область значений K от -7 до +9. Наибольшее значение I составило 75. Обсуждены особенности исследованной системы (аномальная вращат. структура, кориолисово взаимодействие, резонанс Ферми, горячие переходы и т. д.). Указанный набор переходов обработан по МНК с использованием 19 свободных параметров. Ю. Н. Панченко

х. 1987, 19, №12

CH<sub>3</sub>J

1986

→ 17 Б1257. Абсолютные интенсивности комбинационного рассеяния CH<sub>3</sub>J, CH<sub>2</sub>DJ, CHD<sub>2</sub>J и CD<sub>3</sub>J. Экспериментальные результаты. Absolute Raman intensities of CH<sub>3</sub>J, CH<sub>2</sub>DJ, CHD<sub>2</sub>J and CD<sub>3</sub>J. Experimental results. Santos J., Orza J. M. «J. Mol. Struct.», 1986, 142, 205—208 (англ.)

Определены абс. интенсивности и степени деполяризации линий в спектрах КР (λ 488,0 нм) газ. CH<sub>3</sub>J (I), CH<sub>2</sub>DJ (II), CHD<sub>2</sub>J (III) и CD<sub>3</sub>J (IV). Эталон при измерении интенсивностей служила интенсивность Q-ветви полосы 2331 см<sup>-1</sup> N<sub>2</sub>, точность измерений ~10%. Оценены значения следа (α<sup>12</sup>) и анизотропии (γ<sup>12</sup>) тензора КР для I—IV. А. В. Бобров

(М.П.)

(73) 18

X. 1986, 19, ~17

CH<sub>3</sub>I

1986

13 Б4427. Конкуренция между фотодиссоциацией и фотоионизацией в метилиодиде. Competition between photodissociation and photoionization in methyl iodide. Tsukiyama K., Katz B., Bersohn R. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 124, № 4, 309—312 (англ.)

Показано, что для обнаружения ридберговских состояний  $5p\pi \rightarrow 6p$  в молекуле  $\text{CH}_3\text{I}$  (I) или  $\text{CD}_3\text{I}$  (II) можно использовать их двухфотонное возбуждение в обл. 307—343 нм сфокусированным светом перестраиваемых лазеров на красителе при наблюдении сигнала Фл в вакуумной УФ-обл. от нейтр. фотофрагментов (возбужденных атомов  $\text{J}^*$ ) вследствие поглощения 3-го фотона. Такая же диссоциация на нейтр. фрагменты с отщеплением  $\text{J}^*$  наблюдается и при действии на I монохроматич. света 118 нм (энергия фотонов 10,5 эВ превышает Пт ионизации I, равный 9,54 эВ). Таким образом, в молекулах I и II с полной энергией выше Пт ионизации диссоциации на нейтр. фрагменты  $\text{CH}_3 + \text{J}^*$  ( $6^3P_{5/2}$  или  $6^4P_{5/2}$ ) конкурирует с ионизацией. Отмечено равенство интенсивностей испускания света

(9)

(71) X

X. 1986, 19, N 13

CH<sub>3</sub>I

в переходах  $A \rightarrow X$  для СН и CD. В то же время интенсивность Фл атомов  $J^*$ , полученных из II в трехфотонном процессе, в  $\sim 10$  раз выше по сравнению с атомами  $J^*$  из I. Это различие снижается до 2 раз для однофотонного процесса (свет 118 нм). В. Е. Скурат

абате  
это



CH<sub>3</sub>Y

inv. 25156

1986

Tate R., Driscoll D.C.,  
et al.

Z. Naturforsch. 1986,  
A41, N 9, 1091-1093.

фото-  
абсорбц.  
спектр

CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>

1986

104: 98714z Vibrational analysis of the  $\tilde{A}$ - $\tilde{X}$  photodissociation spectrum of methyl iodide. Woodward, Anne M.; Colson, Steven D.; Chupka, William A.; White, Michael G. (Sterling Chem. Lab., Yale Univ., New Haven, CT 06511 USA). *J. Phys. Chem.* 1986, 90(2), 274-8 (Eng). Me iodide cations are prepd. in the  $^2\Pi_{1/2}$  and  $^2\Pi_{3/2}$  spin states by multiphoton ionization. Resonant enhancement via low-lying Rydberg states is used to produce ions in a controlled, narrow distribution of vibrational levels as shown by the photoelectron spectra obtained at the selected ionization wavelengths. The photodissocn. spectra of CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup> and CD<sub>3</sub>I<sup>+</sup> are obtained in a time-of-flight mass spectrometer and analyzed to obtain the vibrational consts. for  $\tilde{X}$  and  $\tilde{A}$  states and the spin-orbit splitting of the  $\tilde{X}$  state.

м.н.  $\tilde{X}$  и  $\tilde{A}$   
сд см.,

фотомон. спектры

CH<sub>3</sub>I

с. А. 1986, 104, N 12

$\text{CH}_3\text{J}^+$

1986

8 Л315. Колебательный анализ фотодиссоциационного спектра перехода  $A \leftarrow X$  иона  $\text{CH}_3\text{J}^+$ . Vibrational analysis of the  $A \leftarrow X$  photodissociation spectrum of  $\text{CH}_3\text{J}^+$ . Woodward Anne M., Colson Steven D., Chupka William A., White Michael G. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 2, 274—278 (англ.)

С использованием масс-спектрометрич. метода детектирования заряженных фрагментов получены фотодиссоциационные спектры перехода  $\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}$  ионов  $\text{CH}_3\text{J}$  и  $\text{CD}_3\text{J}$ . Ионы образовывались в заданных колебательных уровнях состояний  $^2\Pi_{1/2}$  и  $^2\Pi_{3/2}$  в процессе резонансно усиленной лазерной трехфотонной ионизации. Фотодиссоциационные спектры измерялись при сканировании частоты излучения фотолизирующего лазера. Идентификация электронно-колебательных состояний иона осуществлялась по спектрам кинетич. энергий фотоэлектронов, образующихся в процессе многофотонной ионизации. Определены колебательные постоянные ионов в состояниях  $\tilde{X}$  и  $\tilde{A}$ , а также величина спин-орбитального расщепления в состоянии  $\tilde{X}$ . В. А. Елохин

(М.П.)

ср. 1986, 18, № 8

CH<sub>3</sub>I (24)

1986

106: 128255m Raman study of liquid methyl iodide and methyl fluoride. Zyung, Taehyoung (Texas Tech Univ., Lubbock, TX USA). 1986. 141 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8627687. From *Diss. Abstr. Int. B* 1987, 47(8), 3376.

(CKP)

(7) ~~A~~ CH<sub>3</sub>F

C. A. 1987, 106, N 16.

CH<sub>3</sub>J

1986

7 Л193. Полный среднеквадратичный анализ данных об основной полосе  $\nu_5$ CH<sub>3</sub>J, полученных методом лазерной спектроскопии высокого разрешения. A complete least-squares analysis of a high-resolution laser spectroscopic study of CH<sub>3</sub>J  $\nu_5$  fundamental. Zhao Yao, Shen Zhiye, Zhu Qingshi, Zhang Cunhao. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 115, № 1, 34—46 (англ.)

Методом диодно-лазерной спектроскопии в области 1517—1418 см<sup>-1</sup> исследована структура колебательно-вращательной полосы  $\nu_5$ CH<sub>3</sub>J. С разрешением 0,002 см<sup>-1</sup> и точностью 0,001 см<sup>-1</sup> измерены положения ~460 вращательных линий для 10 подполос Q-ветви  $\nu_5$ . В приближении колебательно-вращательного гамильтониана, учитывающего резонансные взаимодействия типа Ферми и Корнелиса между  $\nu_5$  и  $\nu_3 + \nu_6$ , рассчитаны значения частот вращательных линий; причем, при диагонализации гамильтониана использован метод наименьших квадратов. Представлено сравнение рассчитанных частот с наблюдаемыми. Определены параметры резонансных возмущений и найдены уточненные значения молекулярных постоянных CH<sub>3</sub>J в колебательном состоянии  $\nu_5 = 1$ .

В. К.

М.А.

ср. 1986, 18, N 7

$\text{CH}_3\text{I}^+$

(Om. 25824)

1986

Woodward A.M., Colson S.D.,  
Chupka W.A.,

cremp,  
konsum.  
areany

J. Phys. Chem., 1986,  
90, No 2, 274-278.

CH<sub>3</sub>I

OM 23 132

1986

13 Б1254. Полный анализ методом наименьших квадратов результатов исследования фундаментальной полосы  $\nu_3$  CH<sub>3</sub>I методом лазерной спектроскопии высокого разрешения. A complete least-squares analysis of a high-resolution laser spectroscopic study of CH<sub>3</sub>I  $\nu_3$  fundamental. Zhao Yao, Shen Zhiye, Zhu Qingshi, Zhang Cunhao. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 115, № 1, 34—46 (англ.)

На полупроводниковом лазерном спектрометре с высоким разрешением ( $0,002 \text{ см}^{-1}$ ) измерена вращат. структура (10 Q-подветвей,  $J \leq 74$ ) полосы  $\nu_5$  ( $1418—1517 \text{ см}^{-1}$ ) молекулы CH<sub>3</sub>I ( $l=12 \text{ м}$ ,  $P=0,2 \text{ мм}$ ). Анализ результатов выполнен с учетом резонанса Ферми и кориолисовых взаимодействий между полосами  $\nu_5$  и  $\nu_3+\nu_6$ ,  $\nu_2$  методом МНК путем диагонализации полной матрицы  $H$ . Молек. постоянные возмущающих уровней фиксировались. Получены значения вращат. постоянных, постоянных  $l$ -удвоения и др. спектроскопич. постоянных для состояния  $\nu_5=1$ .

В. М. Ковба

Di, M.A.

X. 1986, 19, N 13

CH<sub>3</sub> I

(Om. 23 132)

1986

(V<sub>5</sub>)

[ 104: 98387v A complete least-squares analysis of a high-resolution laser spectroscopic study of methyl iodide vs fundamental. Zhao, Yao; Shen, Zhiye; Zhu, Qingshi; Zhang, Cunhao (Dalian Inst. Chem. Phys., Chin. Acad. Sci., Dalian, Peop. Rep. China). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 115(1), 34-46 (Eng). The high-resoln. diode laser spectra of 10 sub-Q-branches of the MeI vs fundamental were recorded. A least-squares anal. was carried out by diagonalizing the complete *H* matrix for the energy levels. A set of improved band consts. and interaction parameters were obtained.

c. A. 1986, 104, N 12



$\text{CH}_3\text{Yd}^{2+}$

[om. 27750]

1987

Curtis J.M., Brenton A.G.,  
et al.,

chempr

Chem. Phys., 1987, 117, N2,  
325-339.

Translational  Energy Spectroscopy

of long-lived indications of  
methyl iodide.



CH<sub>3</sub>I(2)

(DM-260d2)

1987

FURUSHI K., FUKUDA T., KIMU-  
YA M.,

Раман.  
спектр

J. Raman. Spectrosc., 1987,  
18, N1, 47-52.

CH3I

1987

106:1282280 Rotational analysis and interaction mechanism of the 2020 to 2440  $\text{cm}^{-1}$  infrared spectrum of iodomethane. Lattanzi, F.; Di Lauro, C.; Guelachvili, G. (Ist. Chim. Farm., Univ. Napoli, I-80138 Naples, Italy). *Mol. Phys.* 1987, 60(1), 33-43 (Eng). The vibration-rotation spectrum of MeI at 2020-2440  $\text{cm}^{-1}$  consists of the absorption of the perpendicular system  $\nu_2 + \nu_6(E)$ ,  $\nu_3 + \nu_6(E)$ ,  $\nu_3 + 2\nu_6(E)$ . The last 2 bands form a strongly coupled Fermi dyad with crossing at  $K' = 4$  in the (+l) stack of levels. Evidence was found for a z-axis Coriolis-type contribution to their matrix elements, linear in  $K$  and with opposite signs in the (+l) and (-l) series. The x - y Coriolis interaction of  $\nu_2 + \nu_6(E)$  with all components of  $\nu_6 + \nu_6(A_1 + A_2 + E)$  occurs as usual in Me halides. The spectrum does not exhibit any direct absorption to the parallel system  $\nu_3 + \nu_6(A_1 + A_2)$ ,  $\nu_3 + 2\nu_6(A_1)$  and  $\nu_2 + 2\nu_3(A_1)$ , whose presence is revealed by extensive perturbations of the perpendicular  $\nu_3 + \nu_6$ ,  $\nu_3 + 2\nu_6$  system, mostly by  $l(2, -1)$  interactions, generating anomalous rotational patterns in a wide  $K''\Delta K$  range. Accurate values of the vibration-rotation parameters of the perpendicular bands were determined by a proper use of the available data.

(v<sub>i</sub>)

C. A. 1987, 106, N 16.

CH<sub>3</sub>Y

1987

Schneider Winfried,  
Thiel Walter.

Chem.  
noct.,  
Vi;

J. Chem. Phys. 1987,  
86(2), 923-36.

(Chem. H<sub>3</sub>CF; III)

CH<sub>3</sub>J

DM 27980

1987

7 Б1083. Неэмпирический расчет спин-орбитального взаимодействия в основном состоянии CH<sub>3</sub>J. Non-empirical spin-orbit calculation of the CH<sub>3</sub>J ground state. Tadjeddine M., Flament J. P., Teichteil C. «Chem. Phys.», 1987, 118, № 1, 45—55 (англ.)

Ограниченным методом конфигурац, взаимодействия с учетом спин-орбитального взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые связи C—J молекулы CH<sub>3</sub>J в двух низших электронных состояниях. Использовано приближение релятивистского эффективного остовного Пт. Отбор конфигураций осуществлен по теории возмущений. Оператор спин-орбитального взаимодействия диагонализировали в построенном ограниченном конфигурац. базисе. При каждом из заданных значений длины связи C—J в диапазоне от 1,8 до 6А оптимизировались длины связи CH и угол H CJ. Рассчитанная энергия диссоциации CH<sub>3</sub>J на фрагменты CH<sub>3</sub>(<sup>2</sup>A<sub>2</sub>'') + J(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>) составила 2,163 эВ (эксперим. оценка 2,31—2,33 эВ). Энергия диссоциации CH<sub>3</sub>J на фрагменты CH<sub>3</sub>(<sup>2</sup>A<sub>2</sub>'') + (<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>) составила 3,09 эВ. И. А. Тополь

(М.П.)

X. 1988, 19, № 7

CH<sub>3</sub>I

OM 27980

1987

! 5 Д118. Неэмпирический расчет основного состояния CH<sub>3</sub>I с учетом спин-орбитального взаимодействия. Non-empirical spin-orbit calculation of the CH<sub>3</sub>I ground state. Tadjeddine M., Flament J. P., Teichteil C. «Chem. Phys.», 1987, 118, № 1, 45—55 (англ.)

Неэмпирическим релятив. методом ССП МО ЛКАО с учетом спин-орбитального взаимодействия с помощью эффективного гамильтониана с учетом КВ и с использованием спин-орбитального псевдопотенциала для атома I и псевдопотенциала Дюрана для атомов C и J исследовано электронное строение CH<sub>3</sub>I в низших состояниях, коррелирующих с диссоциационным пределом CH<sub>3</sub> (<sup>2</sup>A<sub>2</sub>'') + J(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub> или <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>). Приведены потенц. кривые как ф-ции расстояния C—J. Энергии диссоциации с образованием J(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub> и <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>) равны 2,163 и 3,094 эВ (эксперим. значения 2,312 и 2,33). В. Л. Лебедев

М.Л.

Ф. 1988, 18, NS

CH<sub>3</sub>I

(Im. 27980) 1987

108: 13133u Non-empirical spin-orbit calculation of the methyl iodide ground state. Tadjeddine, M.; Flament, J. P.; Teichteil, C. (Dep. Chim., Ec. Polytech., 91128 Palaiseau, Fr.). *Chem. Phys.* 1987, 118(1), 45-55 (Eng). The spin-orbit coupling of mol. states of MeI was introduced through an effective Hamiltonian and with pseudo-potentials (CIPSO algorithm). Results are presented for the 1st states of MeI which were correlated to the  $\text{Me}(^2A''_2) + \text{I}(^2P_{3/2})$  or  $^2P_{1/2}$  dissociation limits. The dissociation energy for MeI is in agreement with observation.

meoem-  
paeem. Do

C.A. 1988, 108, 42



$\text{CH}_3\text{I}^+$

Om. 27 945

1987

108: 29285f Mass-selected molecular ion spectra: (1 + 1)-photodissociation spectroscopy of iodomethane (1+) and iodomethane- $\text{d}_3$  (1+) ( $\text{CH}_3\text{I}^+$  and  $\text{CD}_3\text{I}^+$ ). Weinkauff, R.; Walter, K.; Boesl, U.; Schlag, E. W. (Inst. Phys. Theor. Chem., Tech. Univ. Muenchen, D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 141(4), 267-76 (Eng). The first well resolved (1 + 1)-photodissocn. spectra of mol. ions are presented. By sepg. the spectroscopic step (first photon) and the dissocn. step (second photon) the accessible spectral region of  $\text{CH}_3\text{I}^+$  and  $\text{CD}_3\text{I}^+$  considerably. The ions are prepd. in the vibrationless ground state by multiphoton ionization in a supersonic mol. beam. A new detection technique is presented with high discrimination between wanted and unwanted ionic species. Furthermore, another new technique for unimol. decay measurements delivers useful information for the assignment of the ion spectra. An improved assignment for  $\text{CH}_3\text{I}^+$  and  $\text{CD}_3\text{I}^+$  was found with consequences for mol. const.

M.A.

(41) IX

c. A. 1988, 108, N 4

$\text{CD}_3\text{I}^+$

CH<sub>3</sub>I

OM 27177 1987

12 Л117. Вращательные постоянные метилиодида.  
The rotational constants of methyl iodide. Włodarczak G., Boucher D., Bocquet R., Demaison J. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 124, № 1, 53—65 (англ.)

В диапазоне 120÷1000 ГГц исследованы МВ-спектры молекул CH<sub>3</sub>I, <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>I и CD<sub>3</sub>I. Идентифицированы линии вращательных переходов с  $J \leq 64$  и их квадрупольная СТС в основном колебательном состоянии, а в случае молекулы CH<sub>3</sub>I еще и в возбужденных колебательных состояниях с  $\nu_3=1$  и 2 и  $\nu_6=1$ . Анализ спектров выполнен совместно с литературными данными по МВ- и ИК-спектрам и определены значения вращательных постоянных, постоянных кватичного и секстичного центробежного искажения, постоянных кориолисова взаимодействия 1-го и 3-го порядков, параметров l-резонанса и постоянных квадрупольной связи и спин-вращательного взаимодействия ядра йода. Не определяемые по раз-

М.А.

(7) ☒

ф. 1987, 18, N 12

CD<sub>3</sub>I

решенным переходам постоянные  $A$  и  $D_k$  вычислены с использованием правил сумм для кориолисовых постоянных  $\eta_J$  и  $\eta_K$  и ИК-данных.

М. Р. Алиев

CH<sub>3</sub>I

от 27 177 1987

1) 24 Б1271. Вращательные постоянные иодистого метила. The rotational constants of methyl iodide. Włodarczyk G., Boucher D., Bocquet R., Demaison J. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 124, № 1, 53—65 (англ.)

На супергетеродинном субмиллиметровом спектрометре в обл. частот 120—300 ГГц с точностью 30—300 кГц измерены вращат. спектры трех изотопич. образцов иодистого метила, CH<sub>3</sub>I (I), <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>I (II) и CD<sub>3</sub>I (III), в основном колебат. состоянии и I в возбужденных колебат. состояниях  $\nu_3=1, 2$  и  $\nu_6=1$ . Анализ спектров выполнен с учетом кватерного и секстичного центробежного искажения, ядерного квадрупольного и спин-вращательного взаимодействий. С учетом микроволновых и миллиметровых эксперим. данных для I, II и III в основном состоянии определены уточненные значения вращат. постоянных, соотв.,  $B=7501,2757456(210)$ ,  $7119,04685(28)$  и  $6040,29728(38)$  МГц, центробежных постоянных и постоянных сверхтонкой структуры. Уточнены молек. параметры для полосы  $\nu_6$ . С. Н. Мурзин

М.Н.

4) 12

х. 1987, 19, № 24

CD<sub>3</sub>I

CH<sub>3</sub>I

(DM 27177)

1987

107: 66932q The rotational constants of methyl iodide. Włodarczak, G.; Boucher, D.; Bocquet, R.; Demaison, J. (Lab. Spectrosc. Hertziennne, Univ. Lille Flandres Artois, 59655 Villeneuve Ascq, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 124(1), 53-65 (Eng). The rotational spectra of MeI ( $\nu=0$ ;  $\nu_3=1$ ;  $\nu_3=2$ ;  $\nu_8=1$ ), <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>I ( $\nu=0$ ), and CD<sub>3</sub>I ( $\nu=0$ ) were obsd. in the sub-mm-wave region. These data were combined with the microwave and mm-wave measurements to det. with high accuracy the rotational and centrifugal distortion consts. An overall fit including rotational data and IR laser measurements yielded a set of mol. parameters for the  $\nu_8$  band of MeI.

$\nu_6$ , Krausz  
Cnexp

C.A. 1987, 107, N. 8

CH<sub>3</sub> γ

(DM. 31342)

1988

Continenti R.E., Bal-  
ko B.A. et al.,

φonomy

J. Chem. Phys. 1988,  
89, N5, 3383-3384.

$\text{CH}_2=\text{CH}_2$  [Om. 29 667] 1988

Crab D.T., Perry M.C.,

μ<sub>0</sub> спектр,  
дипольн.  
момент  
трансам-  
постой.

J. Chem. Phys., 1988.

88, N 6, 3497 - 3507.

$\text{CH}_3\text{I}^+$  com. 30490 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1988, 17, N2, 423.



CH<sub>3</sub>I

ОМ. 29261

1988

Г 8 Д61. Трехмодовая модель больших амплитуд для основного электронного состояния CH<sub>3</sub>I. A three-mode large-amplitude model for the ground electronic state of CH<sub>3</sub>I. Johnson Bruce R., Kinsey James L. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 5, 3147—3158 (англ.)

Развита модель больших амплитуд для ядерных координат для описания трех A<sub>1</sub> колебательных мод молекулы CH<sub>3</sub>I. Показано, что использование простых криволинейных координат приемлемо для тех областей основного электронного состояния, которые исследуются методом резонансного КР. Построена поверхность потенц. энергии с использованием зонтичной структуры CH<sub>3</sub> и координат связи C—I. Результирующие двухмодовые уровни согласуются почти во всеми наблюдаемыми переходами вплоть до 9300 см<sup>-1</sup>. Использование всех трех мод позволяет применить в расчетах ту же потенц. поверхность CH<sub>3</sub>I. Полученные колебательные частоты согласуются с экспериментом.

Н. В. В.

М.А.

ср. 1988, 18: 18

СМЗ 30584, Ом 31520 1988

5 Б1220. Эмиссионная спектроскопия преддиссоциационного ридберговского В-состояния  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{CD}_3\text{I}$  при 193,3 нм. Emission spectroscopy of the predissociative Rydberg B state of  $\text{CH}_3\text{I}$  and  $\text{CD}_3\text{I}$  at 193.3 nm / Lao K., Person M. D., Chou T., Butler L. J. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 6.— С. 3463—3469.— Англ.

На дифракц. монохроматоре в обл. частот 45 000—52 000  $\text{см}^{-1}$  с разрешением 15  $\text{см}^{-1}$  измерены УФ-спектры излучения  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{CD}_3\text{I}$  после возбуждения молекул излучением эксимерного лазера на частоте 51 760  $\text{см}^{-1}$  с шириной полосы около 130  $\text{см}^{-1}$ . В спектрах наблюдалось возбуждение преддиссоциац. ридберговских состояний  $(E,1)\{2\}$ . По уширению линий спектра определена нижняя граница для времени жизни преддиссоциац. колебат. уровня в ридберговском состоянии. Идентифицированы ранее не наблюдавшиеся комбинац. моды в основном электронном состоянии.

С. Н. Мурзин

М.А.

Х. 1989, № 5

CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>

DM 30017

1988

11 Д345. Спин-орбитальные расчеты молекулярных состояний CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>, относящиеся к экспериментам по фотофрагментации. Spin-orbit calculations of the molecular states of CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>, related to photofragmentation experiments. Tadjeddine M., Flament J. P., Teichteil C. «Chem. Phys.», 1988, 124, № 1, 13—28 (англ.)

Молекулярные состояния CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup> (I) рассчитаны методом CIPSI. Спин-орбитальное взаимодействие в J вводилось через эффективный гамильтониан с псевдопотенциалами. Представлены результаты для 12 первых состояний E<sub>1/2</sub> и 6 первых состояний E<sub>3/2</sub> в I. Рассматривалась фотодиссоциация на фрагменты CH<sub>3</sub>(<sup>2</sup>A<sub>2</sub>'') и J<sup>+</sup>(<sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D, <sup>1</sup>S) или CH<sub>3</sub><sup>+</sup>(<sup>1</sup>A<sub>1</sub>') и J(<sup>2</sup>P). При равновесной геометрии нейтральной молекулы r<sub>CJ</sub> = 2,14 Å 1-е, 2-е и 5-е состояние E<sub>1/2</sub> — это  $\tilde{X}^2E_{1/2}$ -, A<sup>2</sup>A<sub>1</sub>- и  $\tilde{B}^2E$ -состояния, известные из фотоэлектронной спектроскопии. Состояния 1 E<sub>1/2</sub> и 2 E<sub>1/2</sub> — это те со-

М.Н.

ф. 1988, 18, N 11

стояния, между которыми происходит фотонное поглощение в экспериментах по фотодиссоциации. Расчеты показали, что спин-орбитальное взаимодействие между ними  $\sim 2\%$  при  $2,14 \text{ \AA}$ , что согласуется со спектроскопич. данными. При  $r_{CJ} > 3,5 \text{ \AA}$  это взаимодействие быстро возрастает с возрастанием межъядерного расстояния C—J. Рассчитаны дипольный момент перехода  $2E_{1/2} \leftarrow 1E_{1/2}$  и параметр анизотропии углового распределения фотофрагментов. Н. В. В.



CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>

DM 30017

1988

monerem. cocrm.  
adm, cmprkry  
pa, meop.  
pacrm

109: 137665j Spin-orbit calculations of the molecular states of methyl iodide ion (CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>) related to photofragments: experiments. Tadjeddine, M.; Flament, J. P.; Teichteil, C. Polytech., 91128 Palaiseau, Fr.). Chem. Phys. 1988, 124(1), 13 (Eng). The mol. states of MeI<sup>+</sup> were calcd. by means of the CI method. The spin-orbit coupling of introduced through an effective Hamiltonian and with pseudopotentials (CIPSO algorithm). Results were presented for the 12 E<sub>1/2</sub> states and 6 1st E<sub>3/2</sub> states of MeI<sup>+</sup> which dissociate into the fragments Me and I(<sup>3</sup>P, <sup>1</sup>D, <sup>1</sup>S) or Me<sup>+</sup> and I(<sup>2</sup>P). At the equil. geometry of the neutral mol. (r<sub>CI</sub> = 2.14 Å) the 1E<sub>1/2</sub>, 2E<sub>1/2</sub>, and 5E<sub>1/2</sub> states are the X<sup>2</sup>E<sub>1/2</sub>, A<sup>2</sup>A<sub>1</sub>, and B<sup>2</sup>E states known in photoelectron spectroscopy. These states present a binding energy region 2.14 Å (1E<sub>1/2</sub>), 2.7 Å (2E<sub>1/2</sub>), and 3.2 Å (5E<sub>1/2</sub>). Dissociation energy is given with an error of 0.3 eV for the 1E<sub>1/2</sub> state (and 1E<sub>3/2</sub> state). The 5E<sub>1/2</sub> state presents a well of 0.33 eV while it is repulsive without spin-orbit coupling. The 1E<sub>1/2</sub> and 2E<sub>1/2</sub> states are the states between which the photon absorption takes place in the photodissociation expts. The spin-orbit coupling between these states is <2% at 2.14 Å, in agreement with the spectroscopic results; at >3.5 Å it increases rapidly with the C-I internuclear distance. The dipole moment of the 2E<sub>1/2</sub> ← 1E<sub>1/2</sub> transition and the anisotropy parameter β of the angular distribution of the photofragments were calcd. These results are in agreement with the exptl. ones.

C. A. 1988, 109, N 16

CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>

OT-29697

1988

11 Д139. Потенциалы ионизации CH<sub>3</sub>J: неэмпирические расчеты с учетом спин-орбитального взаимодействия. Ionization potentials of CH<sub>3</sub>I: ab-initio calculations including spin-orbit coupling. Tadjeddine M., Flament J. P., Teichteil C. «J. Mol. Struct. Theochem». 1988, 166, 147—152 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием усредненного и спин-орбитального псевдопотенциалов рассчитаны потенциалы ионизации для 11 первых состояний  $E_{1/2}$  и 6 первых состояний  $E_{3/2}$  CH<sub>3</sub>J<sup>+</sup>. Точность оценки энергий составила 0,6 эВ. Расщепление первых состояний  $E_{3/2}$  и  $E_{1/2}$  ( $X^2E$ ) найдено равным 0,623 эВ, что хорошо согласуется с экспериментальными спектроскопич. данными (0,626—0,628 эВ). Подчеркнута важность учета спин-орбитального взаимодействия.

В. Л. Лебедев

М.П.

Ф. 1988, 18, N 11

CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>

OM 29697

1988

1 21 B1081. Ионизационные потенциалы CH<sub>3</sub>I: неэмпирические расчеты с учетом спин-орбитального взаимодействия. Ionization potentials of CH<sub>3</sub>I: ab-initio calculations including spinorbit coupling. Tadjeddine M., Flament J. P., Teichteil C. «J. Mol. Struct. Theochem», 1988, 166, 147—152 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны энергии 11 низших  $E_{1/2}$ - и 6 низших  $E_{3/2}$ -состояний катиона CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup> с учетом спин-орбитального взаимодействия и применением псевдопотенциалов для описания остовных электронов. Энергии 3 низших состояний воспроизводятся с точностью не хуже 0,6 эВ, а расчетное расщепление между двумя низкими состояниями CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>  $1E_{3/2}$  и  $1E_{1/2}$  (0,623 эВ) практически совпадает с экспериментально наблюдаемым (0,626—0,628 эВ).

В. Я. Беспалов

М. П.

X. 1988, 19, N 21

CH<sub>3</sub>I

Am. 29697

1988

109: 116427t Ionization potentials of iodomethane: ab-initio calculations including spin-orbit coupling. Tadjeddine, M.; Flament, J. P.; Teichtel, C. (Groupe DCMT, Ec. Polytech., 91128 Palaiseau, Fr.). *THEOCHEM* 1988, 43, 147-52 (Eng). The ionization potentials of CH<sub>3</sub>I have been calcd. at the equil. geometry of the neutral mol. ( $r_{C-I} = 2.14$  Å) by means of the CIPSI method. The spin-orbit coupling is treated through an effectived Hamiltonian and with pseudopotentials (CIPSO algorithm). Results are given for the 11 first  $E_{1/2}$  states and 6 first  $E_{3/2}$  states of CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>. Energies are given with an error of  $\approx 0.6$  eV and the splitting between the two first states 1  $E_{3/2}$  and 1  $E_{1/2}$  is in very good agreement with the spectroscopic results.

момент.  
расчет I,  
структурн.

C.A. 1988, 109, N 14



CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>

OM 30 466

1988

7 Б1226. Спектроскопия молекулярных ионов. Спектры резонансной двухфотонной диссоциации CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup> и CD<sub>3</sub>I<sup>+</sup>, разделенных по массе. Molecular ion spectroscopy: Mass selected, resonant two-photon dissociation spectra of CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup> and CD<sub>3</sub>I<sup>+</sup> / Walter K., Weinkauff R., Boesl U., Schlag E. W. // J. Chem. Phys.— 1988,— 89, № 4.— С. 1914—1922.— Англ.

Методом спектроскопии резонансной двухфотонной диссоциации (// Chem. Phys. Lett.— 1987.— 141.— С. 267) исследована колебат. структура перехода  $\tilde{A}^2\Sigma \leftarrow \tilde{X}^2\Pi$  катионов CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup> и CD<sub>3</sub>I<sup>+</sup>. Наблюдалось около 330 полос (90% из них отнесено). Ионы CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup> и CD<sub>3</sub>I<sup>+</sup> в состояниях  $\tilde{X}^2\Pi_{3/2,1/2}$  ( $\nu_2=0-3$ ) получались методом резонансной многофотонной (2+1) ионизации. Колебат. структура представляет собой прогрессии полос (до 21 члена в прогрессии) связанных с полносимм. вал. кол. C—H и C—I ( $\nu_1$  и  $\nu_3$ ) и деф. кол. CH<sub>3</sub>-группы

М.А.

⊗(4)

Х. 1989, № 7

$(\nu_2)$ . Значения спектроскопич. постоянных (в  $\text{см}^{-1}$ ):  
 $\text{CH}_3\text{I}^+ - \nu_{00}(\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}^2\Pi_{3/2}) = 19\,409$ ,  $\nu_{00}(\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}^2\Pi_{1/2}) =$   
 $= 14\,359$ , состояние  $\tilde{A}^2\Sigma$ ,  $\omega_3' = 296,3$ ,  $X'_{33} = 2,15$ ,  
 $Y'_{333} = -0,011$ ,  $\omega_2' = 1197$ ,  $X'_{22} = 4,7$ ,  $X'_{23} = -0,94$ ,  
 $D_0' = 8056$ ;  $\text{CD}_3\text{I}^+ - \nu_{00}(\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}^2\Pi_{3/2}) = 19\,500$ ,  $\nu_{00}(\tilde{A} \leftarrow$   
 $\leftarrow \tilde{X}^2\Pi_{1/2}) = 14\,464$ , состояние  $\tilde{A}^2\Sigma$ ,  $\omega_3' = 278,4$ ,  $X'_{33} =$   
 $= 2,14$ ,  $Y'_{333} = 0,006$ ,  $\omega_2' = 921$ ,  $X'_{22} = 3,5$ ,  $X'_{23} =$   
 $= -0,39$ ; состояние  $\tilde{X}^2\Pi_{3/2}$ ,  $\omega_1'' + X''_{11} = 2125$ ; состоя-  
 ние  $\tilde{X}^2\Pi_{1/2}$ ,  $\omega_3'' + X''_{33} = 442$ .

В. М. Ковба



CH<sub>3</sub>I

(Om. 31751)

1988

110: 104688m Potential energy surfaces for rotational excitation of methyl product in photodissociation of iodomethane. Yabushita, Satoshi; Morokuma, Keiji (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 153(6), 517-21 (Eng). Potential energy surfaces of low-lying excited states of CH<sub>3</sub>I were calcd. for sym. (C<sub>3v</sub>) and bent (C<sub>s</sub>) dissocn. using the ab initio CI method with the effective spin-orbit Hamiltonian. A small but significant bending torque arises for the A' surfaces near the 3E-2A<sub>1</sub> conical intersection, which can be the origin of the CH<sub>3</sub> rotational excitation obsd. in CH<sub>3</sub>I photodissocn.

потенс.  
поверхн.  
нукл. ф.  
состоян.

с.А. 1989, 110, N12

СМЗ

1988

18 Б4342. Каналы фотодиссоциации и распределение энергии в фотофрагментации алкилйодидов. Photodissociation channels and energy partitioning in the photo-fragmentation of alkyl iodides. Zhu O., Cao J. R., Wen Ye, Zhang J., Zhong X., Huang Y., Fang W., Wu X. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 144, № 5—6, 486—492 (англ.)

Методом квадрупольной МС исследованы времяпролетные распределения атомов J — продуктов фотофрагментации (ФФ) алкилйодидов RJ (R=Me, Et, Pr, изо-Pr) в импульсном молек. пучке под действием излучения 248 нм эксимерного лазера на KrF. По этим распределениям определены соотношения выходов  $J^*(^2P_{1/2})$  и  $J(^2P_{3/2})$ , к-рые оказались равными 2,80; 2,37; 1,61 и 0,96 соотв. при R=Me, Et, Pr, изо-Pr. На основе энергетич. баланса определены доли допустимой энер-

Jo

④

X. 1988, 19, N 18

СМЗ

гин, к-рые расходуются на внутр. возбуждение алкильного фотофрагмента R. Эта доля возрастает от 12,5% для канала отщепления J\* из MeJ до 64% для обоих каналов при ФФ изо-PrJ. По величине макс. поступат. энергии в канале отщепления J\* определены энергии диссоциации  $D(C-J)$  (ккал/моль): MeJ  $55,0 \pm 0,5$ ; EtJ  $55,3 \pm 1,0$ . — В. Е. Скурат



CH<sub>3</sub>I

1988

Ziegler L. D., Chung Y. C.

11th Int. Conf. on Raman  
Spectrosc.; Proc., London

M. n.

5-9 Sept, 1988, Chichester  
etc., 1988. C. 147-148.

(see. NH<sub>3</sub>; III)

$^{12}\text{CH}_3\text{Y}$

$^{13}\text{CH}_3\text{Y}$

1989  
Alanko S., Anttila R.,  
et al.,

$^{213}$

Overtone bands  $^{213}$   
of  $^{12}\text{CH}_3\text{Y}$  and  $^{13}\text{CH}_3\text{Y}$ .

Eleventh ● Colloquium On  
N18

High Resolution Molecular  
Spectroscopy, Giessen, September  
18-22, 1989, A1, N18.



CH<sub>3</sub>I

DM 32576

1989

✓ 6 Б1496. Полоса  $\nu_3$  CH<sub>3</sub>I вблизи 533 см<sup>-1</sup>. The  $\nu_3$  band of CH<sub>3</sub>I around 533 cm<sup>-1</sup> / Alanko S., Horne-  
man V.-M., Kauppinen J. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.—  
135, № 1.— С. 76—83.— Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в области частот 491—  
558 см<sup>-1</sup> с разрешением 0,004 см<sup>-1</sup> измерена вращат.  
структура полосы  $\nu_3$  и горячей полосы  $2\nu_3-\nu_3$  CH<sub>3</sub>I.  
Идентифицировано около 1000 линий параллельной по-  
лосы  $\nu_3$  со значениями  $K=0-10$  и  $J$  вплоть до 65.  
Анализ ИК-спектров выполнен с учетом квартичного  
центробежного искажения. В результате одновременной  
обработки ИК- и микроволновых данных определены  
частоты полосы  $\nu_3$  и горячей полосы  $2\nu_3-\nu_3$ , соотв.,  
 $\nu_0=533,216849(25)$  и  $526,775718(81)$  см<sup>-1</sup> и разности  
вращат. и центробежных постоянных в основном и  $\nu_3$   
колебат. состояниях.

С. Н. Мурзин

М.П.

Х. 1990, № 6

CH<sub>3</sub>I

(DM. 32576)

1989

(v<sub>3</sub>)

/ 110: 221713b The  $\nu_3$  band of methyl iodide around 533 cm<sup>-1</sup>. Alanko, S.; Horneman, V. M.; Kauppinen, J. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 135(1), 76-83 (Eng). The region of the lowest fundamental band  $\nu_3$  of CH<sub>3</sub>I around 533 cm<sup>-1</sup> was studied at a resolu. of 0.004 cm<sup>-1</sup>. In the parallel band  $\nu_3$  about 1000 lines were measured with K = 0-10 and J up to 65. A set of mol. parameters for the  $\nu_3$  band was obtained. The rovibrational data were also fitted simultaneously with the pure rotational data at the  $\nu_3 = 1$  state. In addn. to the main band, the hot band  $2\nu_3 - \nu_3$  was investigated.

C.A. 1989, 110, N24

$\text{CH}_3\text{I}^+$   
 $\text{CD}_3\text{I}^+$

1989

/ 112: 206789d Molecular ion spectroscopy: mass selected, resonant two-photon dissociation spectra of  $\text{CH}_3\text{I}^+$  and  $\text{CD}_3\text{I}^+$ . Baer, Tomas (Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC USA). *Chemtracts: Anal. Phys. Chem.* 1989, 1(1), 26-7 (Eng). The title research of K. Walter et al. (1988) is reviewed with commentary and 2 refs.

of 20p

C.A. 1990, 112, N 22

$\text{CH}_3\text{I}^+ / \text{CD}_3\text{I}^+$

1989

/112: 27580g. Résonant enhanced multiphoton dissociation spectroscopy of molecular ions: technique and application to methyl iodide and methyl-d<sub>3</sub> iodide ( $\text{CH}_3\text{I}^+ / \text{CD}_3\text{I}^+$ ). Boesl, U.; Weinkauff, R.; Walter, K. (Inst. Phys. Theor. Chem., Tech. Univ. Muenchen, 8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *AIP Conf. Proc.* 1988 (Pub. 1989). 191(Adv. Laser Sci.-4), 488-93 (Eng). Photodissocn. spectroscopy of mol. radical cations involve multiphoton ionization (as an ion source) and mass spectroscopic techniques for distinguishing between mol. and fragment ions, as well as between fragment ions of different origins. Photodissocn. spectroscopy includes predissocn. as well as resonant enhanced multiphoton dissocn. The latter allows access to non-fluorescing and non-dissocg. ionic states. A special method allows detn. of metastable decay times for very large mass differences of mol. and fragment ions. This information can be used to assign predissocn. spectra. These methods are applied to  $\text{CH}_3\text{I}^+$  and  $\text{CD}_3\text{I}^+$ . For the first time the electronic origin of the A X transition and was scan down, and assignable rotational fine structure was obsd.

Te, (журнал  
м-хоро вода)  
до

C.A. 1990, 112, N 4

CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>

1989

111:67213a High resolution photofragment spectroscopy of the gas phase methyl iodide ion. Chen, Lingbing; Figger, H.; Quint, W. (Max-Planck-Inst. Quantenopt., D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1989, 13(1), 61-7 (Eng). Photodissocn. spectra of the mol. ion MeI<sup>+</sup> were obtained with a 3-stage quadrupole mass spectrometer. Starting from the  $\bar{X}^2E_{3/2}$  ground state, the  $A^2E_{1/2}$  state was excited with a stilbene 3 continuous-wave dye laser. This state predissociates to MeI<sup>+</sup> + I. Measuring the intensity of the MeI<sup>+</sup> fragment ions as a function of the wavelength of the exciting laser, a spectrum showing vibrational and rotational structure was obtained. The vibrational structure was assigned to 3 progressions of  $\nu_3$  and new vibrational frequencies were detd. From a computer simulation of the (0, 1, 10) band rotational consts. were derived. Their dependence on the vibration  $\nu_3$  was studied.

(Di)

C.A. 1989, 111, N8

CH39

(DM. 31275)

1989

Dayanand V.,  
Ravindranath K.,

UK-UM-  
MEMBER,  
POCKET  
SYM. POST.

Curr. Sci. (India), 1989,  
58, N2, 52-54.

CH<sub>3</sub>I

1989

14 Б1212. Колебательный ангармонизм в CH<sub>3</sub>I: Исследование с совместным использованием локальной и нормальной мод. Vibrational anharmonicity in CH<sub>3</sub>I: A joint local and normal mode study / Duncan J. L., Ferguson A. M., Mathews S. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 2.— С. 783—790.— Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в области частот 500—16500 см<sup>-1</sup> с разрешением около 0,25 см<sup>-1</sup> измерен вращательно-колебат. спектр иодистого метила, CH<sub>3</sub>I, в газовой фазе, при этом выполнены наблюдения вал. кол. СН вплоть до  $v=5$ . Полный анализ 16 перпендикулярных полос в области 3750—9100 см<sup>-1</sup> осуществлен с учетом кориолисова взаимодействия. Анализ вал. кол. СН до  $v=2$  в области 500—6100 см<sup>-1</sup> проведен с учетом ангармонизма. В области частот вплоть до 16500 см<sup>-1</sup> при анализе учтено взаимодействие Дарлинга—Деннисона и резонанс Ферми. В этом случае для описания вал. кол. СН использован базис локальной моды, а для др. типов колебаний базис нормальной моды. Полученные молек. параметры с хорошей точностью описывают все 63 колебат. уровня CH<sub>3</sub>I в области частот 500—16500 см<sup>-1</sup>. С. Н. Мурзин.

М.А.

Х. / 1990, № 14

CH<sub>3</sub>I

1989

111: 86478g Vibrational anharmonicity in iodomethane: a joint local and normal mode study. Duncan, J. L.; Ferguson, A. M.; Mathews, S. (Dep. Chem., Univ. Aberdeen, Aberdeen, UK AB9 2UE). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(2), 783-90 (Eng). The IR spectrum of gaseous MeI was investigated at 500-16500 cm<sup>-1</sup>,  $\leq 6$  quanta of excitation in CH stretching. Sixteen perpendicular bands at  $>3700$  cm<sup>-1</sup> were analyzed, some as Fermi resonance diads, in order to det. accurate vibrational wavenos. for the constituent levels. The local mode model was applied to the CH stretching manifold to account for anharmonicity and the effects of Darling-Dennison resonances. Vibrations not involving CH stretching were treated in a normal mode basis. The joint approach, which takes into account known Fermi resonances, enables a complete set of 27 vibrational anharmonicity parameters to be detd. for MeI which fits 63 obsd. vibrational levels with  $V \leq 6$  with a root-mean square error of 2.75 cm<sup>-1</sup>.

(UK)

C.A. 1989, III, N10



CH<sub>3</sub>I

(OM-31886)

1989

Badki Z., Włodarczak B.,  
et al.,

Microcomp,

M

Chem. Phys. Lett., 1989,  
156, N4, 401-404.

The dipole moments of methyl  
bromide and ● methyl iodide.

CH<sub>3</sub>I

UM 32156

1989

110: 221743m Rotational analysis and anomalous intensity patterns of the 2430 to 2770 cm<sup>-1</sup> infrared spectrum of iodomethane. Lattanzi, F.; Di Lauro, C.; Guelachvili, G. (Dip. Chim. Farm. Tossicol., Univ. Napoli, I-80131 Naples, Italy). *Mol. Phys.* 1989, 66(2), 509-18 (Eng). The vibration-rotation spectrum of MeI was investigated at 2430-2770 cm<sup>-1</sup> with a resolu. of ~0.005 cm<sup>-1</sup>. Vibration-rotation constns. of the parallel 2ν<sub>2</sub> band, the perpendicular Fermi dyad ν<sub>2</sub> + ν<sub>5</sub>/ν<sub>2</sub> + ν<sub>3</sub> + ν<sub>6</sub>, and the perpendicular component of the 3ν<sub>6</sub> overtone (l = ±1) involved in anharmonic interactions affecting both ν<sub>2</sub> + ν<sub>5</sub> and ν<sub>2</sub> + ν<sub>3</sub> + ν<sub>6</sub>, were detd. Account was made for the x-y Coriolis interactions of ν<sub>2</sub> + ν<sub>5</sub> with 2ν<sub>2</sub> and all components of 2ν<sub>5</sub>, and of ν<sub>2</sub> + ν<sub>3</sub> + ν<sub>6</sub> with all components of ν<sub>3</sub> + ν<sub>5</sub> + ν<sub>6</sub>. The interactions involving 2ν<sub>5</sub> and ν<sub>3</sub> + ν<sub>5</sub> + ν<sub>6</sub> were handled by 2nd order perturbation theory, since these levels occur in a complicated band system which was not clarified. Both ν<sub>2</sub> + ν<sub>5</sub> and ν<sub>2</sub> + ν<sub>3</sub> + ν<sub>6</sub> exhibit marked anomalous rotational intensity patterns, showing the enhancement of the ΔJ = 0 and ΔJ = -ΔK branches and the depletion of the ΔJ = ΔK branches at all values of K ≠ ΔK except zero. This intensity perturbation is explained by means of the combined mechanisms of intensity stealing by ν<sub>2</sub> + ν<sub>5</sub> from the stronger 2ν<sub>2</sub> and 2ν<sub>5</sub><sup>0</sup> parallel bands. With a neg. value of ζ<sub>25</sub>, the involved vibrational transition moments are approx. in the ratios T<sub>25</sub>:T<sub>22</sub>:T<sub>15</sub><sup>0</sup> = 1:12:-12, with a neg. intensity perturbation in the 2ν<sub>2</sub>/ν<sub>2</sub> + ν<sub>5</sub> pair and a pos. intensity perturbation in the 2ν<sub>5</sub><sup>0</sup>/ν<sub>2</sub> + ν<sub>3</sub> pair.

(UK chemp)

C.A. 1989, 110,  
N 24

CH<sub>3</sub>I

1989

Paso R., Anttila R., et al.

$\nu_1$  band of CH<sub>3</sub>I.

$\nu_1$

Eleventh Colloquium On  
High Resolution Molecular  
Spectroscopy, Giessen, Septem-  
ber 18-22, ● 1989, A1, H14/H14

CH<sub>3</sub>I

1989

111: 30544h Raman polarizabilities of the  $\nu_1$ ,  $\nu_4$  bands of methyl iodide. Santos, J.; Garcia Hernandez, M. (Inst. Estruct. Mater., CSIC, Madrid, Spain 28006). *J. Raman Spectrosc.* 1989, 20(5), 307-9 (Eng). The Raman spectrum of MeI was recorded at  $\sim 3000$  cm<sup>-1</sup> with a resoln. of 0.25 cm<sup>-1</sup>. The range measured includes the  $\nu_1$ ,  $\nu_4$  bands of symmetry species  $A_1$  and  $E$ , resp. Using published vibrational-rotational consts., a computer simulation of the band contour was carried out, yielding relative values of Raman polarizability derivs. for these bands. From previous measurements of the scattering cross section the moduli of the Raman tensor components related to  $\nu_1$  and  $\nu_4$  vibrational modes were detd.

(CRP)

c.A. 1989, 111, N4

$\text{CH}_3\text{I}^+$

[Om. 33211]

1989

Syage J.A., Pollard J.E.,  
et al.,

Chem. Phys. Lett. 1989,  
161, N2, 103-110.

Resonance Ion  
Spectroscopy of  Dissociation  
 $\text{CH}_3\text{I}^+$  Produ-

ced by Molecular Beam Elect-  
ron - Impact Ionization.

CH<sub>3</sub>I

1989

/ 111: 122843w Rotational diffusion in methyl iodide: bandshape analysis of degenerate vibrational modes. Wang, S. P.; Yuan, P.; Schwartz, M. (Dep. Chem., Univ. North Texas, Denton, TX 76203 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1989, 20(5), 339-43 (Eng). The Raman spectral bandshapes of the  $\nu_1(A_1)$ ,  $\nu_3(A_1)$  and  $\nu_4(E)$  vibrations of MeI were studied as a function of temp. in the liq. phase. Perpendicular diffusion coeffs. calcd. from  $\nu_3$  agreed with earlier reported results. The degenerate Mo stretching vibration,  $\nu_4$ , was analyzed via fitting by a model incorporating 2 Lorentzian lineshapes. Values of the parallel diffusion consts.,  $D_1$ , detd. using only the narrower component were in semi-quant. agreement with those predicted by the free rotor model of mol. reorientation. Anal. of the room-temp. Raman spectrum of  $\nu_5(E)$  yielded the same value of  $D_1$  as that calcd. from  $\nu_4$ . The room-temp. IR spectral intensities of  $\nu_5$  were fitted by a model with a narrow Lorentzian contg. contributions from rotational and vibrational relaxation superposed on a 2nd component introduced to account for the broad background absorption.  $D_1$  Detd. from the IR bandwidth was in agreement with values obtained from the Raman spectra of  $\nu_4$  and  $\nu_5$ . These results demonstrate the utility of analyzing degenerate vibrational modes to det. the parallel diffusion coeffs. in C<sub>3v</sub> mols.

(Di)

C.A. 1989, 111, N 14

СНЗ

1990

23 Б1361. Обертонные полосы  $2\nu_3$   $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  и  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$ .  
Overtone bands  $2\nu_3$  of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  and  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$  / Alanko S.,  
Horneman V.-M., Anttila R., Paso R. // J. Mol. Spectrosc.  
— 1990.— 141, № 1.— С. 149—166.— Англ.

С разрешением  $0,003 \text{ см}^{-1}$  получены ИК-фурье-спектры полосы  $2\nu_3$   $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  и  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$ . Для каждой молекулы отнесено 1100 линий с  $I_{\text{max}}=60$  и  $K_{\text{max}}=12$ . Стандартные отклонения при обработке составляли  $0,11 \times 10^{-3}$  и  $0,13 \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$  соотв. При анализе (использовалась модель невозмущенной параллельной полосы) вращат. постоянная  $B$  фиксировалась и полагалась равной 0. Также наблюдались горячие полосы  $3\nu_3-\nu_3$ . Из анализа этих полос получены значения молек. постоянных, практически совпадающие со значениями, полученными из анализа полос  $2\nu_3$ . Г. В. Чертихин

М. П.

Х. 1990, № 23



12 CH<sub>3</sub>I

1990

13 CH<sub>3</sub>I

М.П., Череп,  
203

112: 242349u Overtone bands  $2\nu_3$  of methyl-<sup>12</sup>C and methyl-<sup>13</sup>C iodide. Alanko, S.; Horneman, V. M.; Anttila, R.; Paso, R. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 141(1), 149-66 (Eng). The IR bands  $2\nu_3$  of <sup>12</sup>CH<sub>3</sub>I and <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>I were investigated at a resolu. of  $\sim 0.003$  cm<sup>-1</sup>. Both the bands, one at 1059.9934 and the other at 1028.1201 cm<sup>-1</sup>, resp., are similar, and they have a special feature, a bandhead, in the *R* branch. In both the bands  $\sim 1100$  lines with  $J_{\max} \approx 60$  and  $K_{\max} = 12$  were assigned. In the analyses the model for an unperturbed parallel band was used. In the fits the *H* consts. fixed to ground state values were included. Std. deviations of  $0.11 \times 10^{-3}$  and  $0.13 \times 10^{-3}$  cm<sup>-1</sup>, resp., were attained. Mol. consts. related to the bands are given. The hot bands  $3\nu_3 - \nu_3$  were studied, and the results are similar to these from the corresponding  $2\nu_3$  bands. The assignments of some optically pumped far-IR laser lines are discussed.

C.A. 1990, 112, N 26

CH<sub>3</sub>I

1990

12 Б1393. Исследование метилиодида методом ИК-фурье-спектроскопии с высоким разрешением. High resolution FTIR measurements on methyl iodide: [Pap.] Finn. Chem. Congr., Helsinki, 30 Oct. — 1 Nov., 1990 / Alanko S., Anttila R., Horneman V.-M., Koivusaari M., Paso R. // Kemia-Kemi.— 1990.— 17, № 10B.— С. 953. — Англ.

Изучены ИК-спектры поглощения (область 600—3500 см<sup>-1</sup>) газ. (давл. ~100 Па) CH<sub>3</sub>I (I). Исследования проводили в кювете с длиной оптич. пути ~20 м, спектры регистрировали на ИК-фурье-спектрометре IFS 120 фирмы Брукер с разрешением ~0,002 см<sup>-1</sup>. Проведен анализ колебательно-вращат. полос. В спектрах выделены линии, относящиеся к переходам <sup>13</sup>CH<sub>2</sub>I. Резонансное вз-вие различных переходов приводило к нарушению правил отбора и появлению в спектрах запрещенных по правилам отбора полос. Оценены молек. постоянные I.

А. В. Бобров

М.П.

X. 1991, № 12

МЗ

011 35064

1990

14 Б1368. Постоянные  $A_0$  и  $D_0^K$  в основном состоянии  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  из переходов разрешенных за счет возмущения. Ground-state constants  $A_0$  and  $D_0^K$  of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  from perturbation-allowed transitions / Anttila R., Horgeman V.-M., Alanko S. // Mol. Phys.— 1990.— 70, № 6.— С. 991—1000.— Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в области частот 1300—1520  $\text{см}^{-1}$  с разрешением 0,0017  $\text{см}^{-1}$  измерен спектр диады полос  $\nu_5/\nu_3+\nu_6$   $^{12}\text{CH}_3\text{I}$ . В ИК-спектре идентифицировано свыше 200 переходов разрешенных за счет возмущений между высокими уровнями полос  $\nu_5$  и  $\nu_3+\nu_6$ , связанными через резонанс Ферми и  $l(2, -1)$ -резонанс. Используя разрешенные за счет возмущений ИК-переходы, определены спектроскопич. постоянные в основном колебат. состоянии, к-рые не м. б. определены обычными способами для молекул типа симм. волчка. Обсуждена возможность определения секстичной постоянной центробежного искажения  $H_0^K$  для  $\text{CH}_3\text{I}$ .  
С. Н. Мурзин

М.А.

х. 1991, № 14

CH<sub>3</sub> I

(Om 35064)

1990

113: 200410x Ground-state constants  $A_0$  and  $D_0^K$  of iodomethane from perturbation-allowed transitions. Anttila, R.; Horneman, V. M.; Alanko, S. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *Mol. Phys.* 1990, 70(6), 991-1000 (Eng). The upper levels of the bands  $\nu_3$  and  $\nu_3 + \nu_6$  of CH<sub>3</sub>I are coupled through a Fermi and an l(2, -1) resonance. This gives rise to perturbation-allowed transitions. Altogether, more than 200 such lines corresponding to 3 different K-value pairs were obsd. between 1320 cm<sup>-1</sup> and 1520 cm<sup>-1</sup>. By fixing the sextic const.  $H_0^K$  equal to zero, the following values were obtained:  $A_0 = 5.173931(2)$  cm<sup>-1</sup> and  $D_0^K = 87.36(6) \times 10^{-6}$  cm<sup>-1</sup>. The possible values of  $H_0^K$  and their effects on the results are discussed.

M.A. b

ACKNOWLEDGE

CD MO 11111

C.A. 1990, 113, N 22

CH<sub>3</sub>I

1990

714-71432 Ground state constants  $A_0$  and  $D_0K$  of iodomethane-<sup>13</sup>C from perturbation-allowed transitions. Anttila, R.; Alanko, S.; Horneman, V. M.; Kolehmainen, M. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *Mol. Phys.* 1990, 71(6), 1433-6 (Eng). The IR spectrum of <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>I in the region of the  $\nu_5$  band, 1300-1600 cm<sup>-1</sup>, was measured at a resolu. of 0.0025 cm<sup>-1</sup> with a Fourier transform spectrometer. In the diad  $\nu_5/\nu_3 + \nu_6$  about 130 perturbation-allowed transitions were obsd. They give 2 equations between  $A_0$  and  $D_0K$ , and from them  $A_0 = 5.174258(4)$  cm<sup>-1</sup> and  $D_0K = 87.56(7) \times 10^{-6}$  cm<sup>-1</sup> derived by fixing  $H_0K = 0$ .

M. N.

C. A. 1991, 114, N 8

CH<sub>3</sub>I

OM 35139

1990

№14 Б1380. Измерение электрического дипольного момента метилиодида. Measurement of the electric dipole moment of methyl iodide / Carocci S., Di Lieto A., Minguzzi P., Tonelli M. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 144, № 2.— С. 429—442.— Англ.

На миллиметровом штарковском спектрометре, вблизи 75 ГГц измерен эффект Штарка для сверхтонких компонент вращат. перехода  $J=5-4$  метилиодида,  $\text{CH}_3\text{I}$ . Анализ полученных данных выполнен с учетом полного вращения, центробежного искажения, квадрупольного вз-вия, спин-вращательного вз-вия и эффекта Штарка. На основе 772 эксперим. данных определены электр. дипольный момент, параллельный оси молекулы,  $\mu_0 = 1,6413(5)$  Д и дипольный момент, связанный с квадрупольным вз-вием,  $\mu_Q = 2,65(5) \cdot 10^{-3}$  Д. Др. эффекты, такие как центробежное искажение, дают заметно более слабый вклад в полный дипольный момент. Полученные ММ-результаты подтверждают наличие заметной корреляц. связи между электр. дипольным моментом и ядерным квадрупольным взаимодействием.

С. Н. Мурзин

М. А.

Х. 1991, № 14

CH<sub>3</sub>I [Am 34919]

1990

Döge G., Lindner D., et al.

<sub>2</sub> Chem. Phys. Lett., 1990,  
172, N 6, 453 - 457.

The effect ● of resonant

vibrational coupling on the  
frequency of the  $\nu_2$  mode  
of liquid methyl iodide  
in Raman scattering and  
infrared absorption.



CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup>

1990

17 B1234. Электронно-возбужденные состояния иона CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup>. Electronically excited states of the CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup> ion / Griffiths W. J., Harris F. M., Parry D. E. // J. Chem. Soc. Faraday trans.— 1990.— 86, № 16.— С. 2801—2804.— Англ.

Методом спектроскопии двойного переноса заряда исследовано образование иона CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup> в основном и нижних возбужденных электронных состояниях. Ионы получали при столкновениях нейтр. молекул CH<sub>3</sub>I с однозарядными ионами OH<sup>+</sup> или F<sup>+</sup> (A<sup>+</sup>), A<sup>++</sup> + CH<sub>3</sub>I → A<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup>, при низких давлениях метилиодида, что позволило исключить из рассмотрения двухступенчатый канал взаимодействия, A<sup>++</sup> + CH<sub>3</sub>I → A<sup>+</sup> + CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>, A<sup>+</sup> + CH<sub>3</sub>I → A<sup>-</sup> + CH<sub>3</sub>I<sup>+</sup>. Использовали два вида спектрометров. В одном измерялся спектр поступат. энергии образующихся ионов A<sup>-</sup>, в другом — варьировалась поступат. энергия исходных ионов A<sup>+</sup> до столкновений при постоянстве поступат. энергии регистрируемых

X. 1991, N 17

ионов  $A^-$ . Результаты полученные на обоих спектрометрах согласуются между собой. Для калибровки по энергии использовались атомы аргона и ксенона с известными энергиями ионизации. Установлено существование четырех низколежащих возбужденных состояний  $CH_3I^{2+}$  с энергией двукратной ионизации  $27,0 \pm 0,3$ ,  $29,6 \pm 0,3$ ,  $31,3 \pm 0,5$  и  $36,5 \pm 0,5$  эВ. Результаты, кроме второго состояния, к-рое наблюдалось впервые, хорошо согласуются с данными полученными методом фотоион-фотоионных совпадений для р-ции  $CH_3I + h\nu \rightarrow CH_3I^{2+} \rightarrow CH_3^+ + I^+$ . Величины энергий двукратной ионизации рассчитаны также теоретически в рамках однократного Хартри-фоковского приближения для многоэлектронной волновой ф-ции с поправками на корреляц. эффекты по теории возмущений Меллера—Плессета второго порядка.

В. М. Ковба



CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup>

1990

113: 198324b Electronically excited states of the iodomethane (2+) ion. Griffiths, William J.; Harris, Frank M.; Parry, David E. (Mass Spectrom. Res. Unit, Univ. Coll. Swansea, Swansea, UK SA2 8PP). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1990, 86(16), 2801-4 (Eng). A double-charge-transfer spectroscopy study has provided evidence for the existence of four low-lying electronic states of the CH<sub>3</sub>I<sup>2+</sup> ion, the double-ionization energies to which are  $27.0 \pm 0.3$ ,  $29.6 \pm 0.3$ ,  $31.3 \pm 0.5$  and  $36.5 \pm 0.5$  eV. Three of these energies agree, within exptl. error, with those detd. previously in a dissociative double photoionization study of CH<sub>3</sub>I. The present investigation reveals for the first time the state at 29.6 eV. The value of the double-ionization energy to the ground triplet state, calcd. in the present investigation using the single-determinant Hartree-Fock approxn. to the many-electron wavefunction with correction of second-order Moller-Plesset perturbation theory for correlation effects, is 25.80 eV, somewhat lower than the measured value of 27.0 eV.

Куконен  
Сосноцкий

C.A. 1990, 113, N 22

1990

№ 20 Б4009. Термическое разложение  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{CD}_3\text{I}$ . Экспериментальное и теоретическое приближение к определению констант скорости при высоких давлениях. Thermal decompositions of  $\text{CH}_3\text{I}$  and  $\text{CD}_3\text{I}$ . Experimental and theoretical approaches to the specific rates at the high pressure limit / Kodama Sukeva, Ooi Yasuhiro // Bull. Chem. Soc. Jap.— 1990.— 63, № 3.— С. 877—885.— Англ.

На статической вакуумной установке с кварцевым реакционным сосудом определены кинетич. закономерности газофазного термич. разл. молекул  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{CD}_3\text{I}$  (606,8—649,5 К, давл. до 25 кПа). По начальным скоростям термоллиза и их зависимости от давл. определены значения  $k^\infty_{\text{разл}}(\text{CH}_3\text{I})$ , изменяющиеся от  $2,92 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$  (606,8 К) до  $68,2 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$  (649,5 К). Величина отношения констант  $k^\infty_{\text{разл}}(\text{CD}_3\text{I})/k^\infty_{\text{разл}}(\text{CH}_3\text{I})$  составляет 0,290 (620,2 К) и 0,279 (649,5 К). Сопоставление эксперим. данных с результатами теорет. рас-

$D_0(\text{CH}_3-\text{I})$

X. 1990, № 20

четов на основе ранее предложенного авторами варианта теории мономолек. разл. в газ. фазе в условиях предела при высоких давл. позволяет предложить уточненные значения термодим. величин, соотв-щих разрыву связи  $\text{CH}_3\text{—I}$ :  $D_0=243,7$  кДж/моль,  $\Delta E_0=230,6$  кДж/моль и  $\Delta H^\circ_{298}=236,3$  кДж/моль. Отмечено, что при термоллизе эквимольной смеси  $\text{CH}_3\text{I}+\text{CD}_3\text{I}$  соотношение начальных скоростей накопления продуктов  $(\text{CH}_4+\text{CH}_3\text{D})/(\text{CD}_4+\text{CD}_3\text{H})$  составляет 1,94 (т-ра 633,5 К, давл. 10,67 кПа); парц. скорости разл.  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{CD}_3\text{I}$  в смеси оказываются ниже, чем при термоллизе чистых компонентов в аналогичных условиях. А. Б. Мазалецкий

CH<sub>3</sub>I

Om 34540

1990

112: 206995t Parallel vibrational states of iodomethane in the high resolution infrared spectrum from 2770 to 2900 cm<sup>-1</sup>. Lattanzi, F. (Dip. Chim. Farm. Tossicol., Univ. Napoli, I-80131 Naples, Italy). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(7), 4380-2 (Eng). The anal. of the high resolu. IR spectrum of CH<sub>3</sub>I between 2770 and 2900 cm<sup>-1</sup>, where only parallel transitions are obsd., allowed the identification of the complex branch origin patterns of the interacting parallel system  $2\nu_5^0$ ,  $\nu_3 + \nu_3^{\pm 1} + \nu_6^{\pm 1}$ ,  $2\nu_3 + 2\nu_6^0$ . The values of vibrational frequencies, vibration-rotation parameters affecting the *K* structures, and interaction parameters were estd. by a least squares fit of the obsd. transition wave nos.

C.A. 1990, 112, N 22

CH<sub>3</sub>I

1990

113: 220651h Spectral shift of autoionizing high- $n$  Rydberg states of iodomethane in dense argon: a photoionization study. Meyer, J.; Reininger, R.; Asaf, U. (HASYLAB, DESY, D-2000, Hamburg, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 173(4), 384-6 (Eng). Photoionization spectra of pure CH<sub>3</sub>I and of CH<sub>3</sub>I doped into varying densities of Ar (up to  $10.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ) are reported. The photoionization spectrum of pure CH<sub>3</sub>I closely reproduces the absorption spectrum of the autoionizing  $nd'$  and  $ns'$  Rydberg states converging to the  $^2E_{1/2}$  ionization limit. Moreover, it displays the members of the  $nd'$  series terminating on the  $\nu' = 1$  vibrational level of the same limit. The Rydberg states shift to lower energies with increasing argon d. The shift rate for principal quantum nos.  $n \geq 10$  is in good agreement with the values obtained from absorption studies.

y.

C. A. 1990, 113, N24

CH<sub>3</sub>I

OM 33581

1990

19 B1240. Возмущения в полосе  $\nu_1$  CH<sub>3</sub>I. Perturbations in the  $\nu_1$  band of CH<sub>3</sub>I / Paso R., Anttila R., Guelachvili G. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 140, № 1. — С. 46—53.— Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в области частот 2930—3010 см<sup>-1</sup> с разрешением 0,0054 см<sup>-1</sup> измерен колебательно-вращат. спектр полосы  $\nu_1$  CH<sub>3</sub>I в газ. фазе. Анализ полосы  $\nu_1$  выполнен с учетом кваттичного и секстичного центробежного искажения, кориолисова взаимодействия  $\nu_1/\nu_4$  и  $\nu_1/\nu_2+2\nu_6^{\pm 2}$  и резонанса Ферми  $\nu_1/(2\nu_2+\nu_3)$ . Определены частоты полос  $\nu_1$ ,  $\nu_2+2\nu_6^{\pm 2}$  и  $2\nu_2+\nu_3$ , соотв., 2971,8375(1), 3017,819(2) и 3009,5 см<sup>-1</sup> центробежные постоянные и константы взаимодействия. Из анализа ИК-спектра горячей полосы  $\nu_1+\nu_3-\nu_3$  с центром при 2971,5240(7) см<sup>-1</sup> определены молек. параметры состояний  $\nu_2+\nu_3+2\nu_6^{\pm 2}-\nu_3$  и  $2\nu_2+3\nu_3-\nu_3$  и константы взаимодействий  $\nu_1+\nu_3/\nu_2+\nu_3+2\nu_6^{\pm 2}$  и  $\nu_1+\nu_3/2\nu_2+2\nu_3$ .

С. Н. Мурзин

M.N.

X. 1990, N 19



CH<sub>3</sub>I

Om 33581

1990

$\nu_1$

112: 14813Sc Perturbations in the  $\nu_1$  band of methyl iodide. Paso, R.; Anttila, R.; Guelachvili, G. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 140(1), 46-53 (Eng). The FTIR spectrum of MeI recorded at a resolu. of 0.0054  $\text{cm}^{-1}$  in the region of the  $\nu_1$  band (2930-3010  $\text{cm}^{-1}$ ) was analyzed. About 1600 *P* and *R* transitions were assigned for  $K = 0-13$ . A Fermi interaction and 2 Coriolis interactions were taken into account in the anal. The stronger Coriolis resonance, having a crossing in  $J$  in the subband  $K = 4$  in  $\nu_1$ , is caused by  $\nu_2 + 2\nu_6 \pm 2$ . The other Coriolis resonance, with a matrix element of  $\sim 0.001 \text{ cm}^{-1}$ , has a crossing in  $K$  at  $K = 10-11$  in  $\nu_1$ . It was attributed to  $\nu_4$ . The Fermi interaction, caused probably by  $2\nu_2 + \nu_3$ , shifts the band origin of the  $\nu_1$  band 0.6  $\text{cm}^{-1}$  upward. The hot band  $\nu_1 + \nu_3 - \nu_3$  was studied.

C.A. 1990, 112, N16

CH<sub>3</sub>I

(OM 35384)

1960

$\tilde{B}$  Rydberg. Syage J.A., Steadman J.  
1960. Strong Field Effects  
in the Spectroscopy of  
the  $\tilde{B}$  Rydberg State  
of CH<sub>3</sub>I. ●  
(na os.)

all.

The J. ~~of~~ Physical  
Chemistry. 1960, 94, 1125,  
8858.

CH<sub>3</sub>I

Am. 34122

1990

Wang P. G., Zhang Y. P.,  
et al.,

J. Chem. Phys., 1990, 92,  
N5, 2806 - 2817

The spontaneous • us resonance

Raman scattering of  $\text{CH}_3\text{Y}$   
in a supersonic jet.

$^{13}\text{CH}_3\text{I}$

1991

114: 256038v The  $\nu_6$  band of methyl- $^{13}\text{C}$  iodide. Alanko, Seppo (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1991, 147(2), 406-13 (Eng). The IR spectrum of the perpendicular fundamental band  $\nu_6$  of  $^{13}\text{CH}_3\text{I}$  in the region 765-1035  $\text{cm}^{-1}$  was studied at a resolu. of 0.0021  $\text{cm}^{-1}$ . More than 3300 transitions were assigned for subbands from  $K\Delta K = -15$  to  $+17$ , including  $J$  values up to 75. The ground state consts. were derived using 2943 ground state combination differences from  $\nu_6$  and  $2\nu_3$  bands together with 90 rotational transitions from the literature. In the anal. of the  $\nu_6 = 1$  state the Coriolis resonance with the  $\nu_3 = 2$  state was taken into account. The mol. consts. concerning the fundamental  $\nu_6$ , as well as the parameters describing the Coriolis and  $l(2, 2)$  resonances, were derived. The assignments of optically pumped far-IR laser lines are also discussed.

$\nu_6$ , m.n.

C.A. 1991, 114, N26

CH<sub>3</sub>I

1991

21 Б1148. Квантовые неадиабатические эффекты при фотодиссоциации колебательно-возбужденных молекул CH<sub>3</sub>I. Quantum nonadiabatic effects in the photodissociation of vibrationally excited CH<sub>3</sub>I / Guo Hua Lao Kai Qin, Schatz George C., Hammerich Audrey Del // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 10.— С. 6562—6568 — Англ.

В рамках нестационарной квантовой механики в комбинации с быстрым преобразованием Фурье изучена фотодиссоциация колебательно-возбужденных молекул CH<sub>3</sub>I (I), приводящая к образованию атомов I в основном и возбужденном (I\*) состояниях. При рассмотрении динамики диссоциации приняты во внимание две координаты: расстояние C—I и угол, характеризующий «зонтичное» симм. колебание фрагмента CH<sub>3</sub>. Вычислен выход I\* как ф-ция полной энергии и распределение энергии по зонтичным колебат. состояниям CH<sub>3</sub>. Показано, что колебат. распределение фрагмента CH<sub>3</sub> и выход I\* существенно зависят от его исходного колебат. состояния; растяжение связи C—I в этом отношении малосущественно. Выход I\* для колебательно возбужденной молекулы I обычно ниже, чем при диссоциации основного состояния I. Э. Д. Герман

М.Л.

X. 1991, № 21

СН<sub>3</sub>I

1991

8 Д95. Квантовые расчеты спектра поляризованного излучения метилйодида. Важность интерференционных эффектов. Quantum calculations of the polarized emission spectrum of methyl iodide: The importance of interference effects / Wedlock Michael R., Freed Karl F. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 10.— С. 7275—7285.— Англ.

Представлены подробные квантовые расчеты спектра поляризованного излучения (СПИ) СН<sub>3</sub>I (I) после возбуждения при 266 нм. Молекула I имеет два диполя и взаимно связанные отталкивательные электронные поверхности при этой энергии возбуждения. Поэтому ожидается большой вклад интерференционных эффектов в СПИ с угловым разрешением. С использованием одномерной модели и нестационарных квантовых расчетов показано, что эти интерференционные вклады суще-

М.П.

ственно влияют на СПИ, в частности, они обуславливают наличие зависимости СПИ от конечного состояния.

Ф. 1992, № 8



CH<sub>3</sub>I

1992

9Б1130. Константы  $A_0$ ,  $D_0^K$  и  $H_0^K$  основного состояния  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  из разрешенных инфракрасных полос поглощения. Ground-state constants  $A_0$ ,  $D_0^K$  and  $H_0^K$  of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  from normally allowed infrared absorption bands /Páso R., Alanko S., Anttila R. //Mol. Phys. —1992. —76, № 5. —С. 1157—1167. —Англ.

С высоким разрешением ( $0,002\text{ см}^{-1}$ , фурье-спектрометр) измерена вращат. структура фундаментальной пары  $\nu_6$ , горячей полосы  $2\nu_6^{2+} - \nu_6^{1+}$  и обертона  $2\nu_6^{2+}$  в ИК-спектре поглощения  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  (длина поглощающего слоя 3,2—19,2 м, давл. 0,4—2,4 мм рт. ст.). На основании анализа положения линий всех трех полос рассчитаны комбинац. разности для восьми пар значений ( $K_u$ ,  $K_o$ ) от (3,0) до (10,7) ( $K_u$  и  $K_o$  — значения  $K$  для верхнего и нижнего  $l$  комбинирующих уровней энергии основного состояния). Широкий диапазон значений  $K$  позволил более точно определить значение  $(A_0 - B_0)$  и найти параметры  $K$ -зависимости постоянных центробежного искажения:

М.Л.

Х. 1993, № 9

$A_0 - B_0 = 4,9237202$ ,  $D_0^k = 8,763 \cdot 10^{-5}$ ,  $H_0^k = 4,53 \cdot 10^{-9}$   
 $\text{см}^{-1}$ . По известному значению вращат. постоянной  $B_0 =$   
 $= 0,250215626 \text{ см}^{-1}$  рассчитана величина  $A_0 = 5,1739358$   
 $\text{см}^{-1}$ . При анализе комбинац. разностей использовались  
 значения вращат. постоянных и параметров центробеж-  
 ного искажения ( $B_0$ ,  $D_0^{jk}$ ,  $D_0^j$ ,  $H_0^j$ ,  $H_0^{jjk}$  и  $H_0^{jkk}$ ), полученные  
 авторами ранее из анализа ИК-спектра высокого разре-  
 шения (//Mol. Phys. — 1990 .— 70 .— С. 991) и данных  
 совместного анализа ИК- и МВ-спектров молекулы (//J.  
 Mol. Spectrosc. — 1987 .— 124 .— С. 53). В. М. Ковба



CH<sub>3</sub>I

1992

117: 180747q Ground-state constants  $A_0$ ,  $D_0K$ , and  $H_0K$  of iodomethane ( $^{12}\text{CH}_3\text{I}$ ) from normally allowed infrared absorption bands. Paso, R.; Alanko, S.; Anttila, R. (Dep. Phys., Univ. Oulu Linnanmaa, SF-90570 Oulu, Finland). *Mol. Phys.* 1992, 76(5), 1157-67 (Eng). The fundamental band  $\nu_6$ , its hot band  $2\nu_6 - \nu_6$  and the overtone band  $2\nu_6$  of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  were assigned. Using the lines of these three bands, ground state combination differences that differ in  $K$  by three were calcd. for eight  $K$  value pairs from (3,0) to (10,7). The ground state consts.  $A_0$ ,  $D_0K$  and  $H_0K$  of  $^{12}\text{CH}_3\text{I}$  were then detd. and the results are  $A_0 = 5.1739358(10) \text{ cm}^{-1}$ ,  $D_0K = 87.63(3) 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$  and  $H_0K = 4.53(22) 10^{-9} \text{ cm}^{-1}$ . The const.  $H_0K$  was detd. for the first time.

frayam.  
no cmolr.

C.A. 1992, 117, N 18

CH<sub>3</sub>F

1992

Schneider W, Thiel W.,

Calc. rocm.,  
chemp.  
rocmoet.,  
ab initio  
param

Chem. Phys. 1992, 159(1),  
49-66.

(Calc.



CH<sub>3</sub>F; III)