

S₂

S₄

(Vi)

XII - 1133

1972

11 Б178. Спектры инфракрасного поглощения S₄ (Meyer•B., Stroyer—Hansen T. Infrared spectra of S₄. «J. Phys. Chem.», 1972, 76, № 26, 3968—3969 (англ.)

Измерены спектры ИК- и УФ-поглощения S₂, изолированной в матрицах инертных газов при M/A от 100 до 500 при 20° K. Обнаруженная в УФ-спектре полоса 530 мкм, и полосы поглощения 668, 483, 320 и 270 см⁻¹ в ИК-спектре свидетельствуют о наличии молекул S₄.
Г. Кузьянц

x. 1973 N 11



S₂

BP X11-1122

1972:

145897x Resonance fluorescence and Raman spectra of gaseous sulfur. Yee, K. K.; Barrow, R. F.; Rogstad, Astri (Phys. Chem. Lab., Oxf. Univ., Oxford, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1972, 68(Pt. 10), 1808-11 (Eng). The Raman spectrum of gaseous S₂ was obsd. at 880°K and pressure ≤ 100 torr, and the band at 718 cm⁻¹ was assigned to the fundamental mode of vibration of S₂. A resonance fluorescence series of ³²S₂-(g) excited by the 5145-Å Ar⁺ laser line was analyzed in detail; the excitation was in the 4-21 band of the B³Σ_u⁻-X³Σ_g⁻ system. Franck-Condon factors were calcd. from Rydberg-Klein-Rees potential curves and confirmed exptl. by the obsd. relative intensities in the fluorescence.

M.N

C.A. 1972. 77. N22.

ВР-ХII-1122

1972.

S₂

8 Б171. Спектры резонансной флуоресценции и комбинационного рассеяния газообразной серы. Yee K. K.,

Barrow R. F., Rogstad A. S. Resonance fluorescence and raman spectra of gaseous sulphur. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1972, Part II, №10, 1808—1811 (англ.)

Получены спектры КР и резонансной флуоресценции газ. серы при т-рах 670—1170° К и давл. до 1—2 атм. Спектры возбуждали линией $\lambda = 5145$ А Аг-лазера, в спектрах выполнены поляризац. измерения. Сильно поляризованная линия ($\Delta\nu = 718$ см⁻¹, проявляющаяся при т-ре 880° К и давл. ~100 мм, приписана спектру КР S₂ (основное кол. S₂), при матричной изоляции S₂ $\Delta\nu = 716$ см⁻¹, результаты исследования электронных

спектр

ϵ_i, ν_i

х. 1973. № 8.

спектров дают значение $\sim 720 \text{ см}^{-1}$. Деполяризованные линии отнесены к спектру резонансной флуоресценции, проявляется только полоса 4—21 перехода $B^3\Sigma^-_u - X^3\Sigma^-_g$. Приведена схема энергетич. уровней и рассчитаны параметры Франка — Кондона для различных переходов. Теор. рассчитанные значения параметров хорошо согласуются с распределением интенсивностей в спектре резонансной флуоресценции.

А. Бобров

S₂

Zuev, V. S.; et al

1972

"Piz'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz"

91. nepex.

1972, 16 (4), 222-4.

● (см. COS; III)

3053I.7544

Ch.ETE

S₂

29547

~~X~~

1973

Boachi R., Schmidt W. The photoelectron spectrum and structure of sulfur in the gas phase at 140°C. "Inorg. and Nucl. Chem. Lett.", 1973, 9, N6, 643-648

(англ.)

869 87I'878

0885 мик

ВИНИТИ

BF X11-1189

1973

S₂

151820d Calculation of potential energy curves for diatomic sulfur perturbed by a frozen inert gas matrix environment. Brabson, G. D.; Volkmar, R. L. (Frank J. Seiler Res. Lab., U.S. Air Force Acad., Colorado Springs, Colo.). *J. Chem. Phys.* 1973, 58(8), 3209-15 (Eng). When S₂ is trapped in a frozen inert gas matrix, both the equil. internuclear distance r_e and the vibrational parameter ω_e are perturbed by the matrix environment. If it is assumed that the Morse potential adequately represents the lowest part of the potential energy curve, the perturbation of r_e can be related to the perturbation of ω_e as follows: $\Delta r_e = -\text{const. } \Delta \omega_e$. The validity of this result is demonstrated by the

fact that, if exptl. values of $\Delta \omega_e$ are used to calc. predicted values of Δr_e , these predicted values are in excellent agreement with the exptl. results.

op.-yus
nomenu
Shep.

187-51-4

C.A. 1973. 78 N24

ВФ-Х11-1189

1973

10 Д125. Расчеты возмущенных кривых потенциальной энергии молекулы S_2 в матрицах из замороженных инертных газов. ~~Brabson~~ G. D., Volkmar R. L. Calculation of potential energy curves for S_2 perturbed by a frozen inert gas matrix environment. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 8, 3209—3215 (англ.)

Рассмотрено изменение потенциальной кривой двухатомной молекулы, вызванное взаимодействием ее с окружающей средой в матрице. Предполагая, что потенциальные кривые свободной двухатомной молекулы и молекулы в матрице можно аппроксимировать потенциалом Морзе, авторы получили соотношение между изменением равновесного межъядерного расстояния Δr_e обусловленного матричным окружением, и анало-

и.н.

25-781

Ф: 1973 N 10

гичным изменением значения колебательной постоянной $\Delta\omega_e$, вида $\Delta r_e = \text{const} \cdot \Delta\omega_e$. Справедливость полученного соотношения демонстрируется расчетом Δr_e по эксперим. значениям $\Delta\omega_e$ для молекулы S_2 (состояния $X^3\Sigma_g^-$ и $B^3\Sigma_u^-$) в матрицах из ксенона, криптона, аргона, неона и азота. Полученные равновесные значения межъядерного расстояния S_2 в матрицах использованы для расчета потенциальных кривых и последующего расчета распределения интенсивностей флуоресцентных переходов. Предсказанные интенсивности сравниваются с экспериментом.

А. И. Дементьев

* 43-781

1973

20 Б109. Вычисление кривых потенциальной энергии молекул S_2 , возмущенных окружением в матрицах инертных газов. Grabson G. D., Volkmar R. L. Calculation of potential energy curves for S_2 perturbed by a frozen inert gas matrix environment. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 8, 3209—3215 (англ.)

Экспериментально установлено, что в спектре флуоресценции молекул S_2 в газовой фазе полосы (0,8) и (0,9) прогрессии (0, v'') электронного перехода $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^+$ наиболее интенсивны, а в спектре флуоресценции молекул S_2 , изолированных в матрице Kr, наиболее интенсивны полосы (0,6) и (0,7) (аналогичные эффекты найдены и для других матриц). Предложена полуэмпирич. модель для интерпретации этого эффекта, основанная на выборе кривых потенц. энергии основного и возбужденного электронных состояний в виде функции Морзе или Ридберга—Клейна—Риса с различными значениями рав-

 $\nu_{i, \text{min.}}$

X11-1189

X. 1973. № 20

новесного межъядерного расстояния r_e и частоты колебания ω_e в газовой фазе и в матричной изоляции. По этой модели вычислены положения и интенсивности полос $(0, v'')$ молекулы S_2 в матрицах Хе, Кг, Аг, Не и N_2 . Для S_2 в матрицах Хе, Кг, Аг и N_2 при использовании потенциалов РКР получено удовлетворительное согласие с экспериментом.

М. Р. Алнев

S₂

номер 1580

1973

неправ
есть.

Kulkarni K.S., Sarma C.R.

Semiempirical methods in molecules.

"J.Phys. B; Atom. and Mol.Phys.",

1973, 6, NII, 2377-2381.

40222.1940

Ph, TE, Ch

S₂

34469

1973

N 1992

~~инт. клас~~
Kulkarni K. S., Sarma C. R., Murthy J. S.

Semi-empirical evaluation of single bond
energies of some polyatomic molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1973,
11, N 6, 431-432. (англ.)

0050 НЕМ

038 038

0043

ВИНИТИ

S₂

Ommick 8883
Le Roy R. J.

1973

Frequency Mod. Spectrosc. Vol 1
London, 1973, 113-176
Energy levels of a diatomic
near dissociation

(all 2nd at; M. R.)

1973

S₂

8 Б152. Интенсивности вращательных сателлитов и триплетное расщепление в состоянии $B^3\Sigma_u^-$ молекулы S_2 . Meyer Keith A., Crosley David R. Rotational satellite intensities and triplet splitting in the $B^3\Sigma_u^-$ state of S_2 . «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 20, 2119—2124 (англ.; рез. франц.)

Интенс.
сателлитн
линий

М.Н.

Измерены интенсивности сателлитных линий с $\Delta N \neq \Delta J$ (ветви $^PR_{13}$, $^NP_{13}$, $^RP_{31}$ и $^TR_{31}$) вращательной структуры полос флуоресценции из колебательных уровней с $v' = 3$ и 4 возбужденного электронного состояния $B^3\Sigma_u^-$ в колебательные уровни с $v'' \leq 22$ основного состояния $X^3\Sigma_g^-$ молекулы S_2 при селективном возбуждении состояний с $v' = 3$ и 4 S_2 линиями Zn 3076А и Cd 3261А соответственно. Результаты измерений согласуются с результатами расчета для случая, промежуточного между случаями (а) и (b) Гунда, при учете обращения триплета. Показано, что постоянная λ' спин-спиновой взаимодей-

У 2743
X11-1280
*

Х. 1974 № 8

ствия состояния $B^3\Sigma_u^-$ — меняет знак при переходе от уровня с $v'=3$ к уровню с $v'=4$ ($\lambda_3^1 \simeq 9,5$ см $^{-1}$, $\lambda_4^1 \simeq -4,7$ см $^{-1}$). Этот результат вместе с лит. данными по др. полосам показывает, что для уровней с $v=0, 2; 4, 6$ и 7 $\lambda' < 0$, (обращенный триплет), а для уровней с $v'=1, 3$ и 5 $\lambda' > 0$ (регулярный триплет): зависимость λ' от J регулярная. Для основного состояния $X^3\Sigma_g^-$ получена регулярная зависимость λ'' , вращательной постоянной B'' и постоянной спин-вращательного взаимодействия γ'' от v'' .

М. Р. Алиев

XII-1280

1973

4 Д816.

Интенсивности вращательных спутников и триплетное расщепление в состоянии $B^3\Sigma_u^-$ молекулы S_2 . Meyer Keith A., Crosley David R. Rotational satellite intensities and triplet splitting in the $B^3\Sigma_u^-$ state of S_2 . «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 20, 2119—2124 (англ.; рез. франц.)

Измерена интенсивность ветви спутников ($\Delta N \neq \Delta J$) линий флуоресценции молекулярной серы при селективном возбуждении колебательных уровней $v'=4$ и $v'=3$ ее электронного состояния $B^3\Sigma_u^-$ -линиями цинка 3076 Å и кадмия 3261 Å. Из сравнения полученных результатов с вычисленными силами линий сделан вывод, что эти два колебательных уровня различаются по величине и знаку параметра спин-спиновой связи. Проведен анализ спектральных данных для других колебательных уровней.

П. Ш.

* 3-2743

ф. 1974 № 4



1973

*4-2743

XII-1280

S₂
(B-X)

M. h.

32152u Rotational satellite intensities and triplet splitting in the $B^1\Sigma_u^-$ state of diatomic sulfur. Meyer, Keith A.; Crosley, David R. (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, Wis.). *Can. J. Phys.* 1973, 51(20), 2119-24 (Eng). Measurements were made on the intensities of rotational satellites ($\Delta N \neq \Delta J$) in selectively excited fluorescence in the $B-X$ system of S_2 . The satellites appear in fluorescence emitted by the $r' = 4$ level but are absent in $r' = 3$ emission. Comparison of the results with line strengths calcd. according to the formulation of Tatum and Watson shows that these 2 adjacent vibrational levels differ in the magnitude and sign of the triplet splitting const. A re-exam. of previous spectral analyses of the $B-X$ system confirms this variation in coupling among B -state vibrational levels.

C. A. 1974. 80 N 6

1973

S₂фактор
Ф-К.

8699g. Franck-Condon factors from selectively excited resonance fluorescence in the B-X system of diatomic sulfur. Meyer, Keith A.; Crosley, David R. (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, Wis.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(6), 3153-61 (Eng). Franck-Condon factors, for transitions connecting the $v' = 3$ and $v' = 4$ vibrational levels of the $B^3\Sigma_u^-$ state of S₂ to the ground $X^3\Sigma_g^-$ state, were measured by using selective excitation of resonance fluorescence. Observation of all v'' terms for each v' allows detg. the Franck-Condon factors without arbitrary normalization. Comparison of the results with theor. predictions shows disagreement; this is not unexpected due to the extensive perturbations in the B state.

C.A. 1974. 80. N2

40523.8424

TE, Ph

Sa

22024

02

1974

2155

Barrow_R.F., Yee K.K. *номер 3045*
XI-3963

The $^3\Sigma$ - ground states of the group VI-VI
molecules, O_2 , So Te_2 .

"Acta phys. Acad. sci. hung.", 1974, 35, N1-4,
239-246 (англ.)

(см. O_2 ; III)

092 097 110

0118

СЕР

ВИНИТИ

40515.8708
TE, Ch, Ph, MDU

S₂ 40892
(Ae)

1974
2070

XI-4846
Celotta R.J., Bennett R.A., Hall J.L.

Laser photodetachment determination of
the electron affinities of OH, NH₂, NH,
SO₂, and S₂.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 5, 1740-1745

(см. OH; III)

(англ.)

088 091 - 093

0101 ВИНИТИ

S₂

(A.P.)

* 45-8640

1974

Te₂

Se₂

S_n⁺

Te_n⁺

Se_n⁺

164023d Mass spectrometric studies of elemental sulfur, selenium, and tellurium compounds. Grupe, K. H.; Hellwig, K.; Kolditz, L. (Sekt. Chem., Humboldt-Univ. Berlin, Berlin, E. Ger.). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1974, 255(5), 1015-21 (Ger). The mass spectra of S, Se and Te indicate that the tendency to form higher aggregates decreases from S to Te which is due to the variation of the band parameters, such as at. radius, band distance, and electronegativity. The fine structure in the S₁⁺, Se₁⁺, Se₃⁺, and Se₄⁺ appearance curves indicates that those ions arise by fragmentation of neighboring particles. The S₃⁺ and S₄⁺ clusters and S₁⁺ are formed by fragmentation of the S₈ mol. While the Se₁⁺ appearance curve is analogous to that of S₁⁺, the Se₃⁺ and Se₄⁺ appearance curves have a null point and 2 turning points. From the crit. energies for the formation of X₁⁺ ions from X₂, the dissocn. energies (ΔH) for the X-X bonds can be detd.: $\Delta H = \text{appearance energy (X}_1^+) - \text{ionization energy (X}_1\text{)}$.

C.A. 1975, 22 v 24

(+5) X

S₂

1974

Noble Paul N,
Mei Lee.

"J. Chem. Phys." 1974, 61, N2,
541-545 (aural)

D. V. ...
cul. noem.

(cu SCl; III)

1977

S₂In₂OIn₂SDi. cur.
No cm.

49473p. Infrared spectrum of matrix isolated indium(I) sulfide in a nitrogen matrix at 15°K. Spólit, Maurizio; Nunziantes Cesaro, Stella; Rosato, Gianmario (Ist. Chim. Fis. Elettrochim., Univ. Rome, Rome, Italy). *Gazz. Chim. Ital.* 1974, 104(7-8), 879-80 (Eng). The ir spectrum of the vapor above solid In₂S₃ was studied by the matrix isolation technique and contained 5 bands. Two bands were assigned to S₂ and In₂O (formed by hydrolysis on the sample surface). The remaining 3 bands at 315.5, 384.5, and 400.5 cm⁻¹ grow together in the approx. intensity ratio of 100:20:100 and cannot be assigned to any known mol.

species. The band at 315.5 cm⁻¹ is due to a 2nd site matrix effect which disappears on annealing. The frequencies at 384.5 and 400.5 could be assigned to the sym. and antisym. stretching motions of the In₂S mol. with C_{2v} symmetry. The stretching force const. of 2.08 mdyne/Å compares well with that reported for In₂O if the longer bond lengths in In₂S are considered.

C.A. 1975, 82 N8

④2



41202.7293
Ch, Ph, TC, MGU

S₂

30063

02

1974

X4-7374

Tait A.D., Dixon M., Banyard K.E.

Comparative studies of the VCI and SCF
methods of calculating potential
energy curves for O₂ and S₂.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1974, 7,
N 14, 1968-1972 (англ.) (см. O₂; III)

224 230-233

0247 ПИВНИТИ

S₂

4-7094

1974

XII-1466

2np-
-cncip

78631u Gas-phase EPR spectrum of diatomic sulfur molecules. Wayne, F. D.; Davies, P. B.; Thrush, B. A. (Dep. Theor. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *Mol. Phys.* 1974, 28(4), 989-96 (Engl.). Obsd. and calcd. line positions in the X-band EPR of 3S_2 ($^3\Sigma_g^-$) are reported at ~ 9 GHz. A single line due to natural S_2 was detected by signal averaging. Fine structure parameters and g -factors of the $v = 0$ level were detd.

C.A. 1975 82 N12

S₂

ОТРИЦАТЕЛЬНОЕ 12058 1981

1 Д859. Спектры возбуждения флуоресценции, времена жизни и тушение S₂(B³Σ_u⁻) в области 280—315 нм. Fluorescence excitation spectra, lifetimes, and quenching of S₂(B³Σ_u⁻) in the wavelength region 280—315 nm. Quick C. R., Weston Ralph E., Jr. «J. Chem. Phys.», 1981, 74; № 9, 4951—4959 (англ.)

По затуханию флуоресценции паров S₂, возбуждаемых лазерным излучением λ=280÷315 нм с шириной полосы ~0,5 см⁻¹, измерены времена жизни отдельных уровней состояния S₂(B³Σ_u⁻). Времена жизни состояний с v' ≤ 8, возбуждаемых в области начала соответствующих полос, равны 30—45 нс. В исследованной области спектра поглощения обнаружены малоинтенсивные полосы, характеризующиеся значительно большими временами жизни. Уменьшение интенсивности и увеличение времени жизни приписано возмущениям, обусловленным взаимодействием состояний B³Σ_u⁻ и B''³Π_u. Время жизни состояния с v'=9 быстро падает с увеличением энергии возбуждения; в некоторых случаях наблюдает-

спектр;

ф. 1982, 18, 11

ся двухэкспоненц. затухание. Хотя состояние $v'=10$ сильно предиссоциировано, удалось зарегистрировать слабую флуоресценцию из этого состояния с $\tau < 3$ нс. В смесях S_2 с Ag затухание флуоресценции как с уровня $v'=3$, так и с уровня $v'=9$, имеет сложный двух- или даже трехэкспоненц. характер. Высказаны предположения о природе флуоресценции в этом случае. Отмечено, что результаты согласуются с полученными ранее с использованием широкополосного источника возбуждения. Библ. 36. В. С. Иванов



52

спектр
ЭПР

Х-13-7094

ф. 1975. №2

№ Д740.) Спектр ЭПР двухатомных молекул серы в газовой фазе. Wayne F. D., Davies P. B., Thrush B. A. The gas-phase E. P. R. spectrum of diatomic sulphur molecules. «Mol. Phys.», 1974, 28, № 4, 989—996 (англ.) 1974

Исследовались спектры ЭПР молекул $^{32}\text{S}_2$ на частоте около 9 ГГц. Измерения выполнены на спектрометре Вэриан V-4502-15. Спектры наблюдались во время одновременной продувки через резонатор водорода и дихлорида серы, когда в результате протекания химич. реакций образовывались молекулы серы. Путем усреднения сигнала удалось наблюдать одиночную линию от молекул смешанного изотопного состава $^{34}\text{S}^{32}\text{S}$. Ни ЭПР, ни спектры молекулярных пучков не давали достаточных сведений о молекулярных параметрах, и лишь комбинирование и сопоставление эксперим. данных по ЭПР, молекулярным пучкам и некоторым оптич. линиям позволили определить параметры тонкой структуры и g -факторы уровня с $v=0$. Показано, что наиболее предпочтительные значения следующие: $\lambda = 352,97 (\pm 0,32)$ ГГц; $\gamma = -257 (\pm 18)$ МГц; $g_r = -0,000031 (\pm 0,000014)$; $\Delta g' = -0,0091 (\pm 0,0017)$. Не наблюдается никаких расхождений между оптич. и радиоспектроскопич. величинами параметров. 4.6
A. B. A.

ВФ ХИ-1466

1974

S₂

м.п.

И-7091

5 Б326. Спектр ЭПР двухатомной молекулы серы в газовой фазе. Wayne F. D., Davies P. B., Thrush B. A. The gas-phase E. P. R. spectrum of diatomic sulphur molecules. «Mol. Phys.», 1974, 28, № 4, 989—996 (англ.)

На частоте 9 Гц определены резонансные поля молекул $S^{32}S^{32}$ в газе, в состоянии $^3\Sigma_g^-$ с колебательным квантовым числом $v=0$ и вращат. квантовыми числами K и $J=1$. Проведен совместный анализ данных ЭПР, метода молек. пучков и электронных спектров и определены уточненные параметры эффективного гамильтониана: $\lambda = 352,97 \pm 0,32$ Гц, $\gamma = -257 \pm 18$ МГц, $g_r = -0,000031 \pm 0,000014$ и $\Delta g^1 = -0,0091 \pm 0,0017$.

Ю. Н. Дубров

пос

X. 1975 N 5

XU-9204

1975

10 Д399

Фотоэлектронная спектроскопия высоко-
температурных паров. VII. S_2 и Te_2 . Berkowitz J.
PES of high temperature vapors. VII. S_2 and Te_2 .
«J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 10, 4074—4079 (англ.)

Проведено сравнение 584-А фотоэлектронных спектров O_2 , S_2 и Te_2 . Расхождения между ними больше, чем в случае спектров F_2 , Cl_2 , Br_2 и I_2 , что предполагает нарушение принципа химич. подобия. Эти расхождения связаны с динамикой процесса фотоионизации. Характеристика спектра S_2 в основном совпадают с характеристиками спектра O_2 . Аномальное поведение Te_2 связано со структурой незаполненных оболочек $(\pi_g)^2$. Относит. интенсивности $^2\Pi_{g1/2}$ - и $^2\Pi_{g3/2}$ -пиков спектра Te_2 находятся в отношении 10:1, в то время как в спектре O_2 они приблизительно равны. Сделан вывод, что образование основного ионного состояния происходит главным образом посредством перехода $\Delta\Omega=0$. Этот вывод можно проверить с помощью изучения углового распределения фотоэлектронов, появляющихся при образовании состояния $^2\Pi_{g1/2}$. Ч. VI см. РЖФиз, 1971, 2Д860.

X

(42)

14.С

 S_2 Te_2 O_2 фотоэлектрон.
спектрф. 1975
N 10

ЖЗ-9204

1975

19 Б155. Фотоэлектронные спектры высокотемпературных паров VII. S_2 и Te_2 . Berkowitz J. PES of high temperature vapors. VII. S_2 and Te_2 . «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 10, 4074—4079 (англ.)

Приведены фотоэлектронные спектры S_2 и Te_2 с возбуждением при λ 584А. В общих чертах спектр S_2 аналогичен спектру O_2 и, поэтому состояния S_2^+ отнесены аналогичным образом. Однако, в спектре Te_2 очевидно наличие аномалий. Интенсивности пиков, отнесенных состоянием $^2\pi_{g, 1/2}$ и $^2\pi_{g, 3/2}$, находятся в отношении 10:1, в то время как для кислорода они приблизительно равны. Др. пики спектра либо отсутствуют, либо очень слабы. Приведен анализ, объясняющий эту аномальность на основании связи по Гунду с-типа. Сообщ. V см. РЖХим, 1974, 24Б102. Резюме

фотоэл.
спектр.

ж 1975 №19

(+2)



50421.7824

Ph, TC, Ch

BSP - I - 8877

S₂

30526GR

1975

4004

Dixon R.N., Hugo J.M.V. A general pseudo-potential model for molecules with many valence electrons.

"Mol. Phys.", 1975, 29, N 3, 953-970

(англ.)

(ср. Нат, III)

0250 пм

C 3 4 2

322 324

ВИНИТИ

*3-9476

1975

S₂

11 Д312. Фотоэлектронная спектроскопия нестабильных молекул. Ч. 5. Молекула $S_2(^3\Sigma_g^-)$. Dyke J. M., Golob L., Jonathan Neville, Morris A. Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 5. The $S_2(^3\Sigma_g^-)$ molecule. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, 71, № 5, Part 2, 1026—1036 (англ.)

фотоэлектронный спектр

 $(\varepsilon_i)^2$

Изучен фотоэлектронный спектр молекулы $S_2(^3\Sigma_g^-)$ (I), полученный при возбуждении линией гелия 584 Å (21,21 эв) и 304 Å (40,3 эв). I получали испарением серы при 600°K при 10-кратном избытке гелия. Полуэмпирич. расчеты, корреляция с ионными состояниями O_2^+ и SO^+ , а также анализ колебательной структуры полос позволили идентифицировать 11 ионных состояний. Для первых 5 ионных состояний приводятся равновесные межъядерные расстояния (1,82; 2,05; 2,04; 1,93; 1,98 Å), оцененные путем подгонки рассчитанных коэф. Франка—Кондона к распределению интенсивности полос в фотоэлектронном спектре. Ч. IV см. РЖФиз. 1975, 5Д511.

☑

(47)

ш.с.

ф. 1975

N 11

Ю. В. Ч.

*3-9476

1975

S₂⁺

М 23 Б165. Фотоэлектронная спектроскопия промежуточных частиц в вакуумной ультрафиолетовой области. Часть 5. Молекула $S_2(^3\Sigma_g^-)$ Dyka J. M., Golob L., Jonathan Neville, Morris A. Vacuum ultraviolet photoelectron spectroscopy of transient species. Part 5. The $S_2(^3\Sigma_g^-)$ molecule. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, 71, № 5, Part 2, 1026—1036 (англ.)

и.н.

Изучен фотоэлектронный спектр молекулы $S_2(^3\Sigma_g^-)$, возбуждаемый резонансной линией He-I. Молекулы S_2 генерировали введением паров серы в избыток He. В условиях опытов (т-ра 300—600° K, давл. $\leq 0,1$ мм) в парах преобладали частицы S_2 . Отождествление полос производилось по аналогии с изученными ранее спектрами O_2 и SO и на основании расчетов МО иона S_2^+ методом ССП в приближении ЧПДП. Всего в спектре S_2 наблюдалось 11 полос. Из них 5 полос обнаруживают хорошо разрешенную колебательную структуру, также использованную в идентификации ионных состояний. 1-я полоса, соотв-щая процессу $S_2^+(X^2\Pi_g) \leftarrow S_2(X^3\Sigma_g^-)$, при 9,41 эВ имеет также структуру, обус-

(41) S_2
(спектр)

X 1975 N 23

ловленную спин-орбитальным взаимодействием. На основании сравнения относит. интенсивностей колебательных компонент полос с вычисленными факторами Франка-Кондона определены длины связи $\bar{r}_e$ для иона S_2^+ в различных состояниях возбуждения (A): $X^2\Pi_g$ 1,82; $^4\Pi_u$ 2,05; $^2\Pi_u$ 2,04; $^4\Sigma_g^-$ 1,93; $^2\Sigma_g^-$ 1,98. Эти данные в совокупности с измеренными расстояниями между колебат. уровнями и известными потенциалами ионизации атомов S использованы для построения диаграммы потенциальной энергии ионов S_2^+ . Приведена корреляц. диаграмма различных состояний ионов O_2^+ , SO^+ и S_2^+ . Показано, что выполняется эмпирич. соотношение $\bar{r}_e^n \omega_e = \text{const}$, где ω_e — колебательная частота для иона или соотв-щей молекулы, n — постоянная, равная 2,8 ($\pm 0,4$) для O_2 и O_2^+ , 3,4 ($\pm 0,3$) для SO и SO^+ , 2,9 ($\pm 1,0$) для S_2 и S_2^+ . См. РЖХим, 1975, 11Б131.

В. Е. Скурат

*4-8795

1975

S₂

(м.п.)

61124-1119

28 Д420. Вращательный спектр комбинационного рассеяния димера серы. Freedman Philip A., Jones W. Jeremy, Rogstad Astri. Rotational Raman spectrum of sulphur dimer. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 2, 71, № 2, 286—292 (англ.)

С помощью спектрографа большой светосилы и большой разрешающей способности исследован спектр вращательного комб. рас. молекул S₂ в области 7—110 см⁻¹. Пары серы с т-рой 900—950° К продувались непосредственно через разрядную область Ar⁺-лазера, спектр рассеяния наблюдался в направлении, перпендикулярном оси разряда. Регистрация спектра рассеяния проводилась фотографич. методом, причем экспозиция могла продолжаться в течение нескольких часов. После 5 час. работы генерация лазерного излучения прекращалась вследствие осаждения серы на окнах разрядной трубки. На основе анализа полученного спектра определены вращательные постоянные молекул S₂ B₀ = 0,29443 см⁻¹ и D₀ = 19,0 × 10⁻³ см⁻¹. Библ. 10.

С. П.

Ф 1975 № 8

#4 -8795

1975

S₂(и.п.)
XII-1419

17 Б175. Вращательный спектр комбинационного рассеяния света димера серы. Freedman Philip A., Jones W. Jeremy, Rogstad Astri. Rotational Raman spectrum of sulphur dimer. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1975, Part 2, 71, № 2, 286—292 (англ.)

С помощью высокочувствительного спектрографа и Ar⁺-лазера (λ 488 нм) мощностью около 4 Вт получен чисто вращательный спектр комбинац. рассеяния света димера серы S₂ при t-ре 900° К. Спектр идентифицирован, и на основе вращательного анализа определены вращательные постоянные S₂: $B_0 = 0,29443 \pm 0,00005$ см⁻¹ и $D_0 = (19,0 \pm 0,5) \times 10^{-8}$ см⁻¹. Из анализа некоторых вращательных переходов горячей полосы $v=1$ в предположении, что $D_1 = D_0$, определена постоянная: $B_0 - B_1 = (1,58 \pm 0,04) \times 10^{-3}$ см⁻¹. Для постоянной спин-спинового взаимодействия получено значение: $\lambda = 10,7 \pm 1,0$ см⁻¹. Приведенные результаты согласуются и в ряде случаев уточняют ранее полученные данные для S₂ другими методами.

С. Н. Мурзин

x. 1975 N17

X4-8795

1975

S₂

17438

Rotational Raman spectrum of sulfur dimer.
Philip A. Jones, W. Jeremy Rogstad, Astri (Dep.
Univ Cambridge, Cambridge, Engl.). *J. Chem.*
trans. 2 1975, 71(2), 286-92 (Eng). A recently
built large aperture spectrograph incorporating a 2-stage
intensifier was used in conjunction with a medium power
laser to obtain the pure rotational Raman spectrum of S₂.
Rotational consts. B₀ and D₀ were detd. from the spectrum
Corrections were made for line blending

(M.N.)

X11-7479

C.A. 1975 82 N26

X4-8626; XII-1423 1975

S₂

8 Д419. Подтверждение присутствия полосы S₂ в спектре комбинационного рассеяния. Hopkins Alfred G., Brown Chris W. Additional evidence for the Raman band of S₂. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 4, 1598 (англ.)

($\checkmark$)

Получены спектры комб. рас. продуктов ВЧ-разряда SO₂ и ее смеси с кислородом и инертными газами, осажденных на холодную подложку при 20° К в смеси с избытком аргона. Кроме полос SO₂, SO₃, S₂O₃ и S₃, в спектрах наблюдается полоса с частотой 718 см⁻¹, необратимо исчезающая при отжиге, интенсивность которой не была связана с интенсивностями прочих полос. Эта полоса отнесена к молекуле S₂. Библ. 9.

М. В. Тонков

Ф 1975 №8

S₂

*4 - 8626

1975

XII - 1423

15 B239. Новые данные о природе линии комбинационного рассеяния S₂. Hopkins Alfred G., Brown Chris W. Additional evidence for the Raman band of S₂. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 4, 1598 (англ.)

Изучены спектры КР (λ 4880А) продуктов, образующихся при радиочастотном ($\nu \sim 10$ МГц) или МВ-разряде ($\nu \sim 2450$ МГц) в SO₂, SO₂+O₂, SO₂+Ar и SO₂+O₂+Ar и осажденных на охлажденную до $\sim 20^\circ\text{K}$ подложку. Наряду с линиями, относящимися к колебаниям SO₂, SO₃, S₂O и S₃, в спектре КР проявляется также сильная линия при 718 см^{-1} , к-рая отнесена к S₂. При нагревании подложки до $\sim 31^\circ\text{K}$ интенсивность этой линии быстро уменьшается, что указывает на ее принадлежность соединению с повышенной р-ционной способностью.

А. Бобров

Спектры
Комбинационного
рассеяния

2. 1975 N 15

X11-1423; X4-8626

1975

S₂

Raman spectra

18004c Additional evidence for the Raman band of diatomic sulfur. Hopkins, Alfred G.; Brown, Chris W. (Dep. Chem., Univ. Rhode Island, Kingston, R. I.). *J. Chem. Phys.* 1975, 62(4), 1598 (Eng). After passing Ar:SO₂ at 50:1 and 100:1 through either a radio-frequency (≤ 200 W at 10 MHz) or microwave (≤ 85 W at 2450 MHz) discharge and depositing the gas onto a polished copper substrate at 20°K, the Raman spectrum of the deposited gas was measured, and in addn. to strong bands due to SO₂, SO₃, S₂O, and S₃, a relatively strong band was obsd. at 718 cm⁻¹, which agrees with the predicted frequency and that obsd. by R. F. Barletta et al. (1971) for S₂. The intensity of this band was independent of all other bands in the spectra. Upon warming to 31°K, the band disappeared rapidly indicating that it was due to a very reactive species. The expts. confirm that S₂ is one of the important species in SO₂ discharges.

C.A. 1975. 83 N2

S-S

PT. 4824

1975

Kerr J. A., et al.

(20)

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed. 1974-75

50511.6755

Ch, Ph, TC

96200

S₂ (COS) #45-8941

Lin M.C. Photoexcitation and photo-
dissociation lasers. II. CO laser emis-
sion from the vacuum UV photodissociation
of COS. "Chem. Phys.", 1975, 7, N 3,
433-441

(англ.)

0381 0:18

335 337 3 5 3

ВИНИТИ

S₂

ХЗ-8985

1975

ВФ-5053-IX

10 Д180. Определение межъядерного расстояния S—S по данным колебательной спектроскопии. Steu-
det Ralf. Ermittlung von SS-Kernabständen aus
Schwingungsspektren. «Z. Naturforsch.», 1975, 30b,
№ 2, 281—282 (нем.; рез. англ.)

М. Н.; Сил. пост.

Для S₂ (семь различных состояний), S₈O, S₆, S₈, S₁₂
и BaS₂ установлена линейная зависимость между дли-
нами связи S—S (d_{ss}) и силовыми постоянными ва-
лентных колебаний S—S. Зависимость частот валент-
ных колебаний ν_{ss} от d_{ss} описана двумя прямыми
соответственно для двухатомных и многоатомных мо-
лекул. Найденные ур-ния использованы для оценки
межъядерных расстояний S—S в ионах S₂⁻, S₃⁻, S₄²⁺.
Сделан вывод, что кратность связи S—S в этих ионах
превышает 1.

О. В. Сизова

ф. 1975 N 10

(+3)

✕

O_2 , SO_2 , S_2 (2-носм. молекулы
симметричны) 1975

Wayne F.D., XI4417

Chem. Phys. Lett., 1975, 31 (1),
97-101.

Origin of the variation with
vibrational and rotational state
of the fine-structure constants...

C.A. 1975, 82 n 24. 161985 h. 10 (5)

S₂

(Amnua 8783) mace 1975

Berikowitz &

(y)

0530p

0530p

High Temp. UPS Studies
and other variations



p 355 - 433

1976

2 Д743. Относительный выход испускания S_2 при промежуточном сильном взаимодействии в 3,4-бензпирене. Bogaardt P. A. M. van den, Rettsch-nick R. P. H., Voorst J. D. W. van. Relative S_2 emission yield by intermediate strong coupling in 3,4-benzpyrene. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 2, 270—273 (англ.)

Исследован относит. квантовый выход флуоресценции из 2-го возбужденного синглетного состояния S_2 3,4-бензпирена (I) в парообразной фазе в зависимости от длины волны возбуждающего света и от т-ры в интервале 380—500° К при давлении собственных паров $p=0,01$ мм рт. ст., а также в присутствии постороннего газа (гексана) до 1 атм. Измерены относит. квантовый выход и время жизни флуоресценции из состояния S_1 в ф-ции длины волны возбуждающего света. Методом экстраполяции данных по известным колебательным

ф. 1977. №2

спектрам нафталина, антрацена, фенантрена и пирена получены колебательные частоты I и вычислено отношение плотностей колебательных состояний $(\rho_2/\rho_1) S_2$ и S_1 нулевого порядка в ф-ции энергии. Расчетным путем найдены значения относит. квантового выхода флуоресценции изолированных молекул I из состояния S_2 для различных длин волн возбуждающего света при т-ре паров $T=450^\circ \text{K}$ и для различных т-р при возбуждении $\nu_{\text{возб.}} = 28\,300 \text{ см}^{-1}$. Получено удовлетворительное согласие между результатами расчета и эксперим. данными, на основании которого установлено, что степень промежуточного сильного взаимодействия между S_2 и S_1 нулевого порядка определяется величиной отношения плотностей колебательных состояний ρ_2/ρ_1 .
Библ. 12.

А. М. М.

$S'_2(B^3\Sigma_u \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$

1976

Brom J. H. et al

(prototype)

Chem. Phys. Lett.,
1976, 41, 11, 185-7

(cc OCS) III

S₂

1976

Grover M. et al

Adv. Atom. and Mol. Phys.
Vol. 12. New York e.a., 1976,
165-213

офот:
онмурекас
накарка

S₂

1976

Krishnamachari S.L.
N.G., et al.

Chem. Phys. Lett. 1976
41, N1, 183-4

(un-
formally)



(all C.S.) III

S₂

1976

спектр.
электрон.

85: 84936a Spectroscopic studies of the sulfur afterglow. Lakshminarayana, G.; Mahajan, C. G. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1976, 16(7), 549-52 (Eng). The afterglow emission spectrum of S and Ar mixt. consists of (a) the main band system of S₂(B³Σ_u⁻-X³Σ_g⁻) in the region 3200-6600 Å and (b) the at. spectrum of Ar in the 7500-9000 Å region. Although B-X bands of S₂ obtained by ordinary excitation extends from 2829 to 7100 Å, the lower wavelength limit of these bands from the afterglow is only 3200 Å. It is proposed that the S₂ mols. are formed in the B³Σ_u⁻ state through inverse predissocn. when 2 S atoms approach each other along the potential curve of the predissocg. electronic state 1_u.

C.A. 1976 85 N

S_2

Se_2

Te_2

1976

1 Д332. Релятивистские эффекты в УФ-фотоэлектронных спектрах двухатомных молекул S_2 , Se_2 и Te_2 . Lee S.-T., Süzer S., Shirley D.-A. Relativistic effects in the UV photoelectron spectra of group VI diatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 1, 25—28 (англ.)

Показано, что аномальное отношение интенсивностей фотоэлектронных полос, соответствующих образованию ионов S_2^+ , Se_2^+ и Te_2^+ в состояниях $^2\Pi_{1/2}$ и $^2\Pi_{3/2}$, вызвано спин-орбитальным взаимодействием в основном состоянии этих молекул. Расчеты в приближении связи $\omega-\omega$ находятся в хорошем согласии со всеми эксперим. данными и предсказывают отношение интенсивностей полос $^2\Pi_{1/2}/^2\Pi_{3/2}=35$ для PO_2 . Библ. 18. Ю. В. Чижов

у.р. - фото-
электр.
спектр

(+2)



р. 1977 №1

1976

S₂Se₂Te₂Po₂

85: 101856u Relativistic effects in the uv photoelectron spectra of Group VI diatomic molecules. Lee, S. T.; Suzer, S.; Shirley, D. A. (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, Calif.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 41(1), 25-8 (Eng). The anomalous $2I_{1/2}/2I_{3/2}$ intensity ratios obsd. recently in the photoelectron spectra of S₂, Se₂, and Te₂ arise from spin-orbit coupling in the ground state. An intermediate coupling calcn. gives good agreement with all obsd. intensity ratios and predicts a ratio of ≈ 35 in Po₂.

спин-орбит. (гросс-структ.)
расщепл.

(+3)

⊗

C.A. 1976 85 N14

(C.A. 1976 85 N14)

S₂

XU-17390

1976

7 Д434. Ридберговские переходы молекулы S₂.
Mahajan C. G., Lakshiminarayana G., Nagasimham N. A. Rydberg transitions of S₂. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1976, 14, № 6, 488—490 (англ.)

Спектр поглощения S₂ сфотографирован со средним разрешением в области длины волны 1200—1600 Å. Помимо хорошо известных полос идентифицированы третьи члены ридберговских серий $(\pi_g 3p)^2 (X^3\Sigma_g^-) \rightarrow (\pi_g 3p)(\pi_u np)$. Оценено значение первого адиабатич. потенциала ионизации молекулы S₂, $I_p(S_2) = 9,39$ эв. Несколько полос спектра остались неидентифицированными.

У.М.И.

В (+1) м.с. ●

ф. 1982. д. 7

1976

S₂

* U-17390

(7)

86: 10313u Rydberg transitions of diatomic sulfur. Majumdar, C. G.; Lakshminarayana, G.; Narasimham, N. A. (Spectroscopy Div., Bhabha At. Res. Cent., Trombay, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1976, 14(6), 488-90 (Eng). Using Ar and Kr continua as background radiation the vacuum uv absorption spectrum of S₂ was investigated in the region 1200-1600 Å. Besides photographing all the known bands, the 3rd member of the Rydberg series $(\pi_g 3p)^2 (X^3\Sigma_g^-) \rightarrow (\pi_g 3p) (\pi_u np)$ was identified. The ionization potential of S₂ was 9.39 eV. Several new bands were found which remain unassigned.

C.A. 1977 86 NR2

S₂

#4. 12658

1976

16 B139. Полосы S₂ в ближней ИК-области: система $^3\Pi_g - ^3\Delta_u$. Nagarajam N. A., Sethuraman V., Appa Rao K. V. S. R. Near-infrared bands of S₂: $^3\Pi_g - ^3\Delta_u$ system. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 1, 142—152 (англ.)

Исследован спектр испускания молекулы S₂ ($^{32}\text{S}_2$, $^{32}\text{S}^{34}\text{S}$, $^{34}\text{S}_2$) в области 6983—7760 Å. Спектр возбуждали безэлектродным МВ-разрядом в разрядной трубке, содержащей следы серы и заполненной гелием (2—3 мм). Наблюдались две системы полос, принадлежащие переходам $^3\Pi_{2g} - ^3\Delta_u$ и $^3\Pi_{1g} - ^3\Delta_{2u}$. Отсутствие третьей системы — $^3\Pi_{0g} - ^3\Delta_{1u}$ связывается с преддиссоциацией. Выполнен анализ вращательной структуры полос с $v' = 0$ ($^3\Pi_{gi}$), $v'' = 0, 1, 2, 3$ ($^3\Delta_{uj}$). Из-за преддиссоциации переходы с $I' \geq 34$ ($^3\Pi_{2g}$) и $I' \geq 16$ ($^3\Pi_{1g}$) (для $^{32}\text{S}_2$) не наблюдались (для $^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ и $^{34}\text{S}_2$ соотв. 35 и 36, 17 и 18). Обнаружены и обсуждаются также др. возмущения. Определены эффективные колебательные и вращательные молекулярные постоянные S₂ (ω_e , $\omega_e x_e$, B_0 , B_1 , B_2 , B_3 , γ) в $^3\Pi_{2g}$, $^3\Pi_{1g}$, $^3\Delta_{2u}$ и $^3\Delta_{3u}$ состояниях. В. М. Ковба

спектр
иониз.
М. К. Обл.
М. И.

х. 1976
n16

1546

111

952

84-12658

1976

(u,n)

84: 51743m Near-infrared bands of diatomic sulfur. The ${}^3\Pi_g$ - ${}^3\Delta_u$ system. Narasimham, N. A.; Sethuraman, V.; Apparao, K. V. S. R. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 59(1), 142-52 (Eng). Vibrational and rotational anal. of the near-ir bands of S_2 lying in the region 6983-7760 Å are reported. They form a single progression of bands arising from a common vibrational level $v' = 0$ of an initial ${}^3\Pi_{gi}$ state to levels $v'' = 0, 1, 2$, and 3 of the final ${}^3\Delta_{ui}$ state. The initial ${}^3\Pi_{gi}$ state is predissocd., as a result of which rotational levels with $J' \geq 34$ of ${}^3\Pi_{2g}$ and $J' \geq 16$ of ${}^3\Pi_{1g}$ are not obsd. and, further, no transitions from the ${}^3\Pi_{0g}$ component were obsd. - These and other perturbations noticed in the different bands are discussed. The studies are also extended to the isotopic mols. ${}^{32}S^{34}S$ and ${}^{34}S_2$.

952-1117

C.A. 1976 84N8

S₂

У - 12658

1976

9 Д285. Полосы системы $^3\Pi_g - ^3\Delta_u S_2$ в близкой ИК-области спектра. Nagasimham N. A., Sethugaman V., Apparao K. V. S. R. Near-infrared bands of $S_2: ^3\Pi_g - ^3\Delta_u$ system. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 1, 142—152 (англ.)

Выполнен колебательно-вращательный анализ спектра поглощения молекулы S_2 в области 6983—7710 Å. Полосы спектра образуют единственную прогрессию с общего нижнего уровня $v'=0$ состояния $^3\Pi_{gi}$ на уровни $v''=0, 1, 2$ и 3 состояния $^3\Delta_{ui}$. Состояние $^3\Pi_{gi}$ преддиссоциировано, в результате чего в спектре не наблюдаются вращательные уровни с $J' \geq 34$ состояния $^3\Pi_{2g}$ и $J' \geq 16$ состояния $^3\Pi_{1g}$, а также переходы из состояния $^3\Pi_{0g}$. Обсуждены различия в спектрах изотопозамещенных молекул $^{32}S^{34}S$ и $^{34}S_2$ и возмущения, обнаруженные в различных полосах. Библ. 8.

(с.и.и.)

УДК 535.431.1
X11-1546

Ф 1976 №9

* 4-13597

1976

S₂

12 Д337. Полосы S_2 в ближней ИК-области: система ${}^3\Pi_{gi}-{}^3\Sigma_u^+$. Nagasimham N. A., Apparao K. V. S. R., Balasubramanian T. K. Near-infrared bands of S_2 : ${}^3\Pi_{gi}-{}^3\Sigma_u^+$ system. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 2, 244—254 (англ.)

(и.и.)

Получены спектры ИК-излучения паров S_2 , возбужденные ВЧ-разрядом в области $12\,500-13\,500\text{ см}^{-1}$. Наблюдаемые колебательно-вращательные линии отнесены к электронным переходам ${}^3\Pi_{2g}-{}^3\Sigma_u^+$ и ${}^3\Pi_{1g}\leftrightarrow{}^3\Sigma_u^+$. Каждому электронному переходу соответствует колебательная серия $0-v''$ ($v''=0, 1, 2$). Приведены спектры и частоты наблюдаемых линий. В серии начальных электронных уровней ${}^3\Pi_{0g}$ отсутствует, т. к. попадает в условия преддиссоциации, так же как и вращательные состояния $J>34$ и $J>16$ уровней ${}^3\Pi_2$ и ${}^3\Pi_1$ соответственно. По наблюдаемым частотам определены начала полос и колебательные и вращательные константы молекул ${}^{32}S_2$, ${}^{34}S_2$, ${}^{32}S$, ${}^{34}S$. Библ. 6.

М. Тонков

 ИК-
 0551-550
 1976

ф 1976 N 12

X 13597

1976

22 Б119. Полосы S_2 в близкой инфракрасной области: система ${}^3\Pi_{gi} \rightarrow {}^3\Sigma_u^+$. Nagasimham N. A., Arago K. V. S. R., Balasubramanian T. K. Near-infrared bands of S_2 : ${}^3\Pi_{gi} \rightarrow {}^3\Sigma_u^+$ system. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 2, 244—254 (англ.)

Измерены спектры испускания молекул ${}^{32}S_2$, ${}^{32}S^{34}S$ и ${}^{34}S_2$ в области 7440—8085 Å (переход ${}^3\Pi_{gi} \rightarrow {}^3\Sigma_u^+$). Спектры возбуждались микроволновым разрядом в парах серы. Проведен детальный анализ вращательной структуры полос 0—0, 0—1, 0—2 систем ${}^3\Pi_{2g} \rightarrow {}^3\Sigma_u^+$ (I) и ${}^3\Pi_{1g} \rightarrow {}^3\Sigma_u^+$ (II). Определены эффективные вращательные постоянные молекул ${}^{32,34}S_2$ в ${}^3\Sigma_u^+$ состоянии. В системе I наблюдались преддиссоциация при $I' \geq 34$, $v' = 0$ и возмущения при $I' = 5, 7, 9, 17, 24$, в системе II — преддиссоциация при $I' \geq 16$, $v' = 0$, возмущения при $I' = 4, 9$. Обсуждены тип начального электронного состояния и тип связи по Гунду в ${}^3\Sigma_u^+$ состоянии. В. М. Ковба

(М.К.)

X 1976 N 22

Bp-1550-XII

S₂

43-13597

1976

B9-1550-XII

($3\Pi_g^- - 3\Sigma_u^+$)

84: 82077b Near-infrared bands of diatomic sulfur: $3\Pi_g^- - 3\Sigma_u^+$ system. Narasimham, N. A.; Apparao, K. V. S. R.; Balasubramanian, T. K. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 59(2), 244-54 (Eng). Vibrational and rotational analyses of the near-ir bands of S₂ lying in the region 7440-8085 Å are reported. They form a new band system involving a $3\Pi_g^- - 3\Sigma_u^+$ transition and arise from the same initial $3\Pi_g^-$ state of the $3\Pi_g^- - 3\Delta_u$ band system reported earlier. The analyses of the bands of this system due to the isotonic mols. ³²S³⁴S and ³⁴S₂ are also reported.

C. A. 1976. 84 IV 12

S₂

1947

Abdulnur Suheil F et al

Fla Sci, 1947, 40, N1,
73-76 (amr)

кривая
показана.
мерили
М.Н.

см. ВД₂ - III

S₂

спектр
в

10 Д434. Спектры поглощения молекул S₂ в ван-дер-ваальсовских кристаллах. Agai T., Martin T. P. Absorption spectra of S₂ molecules embedded in van der Waals solids. «Phys. status solidi (b)», 1977, 81, № 1, 185—189 (англ.; рез. нем.)

1977

При $T=4,2^{\circ}\text{K}$ исследованы спектры поглощения молекул S₂, изолированных в матрицах Ag или Kг, в области 2200—5500 Å. Полученные спектры содержат четко выраженные электронно-колебательные последовательности, обусловленные взаимодействием электронного перехода ${}^3\Sigma_u^- \rightarrow {}^2\Sigma_g^-$ молекул S₂ с валентными колебаниями. Число линий в последовательностях составляет 12—15, головные линии расположены при 3149 Å в матрицах Ag и при 3107 Å в Kг. Расстояние между линиями уменьшается с номером от 450 до 340 см⁻¹, что позволило определить параметры ангармонич. потенциала колебаний молекул S₂ в матрицах. Установлено, что потенциал в матрицах незначительно отличается от потенциала свободных молекул S₂, что указывает на слабое взаимодействие молекул S₂ с матрицами Ag и Kг. Каждая электронно-колебательная линия имеет дополнительную структуру (расстояние между максимумами 60 см⁻¹ в Ag и 50 см⁻¹ в Kг), обусловленную взаимодействием перехода с фононами матрицы.

С. П

ф. 1977
N 10

1977

S₂

M.M.

87: 13823s Absorption spectra of sulfur dimer molecules embedded in van der Waals solids. Arai, T.; Martin, T. P. (Max-Planck-Inst. Festkoerperforsch., Stuttgart, Ger.). *Phys. Status Solidi B* 1977, 81(1), 185-9 (Eng). The $^3\Sigma_u^- \leftarrow ^3\Sigma_g^-$ transitions are investigated of S dimers, matrix-isolated in Ar and Kr. Each vibrational subband of the electronic absorption appears to consist of several superimposed narrow bands. The sepn. between the narrow bands is detd. to be 60 cm^{-1} in Ar and 50 cm^{-1} in Kr. The complex structure is interpreted to be caused by phonons of the matrix materials. The potential parameters of S dimers in Ar and Kr are also calcd.

C. A. 1977 87 N2

1977

S₂

18 Б214. Спектры поглощения молекул S₂, изолированных в кристаллических телах с молекулярной связью. Arai T., Martin T. Absorption spectra of S₂ molecules embedded in van der Waals solids. «Phys. status solidi (b)», 1977, 81, № 1, 185—189 (англ., рез. нем.)

спектры
поглощения

Измерены спектры поглощения (2200—5500 Å) серы, изолированной в аргоновой и криптоновой матрицах (S₂:Ar, Kr ≈ 1:100). Молекулы S₂ образовывались при испарении ZnS и серы. В области 3149—2635 Å (Ar) наблюдались полосы, принадлежащие переходу $^3\Sigma_u^- - ^3\Sigma_g^-$ S₂ (в Kr-матрице 3107—2670 Å). Определены колебательные постоянные ω_e , $\omega_e x_e$, $\omega_e y_e$ и параметры функции Морзе (D_e, β) S₂($^3\Sigma_u^-$) Ar-матрица — 438, 2,85, 0,00369, $1,65 \times 10^4$ см⁻¹, $1,91 \times 10^{-8}$; Kr-матрица — 462, 3,65, 0,00426, $1,48 \times 10^4$ см⁻¹, $2,14 \times 10^{-8}$). Найдено, что каждая полоса колебательной структуры состоит из узких подполос с интервалом 60 см⁻¹ (Ar) и 50 см⁻¹ (Kr). Их появление объясняется взаимодействием колебаний S₂ с фононами матрицы.

В. М. Ковба

х. 1977
N 18

S₂

оттиски 5221

1977

10 Д214. Атомные силовые постоянные для S₂. Barletta R. E., King W. T. Atomic force constants in S₂. «Spectrochim. acta», 1977, A33, № 2, 247 (англ.)

США, 1977.

По фундаментальной частоте колебаний S₂ найдена атомная силовая постоянная (АСП), определяемая как $(m_s/N)\sum\omega_j^2$, где N — число атомов серы, m_s — масса атома S, суммирование производится по всем нормальным колебаниям. Величина АСП в S₂ близка к среднему значению АСП в молекулах S₆, S₈, S₁₂, в связи с этим сделано предположение о постоянстве произведения $n_s\rho_s(R)$, где n_s — число ближайших соседних атомов, а $\rho_s(R)$ — электронная плотность на атоме серы в молекуле.

Р. Мухтаров

Ф. 1977 № 10

emnick 5221.

1977

S₂

S₈ ✓

S₆ ✓

S₁₂

Bartetta R.E.

W. 108624 Atomic force constants in disulfur, Bartetta, R.E.; King, W. T. (Metcalf Res. Lab., Brown Univ., Providence, R. I.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1977, 33A(2), 247 (Eng). The at. force const. of doubly bonded S₂ is the same as in the singly-bonded ring compds. S₆, S₈, and S₁₂. This is rationalized in terms of the dependence of at. force consts. on internuclear distances.

Cild, mcr.



(+3)

C. A. 1979. 27 N 14

IX

S_2

1977

от тиски 5221

$S(x)$

силов.
пост.

17 Б168. Атомные силовые постоянные в S_2 . Bar-
letta R. E., King W. T. Atomic force constants in S_2 .
«Spectrochim. acta», 1977, A33, № 3, 247 (англ.)

Показано, что атомные силовые постоянные в S_2 и
кольцевых молекулах S_6 , S_8 и S_{12} близки, несмотря на
разницу в структуре, длинах связей и координации.

В. М. Ковба

(+1) ☒

х. 1977 № 17

1977

S₂

19 B158. Сохранение когерентности при вращательно неупругих столкновениях селективно возбуждаемых двухатомных молекул серы. Caughey Thomas A., Crosley David R. Coherence retention during rotationally inelastic collisions of selectively excited diatomic sulfur. «Chem. Phys.», 1977, 20, № 3, 467—475 (англ.)

спектр флуоресценции

Исследован эффект Хэнля в спектре флуоресценции, испускаемом селективно возбуждаемыми молекулами S₂. Использована линия цинка (307,6 нм), возбуждающая уровень $v'=4$, $N'=40$, $I'=41$ состояния $B^3\Sigma_u^-$. На оптическую ячейку накладывалось медленно меняющееся магнитное поле и переменное поле для синхронного детектирования. Установлено, что при неупругих столкновениях возбужденных молекул S₂ с атомами инертных газов и молекулами азота когерентность сохраняется, во всех этих случаях соотв-щие времена жизни значительно больше, чем время жизни при столкновениях. Тушение определяется столкновениями молекул серы в основном и возбужденных электронных состояниях. В этом случае оба времени жизни в пределах ошибки эксперимента одинаковы. В. М. К.

X. 1974
N 19

1977

S₂

9 Д477. Сохранение когерентности при вращательно-неупругих столкновениях селективно-возбужденных двухатомных молекул серы. Caughey Thomas A., Crosley David R. Coherence retention during rotationally inelastic collisions of selectively excited diatomic sulfur. «Chem. Phys.», 1977, 20, № 3, 467—475 (англ.)

Измерена зависимость ширины и формы сигнала Ханле для селективно-возбужденных молекул S₂ (состояние $B^3\Sigma_u^-$, $v'=4$, $N'=40$, $J'=41$) от давления собственного и буферных газов (N₂ и благородные газы). Источником возбуждения служила резонансная цинковая лампа ($\lambda=307,6$ нм). Показано, что при столкновениях с буферными газами когерентность возбужденного состояния сохраняется даже при изменении вращательно-

ширина
и форма
сигнала
Ханле

и J-а
лек

Ф 1977 № 9

го состояния молекулы. Этот вывод был подтвержден прямым наблюдением сигнала Ханле на вращательных подуровнях, заселяемых только с помощью неупругих столкновений. Обработка эксперим. данных позволила заключить, что степень сохранения когерентности (за одно столкновение) меняется от $85 \pm 15\%$ в присутствии He до $40 \pm 10\%$ в присутствии Xe. При столкновениях S_2-S_2 доминирующим процессом разрушения когерентности является процесс тушения возбужденного состояния. Обсуждены возможные следствия обнаруженного явления. Библ. 16. Х. В.

$S_2 (B^3 \Sigma^- - X^3 \Sigma^- g)$

1977

Fournier J.

"J. Chem. Phys" 1977

66(6) 2656-9 (eng)

(see CS; III)

1977

S₂

15 Б1393. Хемилюминесценция в скрещенных молекулярных пучках. Реакция перегруппировки с участием атомов щелочноземельных металлов $M + S_2Cl_2 \rightarrow S_2^* + MCl_2$. Engelke F., Zare R. N. Crossed-beam chemiluminescence: the alkaline earth rearrangement reaction $M + S_2Cl_2 \rightarrow S_2 + MCl_2$. «Chem. Phys.», 1977, 19, № 3, 327—340 (англ.)

Хемилюминесценция

В скрещенных молек. пучках исследована хемилюминесценция молекулы $S_2(B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$, возникающей в единичных столкновениях атомов щел. металлов: (Ba, Sr, Ca) с S_2Cl_2 . Обнаружен никогда не предполагавшийся ранее процесс перегруппировки $M + S_2Cl_2 \rightarrow S_2^* + MCl_2$ (1) с сосредоточением большей части энергии р-ции на связи S—S. Наблюдаемые спектры для всех M практически идентичны и простираются от 10 000 Å до 3 000 Å с максимумом в области 4 000 Å

Х. 1977 № 15

(73)

Ba, Sr, Ca
поперек. сечен.
Хемилюмин.

и слабовыраженной структурой. Практически все небольшие максимумы соответствуют положениям кантов полос спектра S_2 . Излучение в р-ции с участием Ва примерно на порядок ярче, чем для р-ций со Sr и Ca. Кроме р-ции 1 существуют еще два канала $M + S_2Cl_2 \rightarrow MCl_2^* + S_2$ и $M + S_2Cl_2 \rightarrow MCl_2^* + S_2Cl$. Полные поперечные сечения хемилюминесценции (A^2) составляют 162 ± 20 , 105 ± 20 и 92 ± 20 для Ва, Sr и Ca соотв., что подтверждает действие гарпунного механизма во всех р-циях. В исследованных процессах наблюдается различное заселение колебательных уровней молекул S_2 . Для Ca уровни $v'=9$ и $v'=10$ совсем не заселены.

Л. Ю. Русин

52

1977

7 Д857. Хемилюминесценция при пересечении пучков: реакция замещения $M + S_2Cl_2 \rightarrow S_2^* + MCl_2$ с участием щелочноземельных элементов. Engelke F., Zare R. N. Crossed-beam chemiluminescence: the alkaline earth rearrangement reaction $M + S_2Cl_2 \rightarrow S_2 + MCl_2$. «Chem. Phys.», 1977, 19, № 3, 327—340 (англ.)

комб. уловки энергии

Исследована хемилюминесценция (X) реакций Ba, Sr и Ca с S_2Cl_2 , проводимых методом скрещенных атомно-молекулярных пучков. В спектрах X в области 200—1000 нм зарегистрированы системы полос $S_2(B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$, $MCl^*(A, B, C \rightarrow X)$, а также квазиконтинуум, возникающий при переходах в возбужденных полиатомных газах металлов, вероятнее всего — MCl_2^* . Отмечено, что интенсивность X в полосах S_2^* в реакции с Ba на порядок превышала таковую в реакции со Sr и на ~2 порядка с Ca. Анализ структуры полос S_2^* показал неравновесный характер заселения состоя.

□

чения

ф. 1977. № (2+) S_2Cl_2 (до) (S_2Cl) %о

стемы колебательных уровней состояния $S_2(B^3\Sigma_u^-)$.
 Найдено, что образование S_2^* является бимолекуляр-
 ной реакцией первого порядка по каждому из реаген-
 тов с малыми величинами энергий активации. Феноме-
 нологич. поперечное сечение удаления атомов М из
 пучка при столкновениях с S_2Cl_2 оценено в (162 ± 20) ,
 (105 ± 20) и (92 ± 20) Å² для Ва, Sr и Са соответствен-
 но. Эти величины совпадают в пределах 10% со зна-
 чениями, вычисленными на основе модели перескока
 электрона при столкновении, в предположении, что
 энергия сродства к электрону молекулы S_2Cl_2 состав-
 ляет $\sim 3,25$ эв. Абс. квантовый выход S_2^* в области
 280—600 нм составил $\leq 0,01$, несмотря на большое
 поперечное сечение реакции. Оценены величины энер-
 гии диссоциации, составившие $D_0^0(Cl-S_2Cl) = (44,2 \pm 5)$
 и $D_0^0(S_2-Cl) = (54 \pm 5)$ ккал/моль. Обсужден механизм
 реакции с анализом структуры молекулярных орбита-
 лей и сделан вывод, что максим. энергия возбуждения
 S_2^* отвечает плоской пятичленной кольцевой структу-
 ре промежуточного активированного комплекса S_2Cl_2M .

С. Л.

S₂ (current *Recherches*).

86: 148133s Crossed-beam chemiluminescence: the alkaline earth rearrangement reaction $M + S_2Cl_2 \rightarrow S_2^* + MCl_2$. Engelke, F.; Zare, R. N. (Dep. Chem., Columbia Univ., New York, N. Y.). *Chem. Phys.* 1977, 19(3); 327-40 (Eng). The reaction of the heavier Group IIA metal atoms Ba, Sr, and Ca with S_2Cl_2 under crossed beam conditions produces a chemiluminescent spectrum in which the $S_2 B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ emission bands are the most prominent feature. In addn., chemiluminescence is also obsd. from excited states of the alk. earth monochlorides and from a pseudo-continuum which is believed to originate from an excited polyat. metal halide, probably the alk. earth dichloride. More than 100 bands are assigned to the $S_2 B-X$ band system; the vibrational levels of the $S_2 B$ state are populated by the reaction in a non-thermal

(72) ϕ_0^0 (Cl-S₂Cl)
 ϕ_0^0 (S₂-Cl) ●

manner. The reaction forming S_2^* is first order with respect to both the ground state metal atom and the S_2Cl_2 mol. Phenomenol. cross sections for removal of metal atoms from the metal beam by S_2Cl_2 are $162 \pm 20 \text{ \AA}^2$ for Ba, $105 \pm 20 \text{ \AA}^2$ for Sr and $92 \pm 20 \text{ \AA}^2$ for Ca, which is consistent with an electron jump model if the vertical electron affinity of S_2Cl_2 is 3.25 eV. Abs. photon yield measurements indicate that $<1\%$ of the reaction products are S_2^* mols. that emit in the 2800-6000 Å region. From the single-collision chemiluminescence spectra the following dissocn. energies are estd.: $D_0^0(Cl-S_2Cl) = 44.2 \pm 5 \text{ kcal/mole}$ and $D_0^0(S_2-Cl) = 54 \pm 5 \text{ kcal/mole}$. A speculation is offered that most of the reaction exoergicity appears in the S_2^* product when the S_2Cl_2M collision complex passes through a nearly-planar, 5-member ring structure in sepg. to form products.

S_2

ХБ-17402

1977

7 Д855. Хемилюминесценция и фотолюминесценция S_2 , SO и SO_2 в послесвечении SF_6 . Kley D., Broi-da H. P. Chemiluminescence and photoluminescence of S_2 , SO and SO_2 in SF_6 afterglows. «J. Photochem.», 1977, 6, № 4, 241—252 (англ.)

(Do)

Описаны методы получения хемилюминесценции S_2 , SO и SO_2 , а также молекул S_2 и SO в основном электроном состоянии с концевой, достаточной для исследования фотолюминесценции, возбуждаемой белым светом. Источником реакционных атомов S служил СВЧ-разряд в смеси гексафторида серы и гелия. Получены и проанализированы спектры фото- и хемилюминесценции S_2 , SO и SO_2 . Оценена энергия диссоциации основного состояния молекулы S_2 $D_0(S_2) = (35\,657 \pm \pm 100)$ см⁻¹. Показано, что СВЧ-разряд в смесях CF_4/He и NH_3/He обеспечивает достаточно высокую для наблюдения фотолюминесценции концевую радикалов CF , CF_2 и NH . Библ. 16.

ф. 1977. № 7

X4-17402

1977

14 Б1303. Хемилюминесценция и фотолюминесценция S_2 , SO и SO_2 в послесвечении SF_6 . Kley D., Broi-
da H. P. Chemiluminescence and photoluminescence of
 S_2 , SO and SO_2 in SF_6 afterglows. «J. Photochem.»,
1977, 6, № 4, 241—252 (англ.)

Изучены спектры хемилюминесценции (Хл) и фото-
люминесценции (Фл) в зоне послесвечения SF_6 , про-
пущенного в смеси с He через СВЧ-разряд, а также
при введении потоков различных газов в эту зону.
В послесвечении SF_6 наблюдали как Хл, так и Фл S_2
в переходе $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$. Их спектры сходны, разли-
чие состоит лишь в наблюдении переходов 10—0, 11—0
и 12—0 в спектре Хл, отсутствующих в спектре Фл.
Сделан вывод, что $S_2(B^3\Sigma_u^-, v' > 9)$ образуется путем
обратной преддиссоциации в процессе рекомбинации ато-
мов S в основном состоянии 3P , поскольку др. р-ции,
напр., $S + SF \rightarrow S_2^* + F$, не могут обеспечить возбуждение
B-состояния на уровень $v' > 9$. Заселенности уровней
 $v' = 10-12$ не зависят от давл., тогда как заселенности
уровней $v' < 10$ зависят от давл., т. е. они заселяются
не по механизму обратной преддиссоциации. Получена
оценка энергии диссоциации $D^0(S_2) = 100,95 \pm$

(Фл)

спектры

хемилюмин.
и фотолюмин.

+2



X.1977.0/14

$\pm 0,3$ ккал/моль, согласующаяся с лит. данными. При введении в зону послесвечения добавок H_2O_2 в следовых кол-вах наблюдали Хл и Фл $\text{SO}(B^3\Sigma^- \rightarrow X^3\Sigma^-)$. В спектре Хл наиболее интенсивны полосы последовательностей 2, v'' и 3, v'' . Спектр Фл намного интенсивнее спектра Хл и состоит из последовательностей 0—3, v'' . Наиболее интенсивны переходы с уровней $v' \leq 3$. При введении в зону послесвечения добавок H_2O , H_2O_2 , O_2 и O наблюдали интенсивную Хл SO_2 . Она отсутствовала при введении O_3 . Наиболее интенсивная Хл вызывается добавками атомов O , когда Хл в ~ 100 раз интенсивнее по сравнению с Хл, возникающей при пропускании SO_2 , чистого и разбавленного He , через СВЧ-разряд. Спектр Хл SO_2 является рекомбинац. континуумом ($\text{SO} + \text{O}$), не содержащим полос. Продукты разряда в смеси $\text{CF}_4 + \text{He}$ содержат радикалы CF и CF_2 , обнаруживаемые по спектрам Фл: полосы (1,0), (1,1) и (0,0) перехода $\text{CF}(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi_r)$ и полосы (0,0), (0,1), (0,2) перехода $\text{CF}(B-X)$; спектр Фл CF_2 при 230—430 нм. В NH_3 наблюдали интенсивную Фл $\text{NH}(A^3\Pi_i \rightarrow X^3\Sigma^-)$ при 336 нм.

В. Е. Скурат

1977

S₂

18 Б1564. Хемилуминесцентные реакции атомов серы (3P_2) в криогенных матрицах. Реакция $S+O_2 \rightarrow SO_2(\tilde{a}^3B_1)$. Long S. Randolph, Pimentel George C. Chemiluminescent reactions of sulfur (3P_2) atoms in cryogenic matrices: $S+O_2 \rightarrow SO_2(\tilde{a}^3B_1)$ «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 5, 2219—2220 (англ.)

флуоресценция

Изучены спектры термолуминесценции (Тл), возникающие при нагревании замороженных конденсатов $OCS+O_2+Ar$ состава 1:1:200 после их освещения при 8—11° К светом Hg-лампы среднего давл., вызывающим фотодиссоциацию OCS с образованием атомов $S(^1D)$, к-рые быстро релаксируют в основное состояние $S(^3P_2)$. Во время фотолиза наблюдали лишь слабую флуоресценцию $S_2(B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$, подобную флуоресценции при фотолизе смесей $OCS+Ar$ состав: 1:100. При нагревании освещенных конденсатов тройных смесей выше 13° К наблюдается интенсивный спектр Тл, характерный для перехода $SO_2(\tilde{a}^3B_1 \rightarrow \tilde{X}^1A_1)$. Отождествление этого спектра произведено путем сопоставления со спектром люминесценции SO_2 в газовой фазе,

х. 1977
н 18

а также на основании изотопных сдвигов колебательных полос спектра Тл при замене $^{16}\text{O}_2$ на $^{18}\text{O}_2$. Сделан вывод, что в условиях опытов практически без энергии активации протекает р-ция внедрения атома $S(^3P_2)$ в молекулу O_2 : $S(^3P_2) + \text{O}_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow \text{SO}_2^* \rightarrow \text{SO}_2(\tilde{a}^1B_1, v'=0)$. Экзотермичность первой стадии этой р-ции равна 47925 см^{-1} , т. е. достаточна для возбуждения известных состояний $\tilde{C}^1B_2$, $\tilde{A}^1B_1$ и a^3B_1 с энергиями $T_0 = 42580, 28240$ и 25776 см^{-1} соотв. В. Е. Скурат

S₂

ommuen 5757 1977

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc.,

1977, 22, (17), 5557-70.

(A₁, Y)

S₂

summer 1999

1977

Marsh F. J.; et al.

recovered
J. A. C. 1974,
M
Ches. Phys. Lett
1977, 45, 12, 255-260

S₂

[Omm 5085]

1977

(c)

Mc Gee T. H. et al.
Chem. Phys. Lett. 1977

47 - N 2 : 352-6.

S₂

1977

Wayne F.D. et al

Mol. Phys., 1977, 34

N4, 1141-1155

all. N.

all. N4-III

1978

S₂Chemical
non-aqueous
system

90: 78726u Absorption spectra of sulfur (S₂) molecules in alkali borate glasses. Ahmed, A. A.; El-Shamy, T. M.; Sharaf, N. A. (Glass Res. Lab., Natl. Res. Cent., Cairo, Egypt). *J. Non-Cryst. Solids* 1978, 30(2), 225-8 (Engl). A study of the absorption spectra (200-700 nm) of S contg. alkali borate glasses (alkali = Li, K, Na) showed that S₂ mols. can be formed in alkali borate glasses and that the blue color which is characterized by the absorption band at 585 nm, cannot be ascribed to the S₂ mol. The absorption peak around 275 nm is attributed to the S₂ mol.

C. A. 1978, 90, N10

1978

S₂

Ommuck 7302

89: 188385u Diatomic sulfur fluorescence and excitation spectra in solid argon. Bondybey, V. E.; English, J. H. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(5), 1865-8 (Eng). Study of the S₂ emission and excitation spectra in solid Ar suggests reassignment of the fluorescence. The absorbing B ³Σ_u⁻ state undergoes efficient nonradiative transition into a lower lying electronic state correlating with 2 ³P S atoms, probably the B'' ³Π_u state. This reassignment is consistent with recent observations of the S₂ emission in matrix thermoluminescence expts. Both the B ³Σ_u⁻ and the B'' ³Π_u state are even in the solid strongly perturbed.

Cueksp

gyn. Skidpewo



C.A. 1978, 89 N2R

S_2

4 Д346. Спектры возбуждения и флуоресценции молекул S_2 , изолированных в твердом Ar. Bondy-bey V. E., English J. H. S_2 fluorescence and excitation spectra in solid Ar. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 5, 1865—1868 (англ.)

С высоким разрешением получены спектр испускания в области $23\,500\text{--}26\,500\text{ см}^{-1}$ и спектр возбуждения в области $30\,000\text{--}34\,000\text{ см}^{-1}$ молекул S_2 в Ar-матрице при т-ре 4°K . Пучок молекул S_2 , осаждавшийся на охлаждаемую сапфировую подложку, получался испарением серы при т-ре 450°K с последующим перегревом пара при т-ре 1000°K . Концентрация раствора составляла 1:5000. Спектры возбуждались импульсным лазером на красителе с удвоением частоты. Анализ прогрессии узких полос в спектре возбуждения позволил высказать предположение, что спектр испускания отвечает излучательному распаду состояния $^3\Pi_u$ ($\nu'=0$), а не $B^3\Sigma_u^-$, как считалось ранее. Предложен механизм заселения состояния $^3\Pi_u$, состоящий в последовательном возбуждении молекул S_2 в состояние $B^3\Sigma_u^-$ и колебательной релаксации при сильном смешивании состояний $^3\Pi_u$ и $B^3\Sigma_u^-$. Получено значение времени жизни флуоресценции S_2 ($^3\Pi_u \rightarrow X^3\Sigma_g^-$) в твердом аргоне (200 нсек). Библ. 23.

М. Т.

1978

отметка: 7302

Спектр
возбужде-
ния флуоресценции

Ф.1979, №4

1949

S₂

OM 7302

Спектр
флуоресценции

7 Б128. Спектры флуоресценции и возбуждения S₂ в твердом Ar. Bondybey V. E., English J. H.

S₂ fluorescence and excitation spectra in solid Ar. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 5, 1865—1868 (англ.)

Исследованы спектры возбуждения и флуоресценции молекулы S₂ в Ar-матрице (4 K) в области перехода $V^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^+$. Использована двойная эффузионная ячейка с перегревом паров серы до 1000 K ($T_{исп} = 450$ K). В спектре испускания наблюдается развитая прогрессия нуль фононных линий с интервалом, соотв-щим частоте колебания S₂ в основном состоянии ($X^3\Sigma_g^+$). При нек-рых условиях возбуждения, в частности, при широкополосном возбуждении, у каждой линии появлялась высокочастотная компонента, принадлежащая молекуле ³²S³⁴S. На основании анализа изотопных сдвигов найдено, что полоса 0—0 лежит при 30 636 см⁻¹, и предложенную ранее абс. нумерацию по ν'' следует увеличить на единицу. В спектре возбуждения (30 000—34 000 см⁻¹) наблюдаются две прогрессии —

Х. 1949, № 4

узких линий и широких полос асимметричной формы. Предполагается, что молекула $S_2(B^3\Sigma_u^-)$ претерпевает безызлучательный переход в более низколежащее электронное состояние $B''^3\Pi_u$ (коррелирующее с атомами серы в состоянии 3P). В этом предположении узкие линии в спектре возбуждения интерпретируются как прогрессия по $\nu'S_2(B''^3\Pi_u)$ ($\omega_e' = 346 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e'x_e' = 6 \text{ см}^{-1}$), а широкие полосы — как прогрессия по $\nu'S_2(B^3\Sigma_u^-)$ (значения ω_e' и $\omega_e'x_e'$ согласуются с данными по газовой фазе). Значит, нерегулярность в величине колебательных интервалов объясняют сильным возмущением состояний $B^3\Sigma_u^-$ и $B''^3\Pi_u$. Совпадение положения первой полосы в спектре испускания и первой узкой линии в спектре возбуждения ($30\,633 \text{ см}^{-1}$) свидетельствует о том, что испускание происходит из состояния $B''^3\Pi_u$ ($\nu=0$). Определено время жизни флуоресценции S_2 (200 нсек).

В. М. Ковба



S₂

Drowart J. at el

1948

Adv. Mass. Spectrom., 1948, 7A,
647-50.

J, No

(CS₂ cw) III

S₂

1978

Fournier Y. et al
Ber. Bunsenges. Phys. Chem.
1978, 82(1), 100-1 (Eng)

спектр
термохимический
элемент

с.в. СД - 14

S₂

S₂Xe

SO₂

creep
Heuuo

(72) ☒

C.A. 1978, 88, N2C

88: 200-11-1s Chemiluminescent matrix reactions of atomic oxygen, sulfur, and O(³P) + H₂S. Smardzewski, Richard R. (Chem. Div., Nav. Res. Lab., Washington, D. C.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(6), 2878-88 (Eng). Optical multichannel techniques were used to analyze the visible chemiluminescence generated by diffusion-controlled warmup (8 → 20 K) of sep. UV-photolyzed inert gas matrixes contg. O₃, H₂S, H₂S + O₂, and O₃ + H₂S mols. O atoms were obsd. to diffuse and recombined in solid Ar at ~17 K to produce the intense Herzberg I band system of mol. O₂ (A → X) which was also obsd. in Kr though not in Xe matrixes. The lack of any detectable emission in Xe was attributed to premature diffusion and depletion of at. O. prior to diffusion-controlled warmup. Matrix diffusion and recombination of S atoms produced intense S₂ emission (B → X) in all 3 matrixes (Ar, Kr, Xe). Long, structured vibrational progressions (0, v'') were obsd. in Ar and Kr, while a broad, relatively structureless emission was obsd. in Xe. Suggested mechanisms for this latter effect include such processes as vibrationally unrelaxed fluorescence and/or S₂^{*}-Xe van der Waals complex formation. Diffusion of S atoms in matrixes contg. traces of mol. O₂ produced the phosphorescent emissions of SO₂ (a → X) which appeared to be orders of magnitude more intense than the H₂ emissions. O atoms diffused and reacted with H₂S mols. in dil. Ar matrixes at ~14 K, thereby generating SO₂ phosphorescence (a → X) as well as 2 emission systems of

1978

lesser intensity (520-675 nm), each with an approx. vibrational spacing of $\sim 1040\text{ cm}^{-1}$. Suggested emitter(s) responsible for these latter chemiluminescent systems are presented.

Dimmucc 8801

1973

S₂

92: 49688u Near-infrared emissions from the ${}^1\Delta_g$ and ${}^1\Sigma_g^+$ states of molecular sulfur. Barnes, I.; Becker, K. H.; Fink, E. H. (Gesamthochsch., 5600 Wuppertal, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 67(2-3), 314-17 (Eng). In a discharge flow system O₂ (${}^1\Delta_g$) sensitized chemiluminescence was obsd. from the 2 low lying ${}^1\Delta_g$ and ${}^1\Sigma_g^+$ states of S₂ in the wavelength region 1.0 to 1.8 μ m. The hitherto unknown energies of the 2 states were 5730 ± 20 cm⁻¹ and 7961 ± 15 cm⁻¹, resp. Due to the near energy resonance ($\Delta E \approx 79$ cm⁻¹) between the ${}^1\Delta_g$ state of O₂ and the ${}^1\Sigma_g^+$ state of S₂, effective energy exchange between both mols. occurs.

4.17.

C. A. 80.92, N6

1978

 S_2 Se_2 Te_2

7 Б108. Масс-спектрометрическое изучение молекулярных пучков с отклонением в неоднородном магнитном поле. Применение к S_2 , Se_2 и Te_2 . Khodoyev Yu. S., Pantchenkov I. G., Tchepik V. V., Tchekhovskoi D. V., Gorokhov L. N. Mass spectrometric study of molecular beams deflected by inhomogeneous magnetic field. Application to S_2 , Se_2 and Te_2 . «Adv. Mass. Spectrom. Vol. 7A. Proc. 7th Int. Mass Spectrom. Conf., Florence, 1976». London, 1978, 684—690 (англ.)

Магнитные св-ва молекул в зависимости от их электронных состояний изучены с помощью отклонения молек. пучков в неоднородном магнитном поле с последующей регистрацией профилей пучков квадрупольным масс-анализатором. Измерения выполнены для молекул S_2 , Se_2 и Te_2 . Приведены характеристики от-

масс-спектр.
молекулярные пучки.

(+2) ☒

Х. 1980 № 7

клонения (расфокусировки — P) молекулярных пучков, как функции градиента магнитного поля и профили пучков, нормализованные в соответствии с калибровкой по чувствительности. Для S_2 молекул наблюдалась линейная зависимость P при малых градиентах поля, с повышением градиента наклон кривой P уменьшался, но насыщения не наблюдалось. Для молекул Se_2 показана линейная зависимость P во всем диапазоне градиентов поля. Обсуждаются причины расхождения экспериментальных и расчетных результатов для Se_2 и сложности интерпретации измерений Te_2 . М. Туркина,

S₂

1979

4 Д820. ИК-излучение из состояний $^1\Delta_g$ и $^1\Sigma_g^+$ молекулы S₂. Near-infrared emissions from the $^1\Delta_g$ and $^1\Sigma_g^+$ states of S₂. Barnes I., Becker K. H., Fink E. H. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 2-3, 314-317 (англ.)

E_i, м.м.

В проточной разрядной системе наблюдали сенсibilизированную молекулами O₂($^1\Delta_g$) ИК-хемиллюминесценцию (1,0 и 1,8 мк) из двух низколежащих состояний $^1\Delta_g$ и $^1\Sigma_g^+$ молекулы S₂. Определены до сих пор неизвестные энергии этих состояний: (5730 ± 20) см⁻¹ и (7961 ± 15) см⁻¹ соответственно. Отмечено, что вследствие близости энергии состояний O₂($^1\Delta_g$) и S₂($^1\Sigma_g^+$) ($\Delta E \approx 79$ см⁻¹), при столкновении молекул O₂($^1\Delta_g$) с S₂ наблюдается эффективный перенос энергии. В. С. Иванов

ф. 1980 № 4

52

12 Б131. Эмиссия S_2 в ближней инфракрасной области из состояний ${}^1\Delta_g$ и ${}^1\Sigma_g^+$. Barnes I., Becker K. H., Fink E. H. Near-infrared emissions from the ${}^1\Delta_g$ and ${}^1\Sigma_g^+$ states of S_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 2—3, 314—317 (англ.)

Пучок гелия, содержащий молекулы S_2 , полученные в МВ-разряде из S_2Cl_2 или SCl_2 , смешивался с током кислорода, содержащим 5% O_2 в метастабильном состоянии ${}^1\Delta_g$. Наблюдавшееся в этой системе испускание в области 1—1,8 мкм регистрировалось с помощью германиевого детектора, охлаждаемого жидк. азотом.

И. К. Сидяков.

Спектр отнесен к двум низколежащим состояниям S_2 (${}^1\Delta_g$ и ${}^1\Sigma_g^+$) с $T_e = 5730 \pm 20$ и 7961 ± 15 см $^{-1}$ соотв.

М. П.

а. 1980, № 2

Обсужден механизм р-ции: $O_2(^1\Delta_g) + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow$
 $\rightarrow O_2(^1\Sigma_g^+) + O_2 + \Delta E = 2643 \text{ см}^{-1}$; $C_2(^1\Delta_g) + SO(^1\Delta_g) \rightarrow$
 $\rightarrow O_2(^1\Sigma_g^+) + SO + \Delta E = 626 \text{ см}^{-1}$; $O_2(^1\Delta_g) + SO(^1\Delta_g) \rightarrow$
 $\rightarrow O_2 + SO(^1\Sigma_g^+) + \Delta E = 3278 \text{ см}^{-1}$; $2SC(^1\Delta_g) \rightarrow SO(^1\Sigma_g^+) +$
 $+ SO + \Delta E = 1261 \text{ см}^{-1}$; $O_2(^1\Delta_g) + S_2 \rightarrow O_2 + S_2(^1\Sigma_g^+) + \Delta E =$
 $= -79 \text{ см}^{-1}$; $S_2(^1\Delta_g) + S_2(^1\Delta_g) \rightarrow S_2(^1\Sigma_g^+) + S_2 + \Delta E =$
 $= 3499 \text{ см}^{-1}$; $S_2(^1\Delta_g) + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow S_2(^1\Sigma_g^+) + O_2 + \Delta E =$
 $= 5651 \text{ см}^{-1}$; $O_2(^1\Delta_g) + S_2 \rightarrow O_2 + S_2(^1\Delta_g) + \Delta E = 2152 \text{ см}^{-1}$;
 $S_2(^1\Sigma_g^+) + M \rightarrow S_2(^1\Delta_g) + M + \Delta E = 2231 \text{ см}^{-1}$; Отмечено,
 что подобное изучение интенсивностей полос в спектре
 и их зависимости от состава смеси позволит точнее
 установить вклад различных процессов.

Л. В. Серебренников

S₂

1979

91: 96995f Photoion mass spectrometry and photoelectron spectroscopy of high-temperature vapors. Berkowitz, J. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL USA). Report 1978, CONF-780941-4, 25 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Energy Res. Abstr. 1979, 4(9), Abstr. No. 24087. PIMS and PES were used to study the bond energies and mol. structure in the mols. S₂, AlCl, AlCl⁺, InCl, TlCl, TlCl⁺, TlF, Tl₂F₂, KF, KF⁺, LiCl, and LiCl⁺.

смф крппа

Do

(+10) ☒



C.A., 1979, 91, N/12

Обзор: Фотоионизация

1979

12 Б120. Фотоионизационная масс-спектрометрия и фотоэлектронная спектроскопия высокотемпературных паров. Berkowitz J. Photoionization mass spectrometry and photoelectron spectroscopy of high temperature vapors. Characterization of High Temperature Vapors and Gases. Vol. 1. Proc. 10th Mater. Res. Symp., Gaithersburg, Md, Sept. 18—22, 1978. «U. S. Dep. Commer. Nat. Bur. Stand. Spec. Publ.», 1979, № 561/1, 757—769 (англ.)

Обзор работ автора. Особое внимание уделено определению энергии диссоциации. Приведены примеры изучения и молекул с ковалентной связью (S_2 , O_2 , Se_2 , Te_2) и молекул с ионной связью (галогениды элементов 3-й группы и щел. металлов). Рассмотрен метод определения по данным фотоэлектронных спектров молек. структуры на примере Tl_2F_2 . Библи. 14.

О. А. Басченко

(фотоиониз.)

(45) ☒

Х. 1980. N12

1979

S₂

8 Д296. Фотоионизационная масс-спектрометрия и фотоэлектронная спектроскопия высокотемпературных паров. Photoionization mass spectrometry and photoelectron spectroscopy of high temperature vapors. Berkowitz J. — Characterization of High Temperature Vapors and Gases. Vol. 1. Proc. 10th Mater. Res. Symp., Gaithersburg, Md, Sept. 18—22, 1978. — «U. S. Dep. Commer. Nat. Bur. Stand. Spec. Publ.», 1979, № 561/1, 747—769. Discuss., 769 (англ.)

фото-
ионизация
структура

Статья обзорного характера. Показаны преимущества фотоионизационной масс-спектрометрии при определении энергии диссоциации труднолетучих соединений. На примере S_2 , $AlCl$, $InCl$, $TlCl$, Tl_2F_2 подробно проиллюстрированы возможности совместного исследования методом фотоэлектронной спектроскопии и фотоионизационной масс-спектрометрии электронной, геометрич. структуры, процессов диссоциативной фотоионизации труднолетучих соединений.

Ю. В. Чижов

(+4) X

Ф 1980 N 8

S₂

1979

11 Д972. Индуцированная N-лазером флуоресценция $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ молекул S₂. Fukumoto Takeshi, Yasuda Yukio, ~~Sokabe~~ Noburu. Nitrogen-laser-induced $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ fluorescence of S₂ molecules. «Mem. Fac. Eng. Osaka City Univ.», 1979, 19, 289—295 (англ.)

Исследована флуоресценция молекул S₂, возбуждаемая N₂-лазером (300 квт, 5 нсек). В спектре флуоресценции идентифицирована прогрессия $B^3\Sigma_u^-$, $v'=2 \rightarrow X^3\Sigma_g^-$, $v''=4 \div 21$. Непростая структура полос спектра флуоресценции свидетельствует о том, что, по крайней мере, две вращательных линии полосы поглощения (2,4) молекулы S₂ перекрываются с линиями N₂-лазера. Подробно описана конструкция использованного N₂-лазера.

В. С. Иванов

спектр
флуоресценции

Ф. 1979, 11

S₂

1978

91: 184455k Nitrogen-laser-induced $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ fluorescence of sulfur (S_2) molecules. Fukumoto, Takeshi; Yasuda, Yukio; Sokabe, Noburu (Dep. Appl. Phys., Osaka City Univ., Osaka, Japan). *Mem. Fac. Eng., Osaka City Univ.* 1978, 19, 289-95 (Eng). Fluorescence of S_2 mols. optically pumped by a N_2 laser of 300-kW peak power and 5-ns pulse width was investigated. The resonance v' progression of the $B^3\Sigma_u^-, v' = 2 \rightarrow X^3\Sigma_g^-, v'$ transition was obsd. with v'' extending from 4 to 21. A fairly simple structure of the obsd. fluorescence spectrum indicates that not more than 2 rotational lines in the (2,4) absorption band overlap the N_2 laser lines. Detailed description of the constructed N_2 laser is given.

cheap
preparation

C.A. 1079, 91 N22

S_2, S_2^+

Berkowitz J.,

1979

Photoionization mass spectro-
metry and photoelectron spectro-
scopy of high temperature vapors.
10th Materials Research Sympo-
sium on characterization of High
temperature, vapors and gases.
NBS Special Publication 561.
Volume 1, 1979, 757-790.
(Уступка)

номени.
Кривке,
J

1979

S₂(Ae⁻)

92: 99849t Energetics of the charge-stripping process from negative ions. A new method for the estimation of electron affinities. Howe, Ian; Bowie, John H.; Szulejko, Jan E.; Beynon, John H. (R. Soc. Res. Unit, Univ. Coll., Swansea, Wales SA2 8PP). *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1979, (22), 983-4 (Eng). The electron affinity of a neutral mol. X is calcd. by deducting its ionization potential from the difference between the translational energies of incident high-energy X⁻ and the product X⁺ produced by glancing collision of X⁻ with a neutral mol. Ion translational energy differences of 5 examples, e.g. X = S or CN, calcd. by this method agreed within 0.45 eV of values calcd. from literature data. The electron affinity of S₂ was calcd. by this technique to be 2.15 eV from 8 detns. of ion translational energy differences.

C.A.B.S.O. 92, N12

Ожигин 7936

1979

S₂

8 Д620. Хемилюминесценция S₂ в твердом аргоне. Lee Yuan-Pern, Pimentel George C. Chemiluminescence of S₂ in solid argon. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 2, 692—698 (англ.)

M.N.

Исследовалась термолюминесценция образцов OCS/Ar, CS₂/Ar OCS/Kr, OCS/SF₆ (M/R=100) предварительно подвергнутых фотолизу при t-ре 8° K. Спектральные наблюдения проводились в области 5500—9000 Å. Кроме ранее наблюдаемой хемилюминесценции B(B'')→X молекулы S₂, обнаружены две новые последовательности переходов: слабая в области 5580—6890 Å и сильная в области 6680—8750 Å. Из анализа изотопич. сдвигов для ОС³⁴S получили следующие значения спектроскопич. параметров: $\nu_{00}=15\,750\pm 10$ см⁻¹, $\omega_e=699\pm 5$ см⁻¹ и $\omega_e X_e=2,6\pm 1$ см⁻¹ для переходов в области 6680—8750; $\nu_{00}=20\,870\pm 30$ см⁻¹, $\omega_e=724\pm 6$ см⁻¹ и $\omega_e X_e=2,9\pm 1$ см⁻¹ для переходов в области 5580—6890 Å. Проведено отождествление эмиссии в областях 6680—8750 и 5580—6890 Å переходам C'Σ_u⁻→a¹Δ_g и A'³Δ_u→X³Σ_g⁻ молекулы S₂ соответственно. Показано, что C'Σ_u⁻ — состояние (T₀=20250±200 см⁻¹) молекулы S₂ лежит ниже A³Σ_u⁺ и A³Δ_u-состояний.

В. В. Хмелевский

9797918

oswmuu 7936 1979

S₂

(u, n)

oswmuu 7936

129819m Chemiluminescence of diatomic sulfur in solid argon. Lee, Yuan-Pern; Pirmentel, George C. (Chem. Dep., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(2), 892-8 (Eng). On slow warming of previously photolyzed matrix samples of OCS/Ar, CS₂/Ar, OCS/Kr, and OCS/SF₆ (M/R = 100), the B (B'') → X chemiluminescence of S₂ is obsd., as reported earlier. In addn. 2 new progressions were recorded, a weak progression between 5580-6890 Å and a stronger one between 6680-8750 Å. With OC³⁴S, the 6680-8750 Å progression displayed isotopic shifts that allow deduction of $\nu_{\infty} = 15750 \pm 10$ cm⁻¹, $\omega''_e = 699 \pm 5$ cm⁻¹, and $\omega_e x''_e = 2.6 \pm 1$ cm⁻¹. Similarly, the weaker 5580-6890 Å progression corresponds to $\nu_{\infty} = 20370 \pm 30$ cm⁻¹, $\omega''_e = 724 \pm 6$ cm⁻¹, and $\omega_e x''_e = 2.9 \pm 1$ cm⁻¹, with a less favored, alternative vibrational assignment that gives $\nu_{\infty} = 21601 \pm 30$ cm⁻¹, $\omega''_e = 731 \pm 6$ cm⁻¹, and $\omega_e x''_e = 2.9 \pm 1$ cm⁻¹. These spectroscopic parameters point to assignments of the c ¹Σ_u⁺ → a ¹Δ_g and A' ³Δ_u → X ³Σ_g⁺ transitions of S₂ for the 6680-8750 Å and 5580-6890 Å emissions, resp. These are the first observations of these transitions of S₂ and one of them provides for first direct spectroscopic information illustrating that the c ¹Σ_u⁺ and A' ³Δ_u states, as is the case for O₂.

C.A. 1979, 90, N/16

оттиса 7936

1979

17 Б1188. Хемилюминесценция S_2 в твердом аргоне. Lee Yuan-Pern, Pimentel George C. Chemiluminescence of S_2 in solid argon. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 2, 692—698 (англ.)

В УФ-, видимой и ближней ИК-области измерены спектры хемилюминесценции S_2 , изолированной в аргонной, криптоновой и SF_6 -матрицах. Молекулы S_2 образовались в результате фотолиза исходной матрицы, содержащей OCS ($^{32,34}S$) или CS_2 . В спектре матрицы после возбуждения УФ-светом ($T=8$ K) присутствует только система $B^3\Sigma_u^-(B'^3\Pi_u)-X^3\Sigma_g-S_2$. При отжиге матрицы в спектре появляются еще две, впервые обнаруженные, системы S_2 , отнесенные к переходам $A'^3\Delta_u(v'=0)-X^3\Sigma_g^-(v''=4-9)$ (5580—6890 Å, слабые полосы) и $c^1\Sigma_u^-(v=0)-a^1\Delta_g(v''=1-6)$ (6680—8750 Å, интенсивные полосы). Средн. значения $\nu_{00}, \omega_c, \omega''_c, x''_c$ (в cm^{-1}): переход $C-a$ 15750 ± 10 , 699 ± 5 , $2,6 \pm 1$, переход $A'-X$ 20870 ± 30 , 724 ± 6 , $2,9 \pm 1$. При повышении т-ры наблюдается сдвиг всех полос обеих прогрессий приблизительно на 240 см^{-1} в низкочастотную область.

м.н.; Е.

Р.1979, N17

что объясняется изменениями в окружении молекулы S_2 при нагреве матрицы. Рассмотрена система низколежащих электронных состояний S_2 . Состояние $c^1\Sigma_u^-$ ($20250 \pm 200 \text{ см}^{-1}$), согласно полученным данным, лежит ниже, чем состояния $A^3\Sigma_u^+$ и $A'^3\Delta_u$, (все три состояния соответствуют электронной конфигурации $\sigma_g^2\pi_u^3\pi_g^{*3}$ — аналогично расположению состояний молекулы O_2). Обсуждается механизм возбуждения указанных систем полос.

В. М. Ковба



S₂

Commerce 8901

1979

Okwada K.

Cur. no. 1.

Spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-54

1079

S₂

10 Д448. Спектр двухатомной серы в миллиметровом диапазоне. Pickett Herbert M., Boyd Timothy L. The millimeter wavelength spectrum of diatomic sulfur. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 1, 50—57 (англ.)

В диапазоне 79—150 Гц измерен микроволн. спектр молекулы S₂. Идентифицированы линии 6 переходов с $J \leq 11$ в основном колебательном состоянии. Анализ спектра выполнен совместно с данными по спектру ЭПР и определены значения вращательной и центробежной постоянных ($B_0 = 8831,8676$ МГц, $D_0 = 5,9$ кгц), g -факторов и постоянных спин-вращательного и спин-спинового взаимодействий.

М. Р. Алиев

М. П.

Ф. 1979, № 10

S₂

Библия

8124

1979

20 Б215. Спектр двухатомной серы в области миллиметровых длин волн. Pickett Herbert M., Boyd Timothy L. The millimeter wavelength spectrum of diatomic sulfur. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 1, 53—57 (англ.)

В миллиметровой области исследованы спектры магнитно-дипольных переходов S₂ в газ. фазе. Определены параметры вращательной и ТС спектров и вычислены константы, связанные с ЭПР переходами.

Из резюме

М. В. Стекир

2. 1979, 120

S₂

mmmw 8124

1979

M.N.

90: 159495v The millimeter wavelength spectrum of diatomic sulfur. Pickett, Herbert M.; Boyd, Timothy L. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, Tex.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(1), 53-7 (Eng). The gas phase spectrum of S₂ was detected in the mm wavelength region. The rotational and fine structure parameters obtained are $B_0 = 8831.8676 \pm 0.006$ MHz, $D_0 = 5.9 \pm 0.7$ kHz, $\lambda_0 = 353040 \pm 27$ MHz, and $\gamma_0 = -200.9 \pm 0.7$ MHz. The reanal. of EPR data yielded $g_z + 1.18g_n = 2.0021 \pm 0.0014$ and $g_z - g_{\perp} = -0.0089 \pm 0.0017$. On the basis of the frequencies obtained in this work, it was also possible to exclude the assignment of several interstellar emissions to S₂.

C.A. 1979, 90N26

1979

S₂

91: 114785u Pure sulfur discharges and associated spectra. Peterson, Drew A. (Sch. Eng., Air Force Inst. Technol., Wright-Patterson AFB, OH USA). Report 1978, AFIT/GEP/=PH/78D-10; Order No. AD-A064762, 58 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1979, 79(13), 96. Stable, glow discharges in pure S and He/S were achieved for the 1st time, at operating temps. between 0 and 250°. This result indicates that S₈ is broken directly into S₂ and that temps. <600° can be used. The S₂ (B-X) band emission was obsd. in great detail, and through anal. of these spectra the ground electronic state constns. were detd. to the 4th order.

D.A. Cleeve

C.A., 1979, Q1, N14

S₂

1979

Saito K. et al

J. Sci. Hiroshima Univ.
1979, A43, v2, 119-133.



(sol. CS₂; III)

спектр
испуск.

1979

S₂

9 Д160. Двухатомная сера. Низколежащие связанные молекулярные электронные состояния S₂. Swore William C., Lee Yuan-Pern, Schaefer Henry F. III. Diatomic sulfur. Low lying bound molecular electronic states of S₂. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 2, 947—953 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны потенц. кривые 13 низколежащих электронных состояний молекулы S₂. Базис состоял из сгруппированного набора [6s4p1d] Данинга, дополненного поляризац. ф-циями типов s и p. На стадии КВ были включены все однократно и двукратно возбужденные конфигурации, возникающие в пространстве валентных МО. Для всех связанных состояний потенц. кривые приближены полиномами 4-ой степени по пяти рассчитанным точкам, и далее по ф-лам Данхэма определены спектроскопич. постоянные. Впервые найдено связанное состояние ¹Π_u, лежащее на 37 000 см⁻¹ выше основно-

расчет
потенц.
кривых

ср. 1979, № 9

го состояния S_2 и имеющее с ним общий диссоциационный предел. Для состояний с 1P_g , с $^1\Sigma_u^-$ и $B^3\Pi_u$ также впервые получены энергии возбуждений и спектроскопич. постоянные. При расчетах на больших межъядерных расстояниях использована ф-ла Давидсона, позволяющая избежать ошибки, вносимой в корреляц. энергию несвязными диаграммами в ограниченном методе КВ.

А. Дементьев

(RE)

1979

S_2

16 Б27. Двухатомная молекула серы. Низколежащие связанные электронные состояния S_2 . Swore William C., Lee Yuan-Pern, Schaefer Henry F. III Diatomic sulfur: Low lying bound molecular electronic states of S_2 . «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 2, 947—953 (англ.)

расчет
электр.
состояний

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия проведены расчеты 13 электронных состояний молекулы S_2 , соответствующие в приближении Хартри—Фока четырём электронным конфигурациям, с различным заполнением восемью электронами МО $5\sigma_g$, $2\pi_u$, $2\pi_g$ и $5\sigma_u$. Базисный набор составлен из гауссовых функций Хузинаги — Данинга, дополненных поляризац. d -орбиталями. Отмечено, что без поляризац. функций невозможно правильно описать связанное основное состояние молекулы, тогда как добавление диффузных орбиталей не является необходимым. В методе конфигурац. взаимодействия учтены для каждой основной конфигурации все одно- и двукратно возбужденные конфигурации с участием 12 валентных электронов. В среднем в каждом расчете включалось около 3000 конфигураций. Тем не менее, полученные оценки энергий диссоциации связанных состояний признаны ненадежными из-за недостаточного учета конфигурац.

Х. 1979, № 6

взаимодействия. С помощью полиномиальной аппроксимации вычисл. значений энергии определены спектроскопич. постоянные r_e , B_e , ω_e и d_e . При сопоставлении результатов с эксперим. данными сделано заключение, что средняя погрешность теор. величин для основных частот колебаний составляет 10%, а для равновесных межъядерных расстояний 11%. Применение поправки Давидсона на неучтенную корреляц. энергию улучшает согласие с экспериментом. Найдено, что не исследованное ранее экспериментально состояние $^1\Pi_u$ является связанным. Уточнены параметры связанных состояний $e^1\Pi_g$, $s^1\Sigma_u^-$ и $B''^3\Pi_u$, необходимые для правильной интерпретации результатов спектроскопич. экспериментов.

А. В. Немухин

1979

90-129636z Diatomic sulfur: low-lying bound molecular electronic states of S_2 . Swope, William C.; Lee, Yuan-Pern; Schaefer, Henry F., III (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(2), 947-53 (Eng). Results are given of SCF and CI type calcs. on 13 low-lying electronic states of S_2 . The basis set was double zeta quality augmented with polarization functions. The CI space for each electronic state consisted of all configurations constructed from single and double excitations of electrons from the valence orbitals of the Hartree-Fock configuration. There are several significant findings. The discovery is reported of a previously unobsd. and bound ${}^1\Pi_u$ state which lies $\sim 37,000$ cm^{-1} above the ground state. This state dissocs. to 2 ground state S atoms. New predictions are given of excitation energies and properties

of the 3 states $e^1\Pi_g$, $e^1\Sigma_u$, and $B^1\Pi_u$. These states were suspected or known to be bound, but exptl. detd. properties were uncertain.

C.A. 1979, 90, N16

Ref. mix
bcccc

S₂

S₂

ommueu 9638

1980

список
испытаний.
М.П.
номеру,
испытание

Abouaf-Marguin L;
etal

Chem. Phys, 1980, 48,
244 - 282

1980

S₂

Franck-Condon

F-R

94: 182912v Franck-Condon factors for the B-X system of diatomic sulfur. Anderson, William R.; Allen, John E., Jr.; Crosley, David R. (Ballistics Res., Army Armament Res. Dev. Command, Aberdeen Proving Ground, MD USA). Report 1980, ARBRL-TR-02262, AD-E430527; Order No. AD-A092376, 43 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1981, 81(7), 1334. A frequency doubled tunable dye laser was used to selectively excite individual vibrational levels within $v = 2$ and 6-9 of the B-state of S₂. Measurements of the intensity in emission of all the terms returning to ground state vibrational levels permit the detn. of abs. Franck-Condon factors. Combined with previous studies, this work completes the set of Franck-Condon factors for bound-bound transitions within the B-X system.

C.A. 1981, 94, N22

Оттиск 9938

1980

52

22 Б912. Процессы преддиссоциации и релаксации $B^3\Sigma_u^-$ -состояния S_2 в матрице. Bondybey V. E., English J. H. $B^3\Sigma_u^-$ predissociation and relaxation processes in matrix isolated S_2 . «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3113—3122 (англ.)

предис-
социации

Методом лазерной УФ-флуоресценции исследуются процессы в состоянии $B^3\Sigma_u^-$ молекул S_2 , находящихся в матрице благородных газов. $B^3\Sigma_u^-$ -состояние заселяется в результате последовательности процессов преддиссоциации и рекомбинации нескольких возбужденных электронных состояний. Наблюдаемые спектры аналогичны спектрам, к-рые наблюдаются в экспериментах по исследованию термолюминесценции. Анализ спектров излучения и лазерного возбуждения дают значения спектроскопич. констант нескольких электронных состояний S_2 в тв. Ne. Скорость колебательной релаксации $B^3\Sigma_u^-$ -состояния характеризуется очень сильной зависимостью от т-ры и возрастающей эффективностью релаксации при уменьшении массы атомов кристалла. Предполагается, что релаксация в S_2 происходит в результате прямых многофононных процессов и, что вращение молекулы не играет существенной роли. В. И. З.

ХИЛ - 2047

Х. 1980
N 23

S₂

XII-2047
Оттиск 9938

1980

12 Д365. Преддиссоциация состояния $B^3\Sigma_u^-$ и процессы релаксации изолированных в матрице молекул S_2 . $B^3\Sigma_u^-$ predissociation and relaxation processes in matrix isolated S_2 . Bondybey V. E., English J. H. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 5, 3113—3122 (англ.)

преддиссоц.
спектр
в матрице

В УФ-, ближней ИК- и красной областях спектра исследовано испускание и поглощение молекул S_2 , изолированных в Ne-, Ar-, Kr- и Xe-матрицах. Обнаружено, что спектры, возникающие при возбуждении состояния $B^3\Sigma_u^-$ молекулы S_2 и связанные с преддиссоциационно-рекомбинационными процессами, очень схожи со спектрами, наблюдаемыми в экспериментах по термолюминесценции. Определены спектроскопич. постоянные для ряда электронных состояний S_2 . Рассмотрены процессы колебательной релаксации $S_2(B^3\Sigma_u^-)$ и высказано предположение, что релаксация в $S_2(B)$ происходит посредством прямых многофононных процессов. Библ. 43.

А. В. Н.

Ф. 1980 N 12

Ommen 9938

1980

S₂

92: 206434c B³Σ_u⁻ predissociation and relaxation processes in matrix-isolated diatomic sulfur. Bondybey, V. E.; English, J. H. (Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(5), 3113-22 (Eng). Spectroscopy of S₂ in rare gas solids is re-exam'd. Excitation of the B³Σ_u⁻ state populates by predissocn.-recombination sequence several excited electronic states, which can then be characterized by their fluorescence spectra. The obsd. spectra are quite analogous to those obsd. in thermoluminescence expts. Anal. of the emission and laser excitation spectra yields the spectroscopic consts. of several electronic states of S₂ in solid Ne. The data provide "direct evidence that the lowest a¹Δ_g state is located in this matrix 4395 cm⁻¹ above the ground state. Vibrational relaxation within the B³Σ_u⁻ state was exam'd. It exhibits a very steep rate dependence on temp. and enhanced relaxation efficiency with decreasing mass of the host atoms. Relaxation in S₂ may be due to a direct multiphonon process, and unlike relaxation in light hydride mole., the mol. rotation is unimportant.

frequency

X11-2047

CA 1980 92 N24

S₂

1980

7 Д1263. Изучение суперлюминесценции в S₂(³Σ⁻_u—³Σ⁻_g) при накачке N₂-лазером. Study of superfluorescence in S₂(³Σ⁻_u—³Σ⁻_g) produced by N₂ laser pumping. Girardeau-Montaut J.-P., Moreau G. «Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng.», 1980, 236: Eur. Conf. Opt. Syst. and Appl., Utrecht, Sept. 23—25, 1980, 345—349 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

³Σ⁻_u—³Σ⁻_g,

суперлюминесценция

Сообщается о наблюдении суперлюминесценции на излучательном переходе ³Σ⁻_u—³Σ⁻_g молекул S₂ при накачке азотным импульсным лазером. Излучение азотного лазера, содержащее ~50 линий в спектральном интервале 336,5—337,14 нм, возбуждает одновременно не-

ф. 1983, 18, № 7

сколько переходов молекулы S_2 ($v''=2, 3, 4, — v'=0, 1, 2$). Идентифицированы наблюдаемые линии суперлюминесценции молекул S_2 и изучены зависимости интенсивности отдельных компонент суперлюминесценции от т-ры и от энергии возбуждения. Несмотря на мешающее влияние реабсорбции излучения молекулами S_3 , квантовый выход суперлюминесценции составил $\sim 3\%$. Отмечено, что оптимизация параметров накачки и геометрии активной среды позволит значительно улучшить характеристики процесса преобразования излучения.

В. С. З.

S₂

M.N.

93: 34344a UV absorption and fluorescence spectroscopies of sulfur vapor with determination of the vibrational constants of S₂ molecules. Kong, Hong Jin; Lee, Sang Soo (Dep. Basic Sci., Korea Adv. Inst. Sci., Seoul, S. Korea). *J. Korean Phys. Soc.* 1980, 13(1), 21-9 (Eng). The temp. dependent absorption spectroscopy of S vapors, a mixt. of S_x ($x = 2, 3, \dots, 8$), was carried out in the temp. range from 400 up to 900°. At temps. above the b.p. of S, a new absorption takes place in a broad spectral region, 3600 - 4400 Å. This absorption, due to S_x ($x = 3, 4, \dots, 8$), increases with temp. up to $\approx 700^\circ$, then starts decreasing, and finally at 900° it disappears almost completely. Meanwhile the broad band spectrum due to the S₂ mol. and located around $\lambda = 3340$ Å remains const. through these temps. The S₂ band spectrum is thus identified without ambiguity in the absorption spectrum obtained at 800°, and from the 8 obvious absorption peaks measured the vibrational constns. are detd. by the least square method. In this detn., the rotational energy of the mol. at the higher temp. is taken into account. The constns. thus obtained are $T_0 = 31,852 \text{ cm}^{-1}$, $w_0'' = 709.3$, $a_0''x_0'' = 0.6375$, for $X^3\Sigma_g^-$, and $w_0' = 467.5$, $a_0'x_0' = 12.04$, for $B^3\Sigma_g^-$.

1980

CA 1980 93 N 4

1980

S₂

2 Д545. Метод измерения вращательной температуры двухатомной серы, возбужденной в микроволновом разряде. Technique for measuring rotational temperature of microwave excited diatomic sulfur. Merchant V. E., Andrews M. L. «Appl. Opt.», 1980, 19, № 18, 3113—3117 (англ.)

Измерен спектр излучения молекулы S₂, возбужденной в безэлектродном микроволновом разряде. Изложена процедура определения вращательной т-ры молекул в разряде по сопоставлению измеренных и вычислен-

Спектр
излучения

ных неразрешенных вращательных контуров колебательных полос электронного перехода, которая применена к полосе $v^1=8-v''=0$ электронного перехода $B^3\Sigma^--X^3\Sigma^-S_2$. Показано, что при определенных условиях вращательную т-ру можно оценить по ширине вращательного контура колебательной полосы.

М. Р. Алиев

1981. №2

S₂

Omni 10486

1980

V 93: 158413s Stable pure sulfur discharges and associated spectra. Peterson, D. A.; Schlie, L. A. (Air Force Weapons Lab., Kirland AFB, NM 87117 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(4), 1551-66 (Eng). Stable, self-sustained discharges in pure S and He-S mixts. were achieved for the 1st time, at operating temps. between 0 and 250°. Very intense S₂ (B-X) band emission was obsd. No other at. or mol. emission was detected. This result indicates that S₈ mols. are broken directly into S₂ mols. and thus provides the potential for highly efficient discharge pumping of the (B-X) S₂ laser transition at much lower operating temps. (<300°) than previously thought. The S₂ (B-X) band emission was examd. in great detail, and through the anal. of these spectra, the ground electronic state spectroscopic consts. were detd. to the 4th order. These are $\omega_e'' = 727.848$ cm⁻¹, $\omega_e x_e'' = 3.0195$ cm⁻¹, $\omega_e y_e'' = 4.196 \times 10^{-3}$ cm⁻¹, $\omega_e z_e'' = 9.77 \times 10^{-6}$ cm⁻¹. The 1st observation of the B''³ π_u -X₃ Σ_g^- system transitions was also made, and tentatively identified. Potential energy curves for both the X₃ Σ_g^- and B³ Σ_u^- states are reported.

U. N.

C.A. 1980, 93, N16

1980

S₂

3 Д621. Исследование параметров стабильного разряда в чистой сере и его спектра. Stable pure sulfur discharges and associated spectra. Peterson D. A., Schlie L. A. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 4, 1551—1566 (англ.)

Ш.П.

Впервые получен и исследован стабильный при низких т-рах электрич. разряд в парах чистой серы. Разряд получен в импульсном и непрерывном режимах при т-ре 0 до 250°С, что соответствует давлению 10⁻⁵—10⁻⁸ мм рт. ст. Обнаружено, что в таком разряде происходит эффективное прямое преобразование молекул S₈ в молекулы S₂ и как следствие этого — возбуждение перехода $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ в S₂, который используется для получения лазерного эффекта. Детально исследуется структура спектра данного перехода, определены спектроскопич. константы основного состояния $X^3\Sigma_g^-$ вплоть до четвертого порядка: $\omega_e'' = 727,848 \text{ см}^{-1}$; $\omega_e x_e'' = 3,0195 \text{ см}^{-1}$; $\omega_e y_e'' = 4,196 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$; $\omega_e z_e'' = 9,77 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$. С использованием полученных эксперим. данных построены потенц. кривые состояний $B^3\Sigma_u^-$ и $X^3\Sigma_g^-$. Зарегистрирован и отождествлен спектр перехода $B''^3\Pi_u \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ в S₂. Библ. 43.

Ф.1981/3

С. Ч.

Виттман 10486

S2

Оттиски 10486

1980

5 Б184. Устойчивые разряды в чистой сере и связанные с ними спектры. Peterson D. A., Schlie L. A. Stable pure sulfur discharges and associated spectra. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 4, 1537—1566 (англ.)

М. 17

Получены стабильные, самонезатухающие разряды в парах чистой серы и смеси серы с гелием при т-ре оптич. ячейки $0-250^{\circ}$ (давл. паров серы $10^{-5}-8$ мм). Температуры, при к-рых, как оказалось, возможно наблюдать стабильные разряды значительно ниже, чем считалось ранее. Описана схема установки и нек-рые детали эксперимента. Возбуждение осуществлялось как в импульсном, так и в непрерывном режимах. В спектрах наблюдалась очень интенсивная и развитая система полос связанных с переходом $B^3\Sigma_u^- (v=0-9) - X^3\Sigma_g^- (v''=0-32)$ S_2 в области 2830—8740 Å. Кроме того, наблюдалась система полос, отнесенная к переходу $B''^3\Pi_u^- (v'=0-6) - X^3\Sigma_g^- (v''=0-21)$ S_2 (2810—5115 Å). Никаких др. атомных или молек. пере-

2-1981.11.15

ходов в спектре испускания не обнаружено. Рассмотрены схемы возможных процессов образования возбужденных молекул S_2 . Полученные данные свидетельствуют о том, что молекулы S_2 образуются при возбуждении непосредственно из молекул S_8 , являющимися основным компонентом газовой фазы при указанных т-рах. Проведен анализ колебательной структуры систем В—Х и получены следующие значения (в см^{-1}) колебательных постоянных основного состояния молекулы S_2 : $\omega_e'' = 727,848$, $\omega_e'' x_e'' = 3,0195$, $\omega_e'' y_e'' = 4,196 \cdot 10^{-3}$, $\omega_e'' z_e'' = 9,77 \cdot 10^{-6}$. Приведены значения $T_e(v')$ и $\Delta G_{v+1/2}'$ для состояний $B^3\Sigma_u^-$ ($v'=0-9$) и $B''^3\Pi_u^-$ ($v'=0-6$). Для колебательных уровней состояния $X^3\Sigma_g^-$ ($v''=0-32$) и $B^3\Sigma_u^-$ ($v'=0-9$) рассчитаны поворотные точки потенциальных кривых и значения $G(v'')$ и $G(v')$.

В. М. Ковба

S₂

enumu 11125

1980

kb. max.
factor

94: 55006c Ab initio calculations on the $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$, and $^1\Pi_g$ symmetries of diatomic sulfur: valence, ion pair, and Rydberg states. Saxon, Roberta P.; Liu, B. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(10), 5174-81 (Eng). CI calcs. were performed for $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$, and $^1\Pi_g$ states of S₂. The lowest diabatic Rydberg state for each symmetry is presented. Spectroscopic parameters for the bound X $^3\Sigma_g^-$ and b $^1\Sigma_g^+$ states and for the Rydberg states are given. Limited test calcs. are reported. The implications of these potential curves for the rate of quenching of S (1S) in collision with another S (1S) are discussed.

C. A. 1981. 24, 18

1 Оттиск Р11257 1980

S₂

6 Д105. Неэмпирический расчет состояний симметрии $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$ и $^1\Pi_g$ молекулы S₂. Состояния ионных пар, валентные и ридберговы состояния. Ab initio calculations on the $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$, and $^1\Pi_g$ symmetries of S₂. Valence, ion pair, and Rydberg states. Saxton Roberta P., Liu B. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 5174—5181 (англ.)

кв. мех.
расчет

Для молекулы S₂ методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенц. кривые и спектроскопич. постоянные электронных состояний типов $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$ и $^1\Pi_g$. Базис АО включал 78 слэтеровских орбиталей типов s, p и d. При построении конфигураций рассматривались все возможные распределения 12 электронов на МО валентной оболочки, а также конфигурации с возбуждением одного электрона на виртуальную МО. Всего использовано 6702 конфигурации для симметрии $^3\Sigma_g^-$, 4507 — для $^1\Sigma_g^+$, 11 378 — для $^3\Pi_g$ 7482 — $^1\Pi_g$. Потенц. кривые построены в районе.

Ф. 1981. №6

изменения межъядерного расстояния S_2 от 2,9 до 30 ат. ед. Полученные результаты использованы для обсуждения возможных каналов и скорости реакции столкновения атомов S (1S). Начальный канал этой реакции соответствует состоянию $7^1\Sigma_g^+$ молекулы S_2 . Оценка матричных элементов спин-орбитального взаимодействия между состоянием $7^1\Sigma_g^+$ и состояниями $^3\Pi_g$ и $^3\Sigma_g^-$ указывает, что скорость реакции самозавхвата $S(^1S)$ мала ($\ll 10^{-12}$ см³·сек⁻¹·молекул⁻¹).

А. И. Дементьев



S₂

кв. атох.
расчет

ж. 1984. N 12

12 Б36. Эмпирические расчеты состояний $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$ и $^1\Pi_g$ S₂. Валентные, ионные и ридберговские состояния. Saxton Robert A., Liu B. Ab initio calculations on the $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$, and $^1\Pi_g$ symmetries of S₂: Valence, ion pair, and Rydberg states. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 5174—5181 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны потенциальные кривые молекулы S₂ симметрии $^3\Sigma_g^-$, $^1\Sigma_g^+$, $^3\Pi_g$ и $^1\Pi_g$. Использован базис слейтеровских орбиталей s-, p- и d-типа с частичной оптимизацией показателя экспонент по энергиям атома МО для КВ получены при расчетах основного состояния X³ Σ_g^- многоконфигурац. методом ССП. Рассмотрены несколько вариантов отбора конфигураций для КВ. Для каждого рассмотренного типа симметрии выделены валентные состояния, а также состояния, диссоциирующие на ионную пару и ридберговские состояния, трактовка которых осуществлялась по описанной ранее методике (см. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, 870). Представлены результаты расчетов спектроскопич. постоянных для связанных состояний. Проведено сопоставление с данными расчетов O₂ в близком по качеству приближении. На основании полученных данных сделан вывод, что скорость столкновительного самогашения S(¹S) мала. А. В. Немухин

Оммух 11125

S₂

1980

vb. corr.
fact.
Te; De

Fossell J. A., e
J. Phys. Chem. Solids, 1980
41(10), 1047-52

corr. O₂⁻ - II

S₂^N 2-

[XII-2050]

1980

Trsie M., Laidlaw W. B.,

ab initio
praeem

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, 17, N5, 969-974.

S₂

Commuck 15282

1980

crickmp,
 $^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$

Venkitachalam T.V.,
Krishnamachari S.K.N.

Indian J. Phys.,
1980, B54, N4-5,
● 282-285

S₂

Айтчанек 12815 1981

обзор,
теории
расчет.
молекул,
орбиталей,
геометрии

Bohm M.P., Gleiter R.

Theor. chim. acta,
1981, 59(2), 153-179.

SO₂

1981

Cook Gatti, et al.

и.к. спектр
в матрице

J. Chem. Phys., 1981,
74, N 2, 841-848.

● (сер. SO₂; III).

1981

S₂

/ 95: 70430a Study of superfluorescence in sulfur (S_2 ($^3\Sigma_u^- \rightarrow ^3\Sigma_g^-$) produced by nitrogen laser pumping. Girardeau-Montaut, J. P.; Moreau, G. (Groupe Electro-Opt., Univ. Orleans, 18028 Bourges, Fr.). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1980 (Pub. 1981). 236(Eur. Conf. Opt. Syst. Appl., 1980), 345-9 (Eng). Superfluorescence was obsd. from the $^3\Sigma_u^- \rightarrow ^3\Sigma_g^-$ transition in S_2 mols. pumped by a N_2 laser. The laser intensities were scaled for various exptl. conditions and an anal. of the results is proposed. From this, the laser cross-section was estd. as $\sim 10^{-12} \text{ cm}^2$.

 $^3\Sigma_u^- \rightarrow ^3\Sigma_g^-$

CA 1981, 95, N 8

S₂

1998

130: 159848g Potential energy function and spectrum constants for the B" $^3\Pi_u$ state of S₂. Tang, Yong-Jian; Zhao, Yong-Kuan; Zhu, Zheng-He; Fu, Yi-Bei (Atomic and Molecular Physical Inst. of

Sichuan Union Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610065). *Wuli Xuebao* 1998, 47(10), 1600-1605 (Ch), Kexue Chubanshe. A reasonable dissociation limit of B" $^3\Pi_u$ state of mol. sulfur (S₂) has been derived, and a potential energy curve of B" $^3\Pi_u$ and X $^3\Sigma_g^-$ states of S₂ has been calculated by using Gaussian 94 QCISD(T) method and the 6-311++ G** basic set function. The Murrell-Sorbie potential energy function and spectrum constants are given. Because B" $^3\Pi_u$ state overlaps extensively with B $^3\Sigma_u^-$ state in the repulsive branch and B" $^3\Pi_u$ and X $^3\Sigma_g^-$ states have the same dissociation limits, they have an overlap in the attractive branch. In this paper, the interaction characteristics of B" $^3\Pi_u$, B $^3\Sigma_u^-$ and X $^3\Sigma_g^-$ states have also been discussed.

(B" $^3\Pi_u$, etc.)

C.A. 1999, 130, ~12

S_2

1997

24Б1521. Верхние колебательные состояния в электронном состоянии $B''^3\Pi_u$ $^{32}S_2$. Upper vibrational states of the $B''^3\Pi_u$ state of $^{32}S_2$ / Green M. E., Western C. M. // J. Chem. Soc. Faraday Trans.— 1997.— 93, № 3.— С. 365–372.— Англ.

Получена ФЛ молекулярного пучка $^{32}S_2$ на переходах $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g^-$ и $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ в областях 34 665–34 685 и 35 720–35 780 см^{-1} . Времена жизни колебат. уровней $v' = 12 - 21$ $B''^3\Pi_u$ равны 4130–2313 нс. Определены значения термов $B''^3\Pi_u$ и $B^3\Sigma_u^-$ до предела преддиссоциации и пределы диссоциации на атомные термы. Вычислены вращат. постоянные и параметры взаимодействия для состояний $v' = 12 - 21$ $B''^3\Pi_u$ и $v' = 7 - 10$ $B^3\Sigma_u^-$.

М. А. Ковнер

М.А.

Х. 1997, № 4

2000

F: S2

P: 3

133:125510 Ab initio studies for S2 molecule.

Liu, Wen-Wang; Wang, Zhen Department of
Physics, Liaoning Normal University Dalian 116029,
Peop. Rep. China Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao,
17(2), 309-313 (Chinese) 2000. Some singlet and
triplet excited states are studied with the CIS and CIS-
MP2 methods with the Gaussian 94 Package. This
technique is easy and quite successful to apply to low
singlet states of the S2 mol., but it needs improvement
for calcns. for triplet and highly excited states.

S_n

Om. 41134

2001

($n=2-12$)

cmp-pa,
ab initio
program

S. Millefiori and A. Alparone,

J. Phys. Chem. 2001, 105 A,
9489-9497.

S₂

Оттиск 12058

1981

2 Б216. Спектры возбуждения флуоресценции, времена жизни и тушение S₂(B³Σ_u⁻) в области длин волн 280—315 нм. Quick C. R., Weston Ralph E. Fluorescence excitation spectra, lifetimes, and quenching of S₂(B³Σ_u⁻) in the wavelength region 280—315 nm). «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 9, 4951—4959 (англ.)

Для молекулы S₂ измерены (с разрешением 0,5 см⁻¹) спектры возбуждения флуоресценции (область 280—315 нм, переход B³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻) и определены времена жизни (τ) в состояниях B³Σ_u⁻ (v ≤ 10). Исследовано тушение флуоресценции S₂(B) аргоном (p ~ 1—400 мм). Использован лазер на красителе с удвоением частоты. В состояниях с v' ≤ 8, возбуждаемых в области начала полос q'' = 1—v', величина τ составляет 30—45 нсек. Для состояния v' = 9 наблюдается уменьшение τ (112 → 10 нсек) по мере удаления от начала полосы 0—9, а при нек-рых длинах волн — двойной экспоненциальный распад. Несмотря на то, что уровень v' = 10 предиссоциирован, в спектре об-

Vi

X. 1982, 19 AB, № 2.

наружены слабые пики в области полосы 0—10 с очень коротким (< 3 нсек) временем жизни. В спектрах наблюдаются также малоинтенсивные пики со значительно большим временем жизни (~ 100 нсек) чем τ ($\nu' \leq 8$), связанные, как предполагается, с состоянием $B''^3\Pi_u$. Тушение флуоресценции аргоном исследовано для уровней $\nu' = 3$ и 9. Константы скорости (k) тушения при 600° равны соотв. $2,2 \cdot 10^6$ и $9,5 \cdot 10^6$ сек $^{-1}$ мм $^{-1}$. Флуоресцентный распад при этом носит сложный характер (двух и трехкомпонентный), к-рый может быть объяснен, во-первых, увеличением вклада флуоресценции из состояния B'' (что связано с взаимодействием состояний B'' и B при столкновениях) и, во-вторых, вызван существованием других близлежащих долгоживущих состояний, например $A'^3\Delta_u$. Найденные величины τ и k хорошо согласуются со значениями полученными ранее авторами с использованием широкополосного источника возбуждения («J. Chem. Phys.», 1978, 68, 1736).

Р. М. Корба

12

1998

129: 295405s Potential energy function and vibrational spectrum for the $X^3\Sigma_g^-$ and the $B^3\Sigma_u^-$ of S_2 . Tang, Yongjian; Gao, Tao; Wang, Hongyan; Liu, Xiaoyan; Yi, Yougen; Zhu, Zhenghe; Zhao, Yongkuan (Atomic Mol. Phys., Inst. Sichuan Union Univ., West, Peop. Rep. China 610065). *Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao* 1998, 15(2), 159-166 (Ch), Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao Bianjibu. The Murrell-Sorbie function of the ground state $X^3\Sigma_g^-$ for S mol. S_2 was calcd. by spectroscopic data and QCISD(T)/6-311++G** method, resp., which are in agreement in repulsive branch, however, there is a shallow max. in attractive branch. This may be due to the removal of multiplicity or Λ -double degeneracy caused by the interaction of $X^3\Sigma_g^-$ and $^3\Pi_u^-$. The Deslandres Table and the Franck-Condon Parabola between $B^3\Sigma_u^-$ ($v \leq 9$) - $X^3\Sigma_g^-$ ($v \leq 30$) are also given in which both states are based on spectroscopic data. This project is closely related with emission from $S_2(B-X)$ transition.

($X^3\Sigma_g^-$, $B^3\Sigma_u^-$)
nomenclature of the

C.A. 1998, 129, N 22

S₂

Emmelen 12058

1981

спектр
примесей.

/ 94: 216865z Fluorescence excitation spectra, lifetimes, and quenching of diatomic sulfur ($B^3\Sigma_u^-$) in the wavelength region 280-315 nm. Quick, C. R., Jr.; Weston, Ralph E., Jr. (Dep. Chem, Brookhaven Natl. Lab., Upton, NY 19973 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(9), 4951-9 (Eng). Fluorescence lifetimes were detd. for S₂ vapor excited to the $B^3\Sigma_u^-$ state at 280-315 nm, with a spectral resolu. of ~ 0.5 cm⁻¹. For states with $v' \leq 8$, excitation in the bandhead region leads to fluorescence lifetimes of ~ 30 -45 ns. In addn., low-intensity peaks with much longer lifetimes were obsd. throughout the absorption spectrum. The decreased intensity and increased lifetime were attributed to perturbations by the $B''^3\pi_u$ state. For the $v' = 9$ state, lifetimes generally decrease as the excitation wavelength moves away from the bandhead and at some wavelengths a double exponential decay was obsd. Although the $v' = 10$ state is known to predissociate, weak fluorescence peaks with very short lifetimes (< 3 ns) were obsd. The addn. of Ar as a quenching gas leads to complex fluorescence decay curves with 2 or 3 components for both $v' = 3$ and $v' = 9$ states. Lifetimes and quenching rate consts. obtained in this work agree with those measured previously in this lab. using a broad-band excitation source.

C.A. 1981, 94 N 26

S₂

Ommuck 12295

1981

спектр
флуор.

95: 123335g Fluorescence of S₂(B-X) excited by fixed frequency ultraviolet lasers. Smith, Allan L.; Hopkins, John B. (Chem. Dep., Drexel Univ., Philadelphia, PA 19104 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(5), 2080-4 (Eng). Fluorescence spectra from rotational levels in the B³Σ_u⁻ state of disulfur excited by pumping the ground state with a continuous wave He-Cd laser (325 nm) and with a pulsed N laser (337 nm) were studied. The He-Cd laser excites the transition (v' = 3, N' = 24, J' = 25) ← (v'' = 3, N'' = 25, J'' = 26), or (3,3)P₁(25). A comparison of high resolu. spectra of the N laser and of S₂ shows that several transitions in the (2,4) band could be excited: R₃(23), P₂(13), R₂(21), and R₃(25).

C.A. 1981, 95, N14.

S₂

Оттиск 12295 1981

3 Д729. Флуоресценция S₂(B—X), возбуждаемая УФ-лазерами с фиксированной частотой. Fluorescence of S₂(B—X) excited by fixed frequency ultraviolet lasers. Smith Allan L., Hopkins John B. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 5, 2080—2084 (англ.)

Исследована флуоресценция S₂(B—X), возбуждаемая излучением непрерывного He—Cd (325 нм) или импульсного N₂ (337 нм) лазеров. Показано, что частота излучения He—Cd-лазера совпадает с частотой перехода ($v'=3, N'=24, J'=25$) ← ($v''=3, N''=25, J''=26$) или (3,3)P₁(25). Сопоставление спектров (высокого разрешения) излучения N₂-лазера со спектром поглощения молекулы S₂ показало, что N₂-лазер может возбуждать флуоресценцию S₂(B—X) за счет переходов R₃(23), P₂(13), R₂(21) и R₃(25) в полосе (2,4). Библ. 33. В. С. И.

спектр
флуоресц.

ф. 1982, 18, N3.

S₂

Оттиск 12295 1981

5 Б165. Флуоресценция S₂(B—X), возбуждаемая ультрафиолетовыми лазерами с фиксированной частотой. Smith Allan L., Hopkins John B. Fluorescence of S₂(B—X) excited by fixed frequency ultraviolet lasers. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 5, 2080—2084 (англ.)

Исследована система B³Σ_u[−]—X³Σ_g[−] в спектре флуоресценции молекулы S₂ с целью правильного отнесения по I-переходам возбуждаемых импульсным азотным лазером и He—Cd-лазером непрерывного действия (λ_{возб} соотв. 337 и 325 нм). При отнесении возбуждаемых переходов использованы следующие значения молекулярных постоянных ³²S (X³Σ_g[−]) (в см^{−1}): B_v^{''}=0,295413—1,579·10^{−3} (v+1/2)—1,387·10^{−6} (v+1/2)², λ_v^{''}=11,818+0,0496(v+1/2)+2,4·10^{−3}(v+1/2)², γ_v^{''}=−6,59·10^{−3}—1,26·10^{−4}(v+1/2), D_v^{''}=2,148·10^{−7}—5,0·10^{−10}(v+1/2), ω_e^{''}=725,65, ω_ex_e^{''}=2,844 (I. M. Ricks, Ph. D. Thesis, Oxford University, 1970). Найдено, что излучение He—Cd-лазера возбуждает переход (3,3)P₁(25) (v'=3, N'=24, I'=25—v''=3, N''=25, I''=26), а излучение N₂-

«М.П.»

X. 1982, 19, NS.

лазера может возбуждать переходы в полосе 2—4 $R_3(23)$, $R_2(13)$, $R_2(21)$, $R_3(25)$, совпадающие с точно-
стью лучше, чем $0,1 \text{ см}^{-1}$ с линиями $P_1(6)$, $P_1(9)$,
 $P_2(11)$, $P_3(12)$ полосы 0—0 перехода $C^3\Pi_u - B^3\Pi_g$ N_2 .
В. М. Ковба

S_2

(Orinuck 11883)

1981

Stammlet v, et al.

кб. мех.
паерем,

Theor. chim. nete

$\Delta E(ST)$

1981, 59, 501-515.



52

Lomnica 11839

1981

Theodorakopoulos G, et al.

кв. мек.
пакет

(Do)

Chem. Phys. Lett;
1981, 81 (3), 413-420.



S₂

1982

Boeyens Jan C. A.

Do, u.n. J. Crystallogr. and
Spectrosc. Res., 1982,
12, N3, 245-254.

●
(cer. C₂H₄; III)

22

10m. 37807

1982

эмиссион. Crosley D.R.,
спектр
системы

$B^{3+} - X^{3+}$ - J. Chem. Educ., 1982, 59, N6,
446-455.

Laser-Induced
Spectroscopy,
and Diagnosti

Fluorescence in
Dynamics,
cs.

S₂

1982

спектр

24 Б166. Детектирование S₂ путем магнитной перестройки атомной линии испускания хрома (1+). Cuellar E., Brown N. J. Detection of S₂ by magnetic tuning of a chromium (I) atomic emission line. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 11, 1966—1969 (англ.)

Предложен спектроабсорбционный метод определения содержания S₂ в парах с использованием атомарного источника излучения, помещенного в магнитное поле изменяемой напряженности, в котором производится перестройка зеемановских компонент линии Cr(1+) $\lambda=3018$ А. Измеряли дифференциальное поглощение, (ветви вращательной структуры полосы 7—2 системы $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-S_2$), как функцию напряженности магнитного поля. Удалось разрешить несколько близлежащих вращательных линий, принадлежащих различным ветвям (достигнутое разрешение $6 \cdot 10^4$). Еще большее разрешение может быть достигнуто с использованием линии Mn(2+) $\lambda=2928,63$ А. В. М. Ковба

X. 1982, 19, N24

1982

S₂

12 Д775. Детектирование S₂ с помощью магнитной перестройки атомной эмиссионной линии хрома(I). Detection of S₂ by magnetic tuning of a chromium(I) atomic emission line. Cuellar E., Brown N. J. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 11, 1966—1969 (англ.)

Новый способ, называемый молекулярной спектроскопией с перестройкой атомной линии (TALMS), использован для детектирования S₂ по поглощению атомной эмиссионной линии Cr (I) на длине волны 3018 Å. Линия хрома расщеплялась на зеемановские компоненты при помещении источника света (дуговая лампа) в магн. поле, изменением напряженности которого осуществлялось их сканирование. Проводилось измерение диффер. поглощения S₂ в окрестности линии хрома как ф-ции напряженности магн. поля. Достигнуто разрешение нескольких близко расположенных линий, относящихся к различным ветвям, которые обусловлены триплетным расщеплением в полосе (7,2) системы B³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻ серы S₂. Полученное разрешение составило более чем ~~6-10~~ Библ. 32. Г. И. Беков

B³Σ_u⁻—X³Σ_g⁻

ор. 1982, 18,
N 12

S₂

1982

96: 207704k Detection of S₂ by magnetic tuning of a chromium(I) atomic emission line. Cuellar, E.; Brown, N. J. (Lawrence Berkeley Lab., Berkeley, CA 94720 USA). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(11), 1966-9 (Eng). A technique called tunable at. line mol. spectroscopy (TALMS) was utilized to detect S₂ by absorption of a Cr(I) at. emission line at 3018 Å. The Cr line was split into Zeeman components, and a differential absorption measurement was obtained as a function of magnetic field strength. Several closely spaced lines belonging to different branches which result from the triplet splitting in the (7,2) band of the B³Σ_u⁻-X³Σ_g⁻ system of S₂ were resolved. A resoln. >6 × 10⁴ was demonstrated.

B³Σ_u⁻-X³Σ_g⁻

новый
спектр. метод

C. A. 1982, 96, N 24.

S₂

Оттиск 14937 1982

4 Б1388. Спектры флуоресценции и рекомбинационного излучения S₂, образованного при лазерном фотолизе ультрафиолетовым излучением CS₂ в аргонной матрице при температуре 15 К. Fluorescence and recombination—emission spectra from S₂ formed by ultraviolet laser photolysis of CS₂ in an argon matrix at 15 К. Hamaguchi Hiro-o, Tasumi Mitsuo. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 91, № 5, 406—408 (англ.)

Зарегистрированы спектры испускания, возникающие при фотолизе светом 257,3 нм импульсного лазера на ионах Ag⁺ с удвоением частоты (средняя мощность 1—5 мВт, длительность импульса 15 нс, частота следования 4 МГц) смесей CS₂—Ar состава 1: (100—500), замороженных при т-ре 15 К. Эти спектры содержат две серии колебательных, полос А и В, приписанных переходам S₂(B³Σ_u⁻→X³Σ_g⁻) и S₂(B'³Π_u→X³Σ_g⁻), причем разность энергетич. термов для одинаковых колебательных уровней в области от ν=6 до ν=16 постоянна и равна 524±2 см⁻¹. Сделан вывод, что перв.

спектр,

М. П.

Х. 1983, 19, №4.

процесс фотолиза CS_2 таков: $\text{CS}_2 + h\nu \rightarrow \text{CS}(a^3\Pi) + \text{S}(^3P)$.
 Далее протекает процесс рекомбинации люминесценции:
 $\text{S}(^3P) + \text{S}(^3P) \rightarrow \text{S}_2(B''^3\Pi_u)$, $\text{S}_2(B''^3\Pi_u) \rightarrow \text{S}_2(X^3\Sigma_g^-) + h\nu$,
 ответственный за серию B, и процесс возбуждения
 флуоресценции S_2 , ответственный за серию A:

$\text{S}_2(X^3\Sigma_g^-) + h\nu \rightarrow \text{S}_2(B^3\Sigma_u^-)$, $\text{S}_2(B^3\Sigma_u^-) \rightarrow \text{S}_2(X^3\Sigma_g^-) + h\nu$.
 Могут протекать также конкурирующие процессы
 внутренней конверсии $\text{S}_2(B^3\Sigma_u^-) \rightarrow \text{S}_2(B''^3\Pi_u)$ и диссо-
 циации $\text{S}_2(B^3\Sigma_u^-) \rightarrow \text{S}(^3P) + \text{S}(^1D)$. Изменения вкладов
 всех этих процессов могут объяснять вариации отно-
 шений интенсивностей серий A и B в зависимости от
 концентрации CS_2 и мощности лазера. В. Е. Скурат

S₂

Om. 14810

1982

3 Д123. Неэмпирический расчет расщеплений в нулевом поле состояний $X^3\Sigma_g^-$ и $B^3\Pi_{g,i}$ молекулы S₂. AB initio calculation of the zero-field splittings of the $X^3\Sigma_g^-$ and $B^3\Pi_{g,i}$ states of the S₂ molecule. Hess Bernd A., Buenker Robert J., Marian Christel M., Peyerimhoff Sigrid D. «Chem. Phys.», 1982, 71, № 1, 79—85 (англ.)

М.П.

оп. 1983, 18, N3

S₂

On. 14810

1982

97: 225829e Ab initio calculation of the zero-field splittings of the $X^3\Sigma_g^-$ and $B^3\Pi_{g,1}$ states of the diatomic sulfur molecule. Hess, Bernd A.; Buenker, Robert J.; Marian, Christel M.; Peyerimhoff, Sigrid D. (Univ.-Gesamthochsch. Wuppertal, D-5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1982, 71(1), 79-85 (Eng). The zero-field splitting of the $^3\Sigma_g^-$ ground state of S₂ is computed employing MRD CI wave functions obtained in a series of AO basis sets. All 1- and 2-electron spin-orbit interactions are included in the theor. treatment and results are obtained and compared using 2nd-order perturbation theory techniques and a CI-type diagonalization procedure. The computed data are in good agreement with expt., including the dependence of the splitting parameter on vibrational quantum no., and are quite stable with respect to variations in the AO basis as well as the no. of inner-shell core orbitals maintained doubly occupied in all Slater determinants employed in the theor. treatment.

meop. pac-
lem

pacuerm.

X $^3\Sigma_g^-$ coord.

C.A. 1982, 97, v26

S₂

Оттиск 14810

1982

3 Б40. Неэмпирический расчет расщеплений состояний $X^3\Sigma_g^-$, $B^3\Pi_{g,i}$ молекулы S_2 в нулевом поле. Ab initio calculation of the zero-field splittings of the $X^3\Sigma_g^-$ and $B^3\Pi_{g,i}$ states of the S_2 molecule. Hess Bernd A., Buenker Robert J., Marian Christel M., Peyerimhoff Sigrid D. «Chem. Phys.», 1982, 71, № 1, 79—85 (англ.)

$X^3\Sigma_g^-$, $B^3\Pi_{g,i}$

неэмпирический
расчет

С использованием волновых функций основного $X^3\Sigma_g^-$ и низших возбужденных состояний $1^3\Pi_g$, $1^1\Sigma_g^+$ и $1^1\Delta_g$ молекулы S_2 , рассчитанных методом КВ в различных гауссовых базисах АО (двухэкспонентные базисы с включением и без включения гауссовых функций, центрированных на связи), вычислено расщепление состояний $X^3\Sigma_g^-$ и $3\Pi_{g,i}$ в нулевом поле. Параллельно выполнен расчет расщепления состояния $2^1\Pi_{g,r}$ иона S_2^+ под влиянием состояния $2^1\Sigma_g$. При расчете расщеплений рассматривались все одно- и двухэлектронные спин-орбитальные взаимодействия. Вычисления проводились в рамках теории возмущений 2-го порядка

X, 1983, 19, 13

и диагонализации матрицы спин-орбитального взаимодействия в ограниченном конфигурац. базисе близлежащих состояний. Полная величина расщепления λ между компонентами Σ_g^+ и Π_g находилась для 5 значений межъядерного расстояния, и ее зависимость от колебательного квантового числа определялась при усреднении $\lambda(R)$ по колебательным волновым ф-циям, вычисл. с соотв-щими потенциальными кривыми. Показано, что в расчетах методом КВ ТС валентного спектра возможно использование замороженного остова так же, как и в неэмпирич. расчетах энергий электронных переходов. Крит. пунктом расчета является точность неэмпирич. определения энергий переходов. Теор. зависимость спин-орбит. расщепления λ (см^{-1}) от колебательного квантового числа v для основного состояния $^3\Sigma_g^-$ $\lambda_v = 11,70 + 0,055 (v+0,5) + 0,011 (v+0,5)^2$ хорошо согласуется с эксперим. зависимостью $\lambda_v = 11,82 + 0,05 (v+0,5) + 0,0024 (v+0,5)^2$. И. А. Тополь

S₂

1982

97: 63515v Fluorescence and thermoluminescence of diatomic sulfur in low-temperature matrixes. Long, Stephen Randolph (Univ. California, Berkeley, CA USA). 1981. 219 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8212018. From *Diss. Abstr. Int. B* 1982, 42(12, Pt. 1), 4811.

флюор. в
матрице

C. A. 1982, 97, N 8.

S_2, S_2^+

1982

Mc Lean A.D., Liu B.,
et al.

kl. mex.
pacem

Climent Wale Funct, 2
Meet, Adelaide, 18-24
Febr., 1982. New York,
1982, ● 90-100.
(cur. B₂; III)

S₂

1982

Mc Master Blair N.,
Smith Vedene H., et al.

расчёт

электрон.

плотностей.

Mol. Phys., 1982, 46,
N 3, 449-463.

● (см. C₂; III)

S₂

1982.

98: 151901u Franck-Condon factors and r -centroids for the ($f^1\Delta_u - a^1\Delta_g$) transition of the diatomic sulfur molecule using R-K-R-V potential. Mummigatti, Veerappa M. (Basel Mission Higher Educ. Cent., Kittel Coll., Dharwar, 580001 India). *Acta Cienc. Indica, [Ser.] Phys.* 1982, 8(1-4), 105-7 (Eng). The potential energy curves of the $f^1\Delta_u$ and $a^1\Delta_g$ electronic states of astrophys. significant S₂ were computed using the R-K-R-V potential. Franck-Condon (FC) factors and r -centroids are evaluated for the ($f^1\Delta_u - a^1\Delta_g$) band system of S₂ using wave functions appropriate to the R-K-R-V potential. On the basis of these computed FC-factors the intensity distribution in the band system is explained. The sequence difference in the computed r -centroids remains approx. const.

фрактор
Франка-
Кондона

C.A. 1983, 98, N18.

S_2

Om. 14874

1982

1 Д586. Наблюдения состояний $B^3\Sigma_u^-$ и $B''^3\Pi_u$ молекулы S_2 . Observations on the $B^3\Sigma_u^-$ and $B''^3\Pi_u$ states of S_2 . Patiño Pedro, Barrow Richard F. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 8, 1271—1282 (англ.)

С высоким разрешением сфотографирована полоса $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ в спектре поглощения молекулы $^{32}S_2$. Получены также спектры флуоресценции $S_2(B-X)$, возбуждаемые линиями Ar^+ - и Kr^+ -лазеров. Выполнен детальный анализ полосы 1—4. Проанализированы также возмущения уровня $v=1$ состояния $B^3\Sigma_u^-$ и определены спектроскопич. постоянные возмущающего состояния $B''^3\Pi_u$. В спектрах флуоресценции идентифицирован ряд полос изотопич. молекул $^{32}S^{34}S$. Библ. 24.

м.п., Di;

ср. 1983, 18, N 1

32 f
2

1982

Ommuck 14874

/ 97: 150904q Observations on the $B^3\Sigma_u^-$ and $B''^3\Pi_u$ states of disulfur. Patino, Pedro; Barrow, Richard F. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1982, 78(8), 1271-82 (Eng). Photographs of the $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ system of $^{32}\text{S}_2$ were taken, and fluorescence excited by several Ar- and Kr-ion laser lines was recorded. The rotational anal. of the 1-4 band is given in detail. A deperturbation of the levels of $v = 1$ in $B^3\Sigma_u^-$ is described and const. for the perturbing state $B''^3\Pi_u$ are derived and discussed. Some of the fluorescence series are assigned to $^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ in natural abundance.

 $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$

лазерная

флуор.

регистр. $B^3\Pi_u^-$
(М.Н.)

C. A. 1982, 97, N 18

S₂

Оттиск 14874

1982

2 Б150. О состояниях $B^3\Sigma_u^-$ и $B''^3\Pi_u$ S_2 . Observations on the $B^3\Sigma_u^-$ and $B''^3\Pi_u$ States of S_2 . Patiño Pedro, Barrow Richard F. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 8, 1271—1282 (англ.)

Сфотографирована система $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ в спектре поглощения $^{32}S_2$ и исследованы спектры флуоресценции молекулы S_2 возбуждаемые Ag^+ - и Kr^+ -лазерами. Проведен детальный анализ вращательной структуры одной из полос (1—4) в спектре поглощения. Для главных ветвей вращательной структуры приведено положение и отнесение линий. Дан перечень резонансных серий (с указанием относит. интенсивностей, наличия или отсутствия структуры, наличия релаксационных линий) $^{32}S_2$ и $^{32}S^{34}S$, возбуждаемых от различных линий Ag^+ - и Kr^+ -лазеров, а также атомных и ионных линий др. источников возбуждения. Получены след. значения мол. постоянных $^{32}S^{34}S(X^3\Sigma_g^-)$ (в cm^{-1}): $\omega_e = 714,37$, $\omega_e x_e = 2,734$, $B_e = 0,2880$, $e = 1,548 \times 10^{-3}$. Наблюдаемые ... в

M. Nj

X. 1983, 19, № 2

спектре поглощения возмущения связываются с состоянием $B''^3\Pi_u$. Даны значения молек. постоянных $^{32}\text{S}_2$, полученные с учетом возмущений: состояние $B^2\Sigma_u^-, v=1$ (e, f уровни) — T_v, B_v, D_v, C_Σ (постоянная спин-спинового взаимодействия), γ_Σ (спин-вращ. постоянная); состояние $B''^3\Pi_u, (v, v+1)$ — $T_v, B_v, D_v, \gamma_\Pi, C_\Pi, r_\Pi, q_\Pi$ (p, q -постоянные λ -удвоения). Приведены значения параметров возмущения для $^3\Sigma^- \leftrightarrow ^3\Pi_{2,v}(\beta_0)$ и $^3\Sigma^- \leftrightarrow ^3\Pi_{0,v+1}(\alpha_0, \beta_0)$. Сделан вывод, что возмущающее состояние B'' — регулярное $^3\Pi$ состояние со след. мол. постоянными ($^{32}\text{S}_2$, в см^{-1}): $T_e=31\,070, A_e=220, \omega_e=335,2, \omega_e x_e=4,5, B_e=0,210, \alpha_e=0,0028, D_e=4930$.
 В. М. Ковба

S₂

1982

191177y Fluorescence and recombination-emission spectra
from diatomic sulfur formed by ultraviolet laser photolysis of
carbon disulfide in an argon matrix at 15 K.

(M.N.)

C.A. 1982, 97, 122

S₂

1982

напр. лос.
физичес.

' 97: 136064j Investigation of laser induced fluorescence for concentration measurements of diatomic sulfur. Robbins, Tyrie R. (Sch. Eng., Air Force Inst. Technol., Wright-Patterson AFB, OH USA). Report 1981, AFIT/GEP/PH/81D-8; Order No. AD-A111141, 73 pp: (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1982, 82(13), 2545. The feasibility was studied of using laser induced fluorescence to measure S₂ no. densities in a lab. environment. The research was prompted by the growing interest in S₂, esp. its potential as a tunable, high-power laser medium. In concept, laser induced fluorescence proved to be a feasible means of measuring S₂ concns. in lab. environment. Differences between the known and calcd. no. densities are attributed to the complexity of S₂, quenching and radiation trapping, difficulties in measuring the effective lifetime, and inadequacies in the rate equation model.

C.A. 1982, 97, N16

S₂⁻

1983

99: 221464a The electronic and resonance Raman spectroscopy of the inorganic transients sulfur(S_2^- , S_3^-) and selenium(Se_2^-) stabilized in ultramarine. Clark, Robin J. H.; Fairclough, David P.; Kurmoo, Mohamedally (Christopher Ingold Lab., Univ. Coll. London, London, UK). *Time-Resolved Vib. Spectrosc., [Proc. Int. Conf. TRVS]* 1982 (Pub. 1983), 213-18 (Eng). Edited by Atkinson, George H. Academic: New York, N. Y. Electronic and resonance Raman spectral studies established the nature of the key chromophores in ultramarine blue, green, violet (various shades thereof) and pink, as well as in ultramarine selenium. They are S_3^- , S_2^- , S_4 or S_4^- , and Se_2^- , as demonstrated by excitation profile studies. Spectroscopic consts. for the radical anions are presented. Franck-Condon fits to the Raman-band excitation profiles allow the calcn. of bond length changes for S_2^- and Se_2^- on excitation to the resonant electronic states.

(M.N., CKP)

(#3) S_3^- , S_2^- ●, S_4 (with S_4^-)

C.A. 1983, 99, N26

S₂

1983

8 Б1114. Применение данных фотоэлектронной спектроскопии к оптическим спектроскопическим исследованиям газообразных катионов. Application of data from photoelectron spectroscopy to optical spectroscopic studies of gaseous cations. Dyke J. M., Jonathan N., Morris A. «Mol. Ions: Geom. and Electron. Struct. Proc. NATO Adv. Study Inst., Isle of Kos, Sept. 30—Oct. 10, 1980». New York; London, 1983, 217—220 (англ.)

Спектр, м.п.

Обсуждены возможности использования ряда результатов исследований фотоэлектронных спектров (ФЭС) с высоким разрешением (колебательная и другая структура ФЭС) для анализа и интерпретации оптич. спектров катионов в газовой фазе. Показано, что сопоставление рассчитанных и эксперим. структур оптич. спектров может позволить уточнить значения равновесных межъядерных расстояний в катионных состояниях. На примере использования структуры ФЭС.

Х. 1984, 19, N 8

молекулы S_2 продемонстрировано построение оптич. спектров, соотв-щих переходам между состояниями $A^2\Pi_u \leftarrow X^2\Pi_g$ и $b^4\Sigma_g^- \leftarrow a^4\Pi_u$. Сделан вывод, что предсказания оптич. спектров в результате анализа ФЭС позволяют идентифицировать спектральные области, где должна наблюдаться эмиссия для молек. катионов. Эксперим. идентификация и анализ оптич. спектров эмиссии, в свою очередь, позволяют уточнить спектроскопич. ~~постоянные катионных состояний~~, исследуемых с помощью ФЭС.

И. А. Тополь



S_2^{-}

1983

Clark Robin J. H.,
Dines Trevor J., et al.

u. n. Inorg. Chem., 1983, 22,
N 19, 2766-2772.

●
(cell. Se_2^{-} ; III)

S₂

1983
Muxley P., Murrell J.N.

потемн.
ф-ция
основн.
соединен.

J. Chem. Soc., Faraday

Trans. 2 1983, 79 (2),

323-8.

●
(сел. Zr_2 ; II)

$S_2, S_3, \dots S_8$ Om. 16089 1983

98:81015g Detection of ion states of sulfur, S_2 to S_8 by electron impact. Rosinger, W.; Grade, M.; Hirschwald, W. (Inst. Phys. Chem., Freie Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys. 1983, 47, 239-42 (Eng). Red HgS was heated in the Knudsen cell of a mass spectrometer and the effusing species Hg and S_2 to S_8 were ionized by electron impact (EI). Anal. of the ionization efficiency curves (IEC) revealed numerous appearance potentials (AP) up to 17 eV. All the spectroscopically known ionization potentials (IP) for S_2 and S_8 as well as addnl. energies for autolization processes could be obsd. In the case of S_3 to S_7 where no exptl. data are available for comparison the detd. energies are ascertained to result primarily from direct ionization.

(A.P, y)
~~Mac.~~

(масс спектры)

C.A. 1983, 98, N10.

S₂

Om. 21053

1984

1 Л452. Сенсibilизованная $O_2(a^1\Delta_g)$ хемилюминесценция переходов $a^1\Delta \rightarrow X^3\Sigma^-$ и $b^1\Sigma^+ \rightarrow X^3\Sigma^-$ двухатомных молекул «группа VI — группа VI» и «группа V — группа VII». $O_2(a^1\Delta_g)$ -Sensitized chemiluminescence of a $a^1\Delta \rightarrow X^3\Sigma^-$ and $b^1\Sigma^+ \rightarrow X^3\Sigma^-$ transitions of group VI — group VI and group V — group VII diatomic molecules. Bielefeld M., Elfers G., Fink E. H., Kruse H., Wildt J., Winter R., Zabel F. «J. Photochem.», 1984, 25, № 2—4: COSMO 84: Proc. Conf. Singlet Mol. Oxygen, Clearwater Beach, Fla, Jan. 4—7, 1984, 419—438 (англ.)

спектр

(10) 17



ср. 1985, 18, N1

S₂

В ИК-области спектра изучены переходы $b^1\Sigma^+(b^0+) \rightarrow X^3\Sigma^-(X_1^0+, X_2^1)$ и $^1\Delta(a^2) \rightarrow X^3\Sigma^-(X_1^0+, X_2^1)$ двухатомных молекул типа дихалькогенидов на основе элементов группы VI и моногаллоидов элементов группы V по сенсibilизированной синглетным молекулярным кислородом ($O_2(a^1\Delta_g)$) — хемилюминесценции. Спектральная идентификация переходов $b \rightarrow X$, S_2 , Se_2 и SeS и полосы $a^1\Delta$, $v'=0 \rightarrow X^3\Sigma^-$, $v''=0$ SO проведена путем сравнения ИК-спектров с фурье-преобразованием сенсibilизированной хемилюминесценции этих молекул с рассчитанными с помощью ЭВМ контурами полос. Измерена разрешенная во времени люминесценция $b \rightarrow X$ молекул SO , SeO , NJ , PCl , PBr , SbF , $SbCl$ и $SbBr$ после возбуждения соответствующих молекул импульсным излучением эксимерного лазера, а также радикалов (в разряде) — импульсным излучением лазера на красителе. Получены значения излучательных времен состояний b указанных двухатомных молекул, а также констант скоростей тушений этих состояний He , Ar , H_2 , D_2 , N_2 , CO , O_2 , CO_2 , SO_2 и CH_4 . Библ. 50. Т. А. Ш.

PBr , SbF , $SbCl$, $SbBr$, Se_2 , SeS , SO , SeO , NJ , PCl ,

S₂

am. 21053

1984

2 Б4440. Сенсibilизованная $O_2(^1\Delta)$ хемилюминесценция двухатомных молекул $A^VI B^VI$ и $A^V B^VII$ на переходах $a^1\Delta \rightarrow X^3\Sigma^-$ и $b^1\Sigma^+ \rightarrow X^3\Sigma^-$. $O_2(a^1\Delta_g)$ -Sensitized chemiluminescence of $a^1\Delta \rightarrow X^3\Sigma^-$ and $b^1\Sigma^+ \rightarrow X^3\Sigma^-$ transitions of group VI—group VI and group V—group VII diatomic molecules. Bielefeld M., Elfers G., Fink E. H., Kruse H., Wildt J., Winter R., Zabel F. «J. Photochem.», 1984, 25, № 2—4: COSMO 84: Proc. Conf. Singlet Mol. Oxygen, Clearwater Beach, Fla, Jan. 4—7, 1984, 419—438 (англ.)

спектр, $\tilde{\nu}$

Исследованы переходы $b^1\Sigma^+(b0^+) \rightarrow X^3\Sigma^-(X_10^+, X_21)$ и $a^1\Delta(a2) \rightarrow X^3\Sigma^-(X_10^+, X_21)$ двухатомных молекул $A^VI B^VI$ и $A^V B^VII$ в ближней ИК-области. Использованы след. методы: измерение Хл, импульсный Фт, лазерная Фл. Спектроскопич. идентификация $b \rightarrow X$ переходов S_2 , SeS и Se_2 и полос $a^1\Delta$, $v'=0 \rightarrow X^3\Sigma^-$, $v''=0$ SO достигнута при сравнении эксперим. и рассчитанных на ЭВМ контуров полос Хл, сенсibilизо-

410

X. 1985, 19, №2.

ванной $O_2(^1\Delta)$. Уточнены энергии электронных состояний этих молекул. Для SO, SeO, NJ, PCl, PBr, SbF, SbCl и SbBr по кинетике $b \rightarrow X$ испускания, возбуждаемого при ФТ AgF — (193 нм) или KrF — (248 нм) лазером соотв. молекул — доноров или при Фл этих радикалов, индуцируемой лазером на красителе в разрядно-струевой установке, определены радиац. времена и константы скорости тушения b -состояний. Указаны условия возникновения инверсной заселенности на переходе $S_2(a \rightarrow X)$ при резонансном обмене энергией с $O_2(^1\Delta)$.

Л. Ю. Мельников

S₂

DM 21053

1984

/ 101: 237994u Molecular oxygen($a^1\Delta_g$)-sensitized chemiluminescence of $a^1\Delta \rightarrow X^3\Sigma^-$ and $b^1\Sigma^+ \rightarrow X^3\Sigma^-$ transitions of group VI-group VI and group V-group VII diatomic molecules. Bielefeld, M.; Elfers, G.; Fink, E. H.; Kruse, H.; Wildt, J.; Winter, R.; Zabel, F. (Fachbereich Phys. Chem., Bergische Univ. GH Wuppertal, D-5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *J. Photochem.* 1984, 25(2-4), 419-38 (Eng). The $b^1\Sigma^+(b0^+) \rightarrow X^3\Sigma^-(X_{10}^+, X_{21})$ and $a^1\Delta(a2) \rightarrow X^3\Sigma^-(X_{10}^+, X_{21})$ transitions of group VI-group VI and group V-group VII diat. mols. in the near-IR spectral region were investigated by chemiluminescence measurements, excimer laser pulse photolysis, and dye laser fluorescence. Spectroscopic identification of the $b \rightarrow X$ transitions of S₂, SeS, and Se₂ and of the $a^1\Delta, v' = 0 \rightarrow X^3\Sigma^-, v'' = 0$ band of SO was achieved by comparing medium resoln. Fourier transform IR spectra of the O₂($a^1\Delta_g$)-sensitized chemiluminescence of these mols. with computer-simulated band shapes. Improved data for the electronic state energies of these mols. were obtained. Time-resolved studies of the $b \rightarrow X$ emissions of SO, SeO, NI, PCl, PBr, SbF, SbCl and SbBr following excimer laser pulse photolysis of suitable parent compds. or pulsed dye laser excitation of the radicals in discharge flow systems are reported. Preliminary data for the radiative lifetimes of the b states and quenching rate consts. were deduced. The energy exchange and energy pooling processes operative in the O₂($a^1\Delta_g$)-sensitized chemiluminescence systems and possible population inversions between the vibronic states are discussed.

(b¹Σ⁺-X³Σ⁻)

(49)

C.A. 1984,

101, N26.

S₂

Om. 20884!

1984

Clark R. F. H.,

(Di, We, WeXe)

Chem. Soc. Rev., 1984,
13, N3, 219-244.

S₂

1984

Feng W. L., Novaro O.,
et al.

геометр.,
структ.,
и. п.

Chem. Phys. Lett.,
1984, III, N3, 297-
-302.

●
(cr. O₂; III)

92

ИМ. 18888 1984

9 Л240. Химическое образование и спектроскопия молекул S_2 при расширении в свободной струе. Chemical formation and spectroscopy of S_2 in a free jet expansion. Heaven M., Miller Terry A., Bondybeu V. E. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 51—56 (англ.)

Методом возбуждаемой лазером флуоресценции исследованы возмущения в спектре полосы 2—3 перехода $B-X$ молекул S_2 , обусловленные состоянием $B'^3\Pi_u$. Молекулы S_2 образовывались в свободной сверхзвуковой струе в результате цепочки фотохимич. реакций, индуцированных излучением ArF -лазера: $H_2S + h\nu \rightarrow SH + H$, $H + SH \rightarrow H_2 + S$, $SH + SH \rightarrow H_2S + S$, $S + SH \rightarrow S_2$ ($X^3\Sigma$, $v'' < 9$) + H и охлаждались при расширении струи до вращательной т-ры ≤ 20 К. В результате анализа полученных спектров определены вращательные постоянные изотопозамещенных молекул $^{32}S_2$ и $^{32}S^{34}S$, а также постоянная спин-орбитального расщепления и значение T_e для состояния $B'^3\Pi_u$. Библ. 25.

В. А. Елохин

М. А.

фр. 1984, 18, № 9

S₂

см. 18888

1984

14 Б1163. Химическое образование и спектроскопия S₂ в свободно расширяющейся струе. Chemical formation and spectroscopy of S₂ in a free jet expansion. Heaven M., Miller T. A., Bondybey V. E. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 51—56 (англ.)

В области 300—330 нм измерены возбуждаемые перестраиваемым лазером спектры флуоресценции молекул S₂ в сверхзвуковой струе. Молекулы S₂ получали при фотолизе ArF-лазером молекул H₂S, присутствующих в кач-ве примеси в свободно расширяющемся потоке Ar. На основании кинетич. расчетов предложен радикал-радикальный механизм образования S₂: $H_2S + h\nu \rightarrow SH + H$, $H + SH \rightarrow H_2 + S$, $SH + SH \rightarrow H_2S + S$, $S + SH \rightarrow S_2(X^3\Sigma, v'' \leq 9) + H$. Механизм подтвержден наблюдением в спектре флуоресценции полосы 0—0-перехода A—X радикала SH. Показано, что вращательная т-ра S₂ в струе составляет ≤ 20 К. Зарегистрирован ряд колебательных переходов в системе $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ S₂ и выполнен анализ вращательной структуры полосы 2—3. Наблюдаемые возмущения вращательной структуры объяснены взаимодействием состояния B с

анализ
вращат-
структур

X. 1984, 19, N 14

близлежащим состоянием B''^3P_u . На основании анализа возмущений для $^{32}S_2$ и $^{32}S^{34}S$ и лит. данных по возмущениям уровня $v=1$ состояния B и матричным спектрам S_2 рассчитаны вращательная постоянная ($0,199\text{ см}^{-1}$), постоянная спин-орбитального взаимодействия (202 см^{-1}) и энергия электронного перехода ($31\,474\text{ см}^{-1}$ для компоненты 3P_2) состояния B''^3P_u .

С. Б. Осин

S₂

Am 18888

1984

100: 76739b Chemical formation and spectroscopy of diatomic sulfur in a free jet expansion. Heaven, M.; Miller, Terry A.; Bondyhey, V. E. (Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(1), 51-6 (Eng). H₂S seeded in a free jet expansion of Ar was photolyzed by an ArF laser. The liberated free radical fragments react to form S₂ mols., cooled rotationally by the jet to ≤ 20 K. A detailed rotational anal. of the laser induced fluorescence spectrum of the 2-3, B-X band of S₂ reveals localized perturbations due to the B'' $^3\Pi_u$ state of S₂. A deperturbation anal. for both $^{32}\text{S}_2$ and $^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ spectra yields values for the rotational const., spin-orbit coupling const., and T_e for B'' $^3\Pi_u\text{S}_2$.

назрвост.
физичес.,
химия,
м.н.

С.А. 1984, 100, N10

S_2

[om. 19678]

1984

Klotz R., Marian Ch.,
et al.

$b^1\Sigma^+$,
 $a^1\Delta$ coor.,
 T ;

Chem. Phys., 1984, 89,
N2, 223-236.

S₂

1984

10 Л286. Спектральное распределение послесвечения при импульсном фотолизе паров селена и серы. Лездинь А. Э., Убелис А. П. «Хим. физ.», 1984, 3, № 6, 833—835

Исследовалось спектральное распределение интенсивности послесвечения паров селена и серы. Измерения проводились на установке высокотемпературного импульсного фотолиза при давлении паров селена 0,1 тор и серы — 0,05 тор, т-ре кюветы фотолиза 1000 К, давлении ксенона 15 тор для серы и 18 тор — для селена. Предполагается, что источником послесвечения является фоторекомбинация атомов селена и серы в основных состояниях $ns^2np^4\ ^3P_{0,1,2}$. Предполагается, что состояние серы $S_2(B^3\Sigma_u^-, v')$ заселяется в процессе обратного преддиссоциации, через уровни $S_2(B^3\Sigma_u^-, v' \geq 10)$.

Резюме

спектр

④

Se₂

ф. 1984, 18, N 10

S₂

1984

/ 102: 140171f Fluorescence lifetimes of the $B^3\Sigma_u^-$ and $B'^3\Pi_u$ states of diatomic sulfur. Matsumi, Yutaka; Suzuki, Takanori; Kasuya, Takahiro (Inst. Phys. Chem. Res., Wako, Japan). *Reza Kagaku Kenkyu* 1984, 6, 16-18 (Japan). Fluorescence lifetimes were obtained for individual vibrational-rotational levels of the $B^3\Sigma_u^-$ and $B'^3\Pi_u$ states of S₂ in the supersonic free-jet. The fluorescence lifetimes were in the range of 34.2-49.3 ns for the $B^3\Sigma_u^-$ state and in the range of 108-3888 ns for the $B'^3\Pi_u$ state, which were strongly dependent on the spin-vibrational quantum no. The large variation of the lifetimes was successfully interpreted by the homogeneous interactions between the $B^3\Sigma_u^-$ and $B'^3\Pi_u$ states.

(прогнозы,
2)

C. A. 1985, 102, N. 16-

S₂

1984

102: 140170e Direct observation of the $B'^3\Pi_u-X^3\Sigma_g^-$ transition of diatomic sulfur in a supersonic free jet. Matsumi, Yutaka; Munakata, Toshiaki; Kasuya, Takahiro (Inst. Phys. Chem. Res., Wako, Japan). *Reza Kagaku Kenkyu* 1984, 6, 12-15 (Japan). The laser-induced fluorescence (LIF) spectra of S₂ was studied in a supersonic free-jet expanded from a high temp. nozzle source of 800 K. The lifetime sepn. method was advantageously combined with the LIF detection in the supersonic free-jet. The weak $B'^3\Pi_u-X^3\Sigma_g^-$ band was thereby obsd. successfully in good distinction among the strong $B^3\Sigma_u^--X^3\Sigma_g^-$ band system. The rotational consts. and term values of the vibronic levels $v' = 3-18$, $B'^3\Pi_u(F_1, F_2)$ were evaluated by a rotational anal.

($B'^3\Pi_u-X^3\Sigma_g^-$)

M.N.

C.A. 1985, 102, N16-

S₂

DM. 20015

1984

101: 119745r Direct observation of the $B''^3\Pi_u-X^3\Sigma_g^-$ transition of diatomic sulfur in a supersonic free jet. Matsumi, Yutaka; Munakata, Toshiaki; Kasuya, Takahiro (Inst. Phys. Chem. Res., Wako, Japan 351). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(3), 1108-14 (Eng). The laser-induced fluorescence (LIF) spectra of S₂ were studied for a supersonic free jet which was expanded from a high-temp. nozzle source at 800 K. The lifetime sepn. method was advantageously combined with the LIF detection in the supersonic free jet. The weak $B''^3\Pi_u-X^3\Sigma_g^-$ band was obsd. successfully in good distinction among the strong $B^3\Sigma_u(E_1, E_2)$ band system. The rotational consts. and term values of the vibronic levels $v'=3-18B''^3\Pi_u(F_1, F_2)$ were evaluated by a rotational anal. An inspection of the intensity distribution among the obsd. spectral lines indicates that the $B''^3\Pi_u-X^3\Sigma_g^-$ bands borrow intensity from $B''^3\Sigma_u-X^3\Sigma_g^-$ bands through homogeneous perturbations. The anomalous behavior of mol. const., including the irregular vibronic dependence of the spin-splitting const. of $B^3\Sigma_u^-$, is interpreted in terms of the perturbation from the $B''^3\Pi_u$ state.

 $(B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g^-)$


c. A. 1984, 101, 414

S₂

от 20015

1984

3 B1162. Прямое наблюдение. перехода $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g^-$ двухатомной серы в свободной сверхзвуковой струе. Direct observation of the $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g^-$ transition of diatomic sulfur in a supersonic free jet. Matsuami Yutaka, Munakata Toshiaki, Kasuya Takahiro. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 3, 1108—1114 (англ.)

Исследованы спектры лазерной флуоресценции двухатомной серы в свободной сверхзвуковой струе, вытекающей из источника с нагретым (800 К) кварцевым соплом. За счет использования системы перегрева парц. конц-ия молекул S₂ по сравнению с исходным паром (T=470 К) увеличивается до 10% (мольных). Для измерения слабой системы $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g^-$ (280—335 нм) на фоне интенсивной системы $B_3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ регистрация спектра Фл осуществлялась с задержкой (250 нс) относительно возбуждающего импульса лазера (перестраиваемый в области 560—670 нм лазер на красителе с удвоением частоты). Проанализирована

спектр,

М.П.

X. 1985, 19, N3.

вращательная структура полос. Приведены волновые
 числа кантов полос $v' = 3-18-v'' = 0-4$
 (компоненты с различными значениями Ω' , $\Omega'' = 0, 1$);
 эффективные значения вращательных постоянных
 $B_{v'}$ ($\Omega' = 0e$ и 1) состояния B'' ; значения $T_{v'e}$ (отно-
 сительно компоненты F_2 состояния $X^3\Sigma_g^-$); значения
 $A_{v'}$ и $\Delta G_{v'}$ ($v' = 3-18$). Анализ распределения интен-
 сивности полос в системе $B''-X$ показал, что за счет
 гомогенных возмущений $B''^3\Pi_u \leftrightarrow B^3\Sigma_u^-$ происходит
 заимствование интенсивности от перехода $B-X$.
 В свою очередь, аномальное поведение молек. по-
 стоянных, включая константу спинowego расщепления,
 в состоянии $B^3\Sigma_u^-$ интерпретировано как результат
 возмущения, вызываемого состоянием $B''^3\Pi_u$.
 В. М. Ковба

S₂

DM. 20015

1984

3 Л486. Прямое наблюдение перехода $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g$ - молекулы двухатомной серы в свободной сверхзвуковой струе. Direct observation of the $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g$ - transition of diatomic sulfur in a supersonic free jet. Matsumi Yutaka, Munakata Toshiaki, Kasuya Takahiro. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 3, 1108—1114 (англ.)

Методом возбуждаемой лазером флуоресценции с разрешением во времени получены спектры слабого перехода $B''^3\Pi_u - X^3\Sigma_g$ - молекулы S₂. Возбуждение молекул S₂ осуществлялось в свободной сверхзвуковой струе образующейся при расширении в вакуум паров серы в смеси с газом — носителем через сопло, имеющее т-ру 800 К. Это позволило достигнуть эффективного разделения слабого перехода $B'' - X$ и горячих полос интенсивной системы $B - X$. На основании вращательного анализа спектров определены спектроскопич. постоянные состояний $v' = 3 - 18$ $B''^3\Pi_u$ (F₁, F₂). Обсуждены причины возмущений вращательных уровней в спектрах.

В. А. Е.

М.Н.

ср. 1985, 18, №3

S₂

1984

McLean A.D., Liu B.,
et al.

теор. J. Chem. Phys. 1984,
расчет. 80 (10), 5130-40.

($\bullet$ Al_2^+ ; III)

1984

S₂

10 Л241. Поглощение света молекулами $^{32}\text{S}_2$ и $^{34}\text{S}_2$, изолированными в матрице аргона, в области $30\,000 \div 36\,000 \text{ см}^{-1}$. Прихотько А. Ф., Навлощук В. А., Панасюк А. В., Шанский Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1984, 56, № 6, 1007—1014

Исследованы электронные переходы $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ и $B''^3\Pi_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ в спектре поглощения матрично изолированных молекул S_2 . Показано, что взаимное возмущение колебательных уровней состояний $B^3\Sigma_u^-$ и $B''^3\Pi_u$ приводит к характерному чередованию укороченных и удлиненных колебательных квантов и к установлению соразмерной величины квантов обоих состояний. (два кванта в $B^3\Sigma_u^-$ по величине равны трем смежным квантам в $B''^3\Pi_u$). Светом возбуждаются компонент $S_z=0$, расположенный на 50 см^{-1} выше компонентов $S_z=\pm 1$ состояния $B^3\Sigma_u^-$, а также нижайший компонент $\Omega=0$ состояния $B''^3\Pi_u$. Интенсивность перехода $B''^3\Pi_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ заимствуется от сильного перехода $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ в результате взаимодействия возбужденных состояний.

Резюме

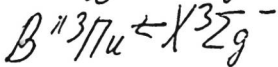
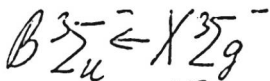
спектр в
матрице,
М. П.

фр. 1984, 18, N10

S_2

1984

101:160465n Absorption of light by sulfur ($^{32}S_2$ and $^{34}S_2$) molecules isolated in an argon matrix at 30,000-36,000 cm^{-1} . Prikhot'ko, A. F.; Pavloshchuk, V. A.; Panasyuk, A. V.; Shanskii, L. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1984, 56(6), 1007-14 (Russ). The electronic transitions $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ and $B'^3\Pi_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ were studied of matrix isolated S_2 mols. Mutual disorder of vibrational levels of the states $B^3\Sigma_u^-$ and $B'^3\Pi_u$ leads to a character of alternative shortening and lengthening of vibrational quanta and to the establishment in proportion to the value quanta of states. By light the component $S_2 = 0$ arranged 50 cm^{-1} higher than components $S_2 = \pm 1$ is excited to state $B^3\Sigma$ in and also to the lower component $\Omega = 0$ of the state $B'^3\Pi_u$.



C.A. 1984, 101, ~18

52

1984

20 В4371. Поглощение света молекулами $^{32}\text{S}_2$ и $^{34}\text{S}_2$, изолированными в матрице аргона, в области 30 000—36 000 см^{-1} . Прихотько А. Ф., Павлощук В. А., Панасюк А. В., Шанский Л. И. «Оптика и спектроскопия», 1984, 56, № 6, 1007—1014

Исследованы электронные переходы $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ и $B''^3\Pi_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ в спектре поглощения матрично изолированных молекул S_2 . Показано, что взаимное возмущение колебат. уровней состояний $B^3\Sigma_u^-$ и $B''^3\Pi_u$ приводит к характерному чередованию укороченных и удлиненных колебат. квантов и к установлению соразмерной величины квантов обоих состояний (два кванта в $B^3\Sigma_u^-$ по величине равны трем смежным квантам $B''^3\Pi_u$). Светом возбуждаются компонента $S_z=0$, расположенная на 50 см^{-1} выше компонент $S_z=\pm 1$ состояния $B^3\Sigma_u^-$, а также нижайший компонент $\Omega=0$ состояния $B''^3\Pi_u$. Интенсивность перехода $B''^3\Pi_u \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ заимствуется от сильного перехода $B^3\Sigma_u^- \leftarrow X^3\Sigma_g^-$ в результате взаимодействия возбужденных состояний.

Резюме

спектр
в
матрице

X. 1984, 19, N 20

S₂

ДМ. 19352

1984

12 Л498. Хемилюминесценция в реакции щелочно-земельных элементов с SCl₂: инверсия колебательной населенности в состоянии B молекул S₂. Alkali — SCl₂ chemiluminescence. Vibrational population inversion in the B state of S₂. Wright J. J., Balling L. C. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 3, 214—216 (англ.)

В спектральной области 380—700 нм. исследована хемилюминесценция (ХЛ) молекул S₂(B³Σ_u⁻ → X³Σ_g⁻), образующихся в реакции SCl₂ с K, Rb и Cs в газовой фазе при давлении реагентов < 1 мм рт. ст. Установлено, что добавление в реактор буферного газа (Ar, He) при давлении несколько мм рт. ст. приводит к значительному перераспределению интенсивности в спектрах ХЛ с усилением переходов с возбужденных колебательных уровней v' = 6—9 состояния B³Σ_u⁻-S₂. Предложено, что в присутствии буферного газа основным каналом образования S₂(B) становится реакция трехчастичной рекомбинации S(³P) + S(³P) + M → S₂(B) +

спектр

Ф. 1984, 18, N 12.

$\dagger$ М, протекающая с образованием промеж. частицы $S_2(1u)$. Пересечение кривых потенц. энергии состояний $1u$ и $B^3\Sigma_u^-$ вблизи уровня $v'=0$ последнего обуславливает преимущественное заселение уровней $v'=6-9$ этого состояния. Сделан вывод о возможности разработки химич. лазера с излучением в видимой области спектра при переходах в $S_2(B \rightarrow X)$. С. В. Литке

S₂

Ом. 19352

1984

21 Б4516. Хемилюминесценция [в реакциях] щелочных металлов с SCl_2 : инверсия населенности колебательных уровней в B -состоянии S_2 . Alkali- SCl_2 chemiluminescence: vibrational population inversion in the B state of S_2 . Wright J. J., Balling L. C. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 108, № 3, 214—216 (англ.)

спектр

Изучена Хл в р-циях между атомами щел. металлов ($M = \text{K}, \text{Rb}$ и Cs) и SCl_2 в статич. системе. Давл. паров $M \sim 10^{-3} - 1$ Торр, исследуемый спектральный диапазон $\sim 380 - 700$ нм. В отсутствие буф. газа в спектрах Хл преобладает излучение M , наблюдается также синяя Хл, соотв. переходам $\text{S}_2(B^3\Sigma_u^- - v' = 0, 1 \rightarrow X^3\Sigma_g^-)$. При добавлении 1—10 Торр буфера (He или Ar) возникает Хл на переходах $\text{S}_2(B, v' > 6 \rightarrow X)$ (красное свечение) и подавляется синяя Хл и излучение M . Авторы предполагают, что синяя Хл возникает в результате р-ции $\text{S}(^1D) + \text{SCl}^*(X^2\Pi) \rightarrow \text{S}_2(B^3\Sigma_u^-) + \text{Cl}(^2P)$, заселяющей уровни $v' = 0, 1$ $\text{S}_2(B)$, причем возбужденные атомы серы

Х. 1984, 19, N 21

и колебат.-возбуждённые молекулы SCl^* образуются при отщеплении атомов Cl от SCl_2 в р-циях с M . Добавка буфера уменьшает скорость бимолек. р-ций относительно р-ции трехчастичной рекомбинации $\text{S}(^3\text{P}) + \text{S}(^3\text{P}) + \text{M} \rightarrow \text{S}_2(\text{B}, v' < 10) + \text{M}$, являющейся по мнению авторов, источником красной Хл. Заселение B -состояния в процессе обратной преддиссоциации приводит к инверсии населенности его колебат. уровней. Высказано мнение, что переходы $\text{S}_2(\text{B} \rightarrow \text{X})$ пригодны для создания хим. лазера видимого диапазона. Л. Ю. Мельников

S₂ f

Om. 19352

1984

101: 81076h Alkali-sulfur dichloride chemiluminescence: vibrational population inversion in the B state of diatomic sulfur. Wright, J. J.; Balling, L. C. (Dep. Phys., Univ. New Hampshire, Durham, NH 03824 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 108(3), 214-16 (Eng). S₂(B-X) chemiluminescence, primarily from $v' = 0$ and 1, was obsd. in alkali atom-SCl₂ reactions. The addn. of He or Ar buffer gas to the reaction chamber alters the reaction dynamics, and at certain buffer gas pressures the S₂ emission originates exclusively from the $v' = 6-9$ vibrational levels of the B(³Σ_g⁻) state.

(B-X)

chemiluminescence.

C.A. 1984, 101, N10