

2

DM 21201

1985

10 J1196. Определение изменения электронного момента перехода В—Х молекулы  $J_2$  из спектра лазерно-возбужденной флуоресценции. A study of variation of electronic transition moment of the B—X system of  $I_2$  from its laser-excited fluorescence spectrum. Bha-  
le G. L., Ahmad S. F., Reddy S. Paddi. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 4, 645—655 (англ.)

спектр флуо-  
ресценции

Получен спектр флуоресценции системы  $B^3\Pi_{0^+} - X^1\Sigma_g^+$  молекулы  $J_2$  в области 5200—8500 Å, возбуждаемый излучением  $Ar^+$ -лазера, 5145 Å. Используя измеренные интенсивности вращательных линий P(17) для 38 уровней ( $u'=43, v''$ ) и коэф. Франка—Кондона, рассчитанные с использованием молекулярных постоянных для состояний В и Х определена зависимость электронного момента перехода,  $|M(\bar{R})|^2$  от межъядерного расстояния в области  $R=2,65-3,09$  Å. Установлено, что зависимость  $|M(\bar{R})|^2$  имеет максимум при  $R=2,83$  Å и может быть аппроксимирована полиномом четвертой степени. Библ. 21.

М. А.

сф. 1985, 18, № 10

92

1985

7 Б1185. Уширение давлением He и Xe ядерного сверхтонкого спектра  $^{127}\text{J}_2$ . Pressure broadening of the nuclear hyperfine spectrum of  $^{127}\text{J}_2$  by He and Xe. Astill A. G., McCaffery A. J., Proctor M. J., Seddon E. A., Whitaker B. J. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 18, 3745—3757 (англ.)

Методом поляризац. спектроскопии исследовано уширение давл. He и Xe индивидуальных линий СТС вращат. структуры (P-ветвь) полосы 17—1 перехода  $\text{B}^3\text{Po}^+ - \text{X}^1\Sigma_g$  молекулы  $^{127}\text{J}_2$ . Приведены коэф. уширения

давлением, сечения и константы спин-вращат. взаимодействия,  $C_I$ , для отдельных линий вращат. структуры. Уширение линий является мерой полной (основного и возбужденного состояний) скорости реориентации молекул, а изменение интенсивности линий с давл. связано с усредненной скоростью неупругой реориентации. Для системы  $\text{J}_2\text{—He}$  эта величина составляет  $0,70 \pm 0,06$  МГц/мм. Величина  $C_I$  обратно пропорциональна  $J''(J''+1)$ , что объясняется влиянием взаимодействия состояния  $\text{B}^3\text{Po}^+$  с состоянием  $\text{I}_u$ .

В. М. Ковба

спектр

X. 1986, 19, №7.

24  
2

1985

4 Л233. Уширение спектра ядерного сверхтонкого [взаимодействия]  $^{127}\text{J}_2$  при столкновениях с He и Xe. Pressure broadening of the nuclear hyperfine spectrum of  $^{127}\text{J}_2$  by He and Xe. Astill A. G., McCaffery A. J., Proctor M. J., Seddon E. A., Whitaker B. J. «J Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 18, 3745-3757 (англ.)

Методом поляризационной спектроскопии исследовалось столкновительное уширение отдельных линий сверхтонкого расщепления вращательных переходов в Р-ветви перехода  $^1\Sigma(v''=1) \rightarrow ^3\Pi_{0u} + (v'=17)$  в  $\text{J}_2$ . Получены зависимости сечений неупругой реориентации на переходах  $F''=J \rightarrow F'=J-1$  ( $T=4$ ) для газов He и Xe от значения  $J$ . При больших  $J$  эти зависимости подобны — сечения возрастают, стремясь в пределе соответственно к 61 Å и 225 Å. Однако при малых  $J$  наблюдалось увеличение сечения для  $\text{J}_2\text{—Xe}$ . Это отличие связывается с длительностью взаимодействия атома инерт-

М.П.

ср. 1986, 18, № 4

ного газа и  $J$ , а также с величиной межмолекулярного потенциала. Наблюдалась обратная пропорциональная зависимость константы вращения спина  $C_1$  от параметра  $J''(J''+1)$ , что соответствует предсказанному ее поведению на основе рассмотрения взаимодействия состояний  $B^3P_{cu}+$  и  $1_u$ . Библ. 23. В. Н. Федосеев





$I_2$

Am. 21201

1985

102: 157236d A study of variation of electronic transition moment of the B-X system of molecular iodine from its

laser-excited fluorescence spectrum. Bhale, G. L.; Ahmad, S. F.; Reddy, S. Paddi (Dep. Phys., Meml. Univ. Newfoundland, St. John's, NF Can. A1B 3X7). *J. Phys. B* 1985, 18(4), 645-55 (Eng). Fluorescence in the  $B^3\Pi_{0u} - X^1\Sigma_g^+$  system of  $I_2$  excited with 5145 Å radiation of an argon ion laser was recorded photoelec. in the region 5200-8500 Å on a SPEX 0.85 m double monochromator. Using the measured intensities of P(17) rotational lines of 38 ( $\nu' = 43, \nu''$ ) bands and the Franck-Condon factors based on the recent mol. data of the B and X states, the variation of the sq. of the electron transition moment,  $[M(R)]^2$ , with  $R$  centroid in the range  $R = 2.65-3.09$  Å was studied. It was noticed that the electronic transition strength has a max. value at  $R = 2.83$  Å and is presented by the relation  $[M(R)]^2 = \text{const. } (-500.358 + 377.125R - 38.483R^2 - 25.429R^3 + 4.9831R^4)$ . Present results are discussed in relation to those obtained from earlier studies.

B-X, crkmp  
фнгоpecия.

C. A. 1985, 102, N18.

У  
2

Om 21 201

1985

17 Б1154. Изучение изменения электронного момента перехода системы  $B-X$   $J_2$  на основании данных по спектру флуоресценции возбуждаемой лазером. A study of variation of electronic transition moment of the  $B-X$  system of  $J_2$  from its laser-excited fluorescence spectrum. Bhale G. L., Ahmad S. F., Paddi Reddy S. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 4, 645—655 (англ.)

Измерены (фотоэлектрич. система регистрации) спектры флуоресценции молекулы  $J_2$  (переход  $B^3\Pi_{0u}^+ - X^1\Sigma_g^+$ ) возбуждаемые  $Ar^+$ -лазером ( $\lambda = 514,5$  нм). На основании эксперимент. интенсивностей линий  $P(17)$  полос ( $v' = 43 - v'' = 2 - 34, 36, 38, 40, 42$ ) и факторов Франка—Кондона; вычисленных по известным молек. постоянным  $J_2(B, X)$  получена следующая зависимость квадрата электронного момента перехода,  $|M(\bar{R})|^2$ , от  $\bar{R}$  — центриды ( $\bar{R} = 2,65 - 3,09$  А):  $|M(\bar{R})|^2 = const (-500,358 + 377,125\bar{R} - 38,483\bar{R}^2 - 25,429\bar{R}^3 + 4,9831\bar{R}^4)$ . Максим. значение — при  $\bar{R} = 2,83$  А.

В. М. Ковба

спектр

факторы

Франка-Кон  
дона

Х. 1985, 19, N 17.

Y  
2

Om. 22896

1985

103: 95243p The  $\beta(1_g)$  ion-pair state of diatomic iodine. Brand, J. C. D.; Hoy, A. R.; Tse, D. C. P. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *Can. J. Spectrosc.* 1985, 30(2), 43-5 (Eng). The ion-pair state  $\beta$  of  $I_2$  is efficiently pumped by the double resonance  $\beta(1_g) \leftarrow A(1_u, 3\pi) \leftarrow X(0^+_g, 1\Sigma^+)$ . This observation confirms beyond doubt the  $1_g$  assignment for the  $\beta$  state, previously known as the upper state of a weak perpendicular band system  $\beta \leftarrow (0^+_u)$  embedded in a complex, controversial spectrum mediated by perturbations.

( $\beta(1_g)$  com.)

C. A. 1985, 103, N12

$T_2$

1985

Chau F.T., McDowell C.A.

cent. notes, 7. Allol. Street.  
Y, 2e; 1985, 129 (1-2),  
169-73.

(Cen. F<sub>2</sub>; III)

$\text{F}_2^-$

1985

Chen E. C. M.,  
Wentworth W. E.

pacrēer  
et. n.,  
Do, Ae;

J. Phys. Chem., 1985,  
89, N19, 4099-4105.

●  
(c.c.  $\text{F}_2^-$ ; III)

Л<sub>2</sub>

От 21895

1985

У 9 Л158. Сверхтонкая структура колебательно-вращательных линий  $^{127}\text{J}^{129}\text{J}$  в области 612 нм. Hyperfine spectrum of a ro-vibrational line of  $^{127}\text{J}^{129}\text{J}$  at 612 nm. Cheng-jiu Wu, Gaida G., Bialas J. «Metrologia», 1985, 21, № 1, 1—5 (англ.)

Описана установка для внутривибрационной лазерной спектроскопии насыщения, включающая в себя лазеры He—Ne с 3-зеркальными резонаторами. Получены спектры молекулы  $^{127}\text{J}^{129}\text{J}$  в области 16340,67—16340,70 см<sup>-1</sup> с разрешением 4,5 МГц. Разрешена сверхтонкая структура, обусловленная электрическим квадрупольным расщеплением, приведены частоты линий. Измерены коэф. поглощения. Определены константы сверхтонкого расщепления по ядрам  $^{129}\text{J}$  и  $^{127}\text{J}$ . Обсуждается использование молекулы для стабилизации частот генерации лазеров. М. В. Тонков

М.П.

ср. 1985, 18, № 9

1985

92

21 Б4244. Резонансно-усиленная энергетическая структура оптически накачиваемых молекул йода. Resonance-enhanced energy structure of optically pumped iodine molecules. Dimov S. S., Pavlov L. I., Khadzhiisky N. G., Altshuller G. B. «Spectrosc. Lett.», 1985, 18, № 2, 89—104 (англ.)

Предложена новая схема регистрации спектров когерентного антистоксовского КР, применимость которой продемонстрирована для молекул  $J_2$  в газовой фазе при давл. 0,23 Торр. В обычном методе два лазерных фотона  $\omega_2$  и один фотон  $\omega_d$  преобразуются в фотон антистоксовского КР с частотой  $\omega_a$ . Путем изменения разности  $\omega_2 - \omega_d$  в области частот молекулы, активных в КР, можно обнаружить сигнал КР. Когда в этом резонансном процессе участвуют только дискретные уровни молекулы, антистоксовский сигнал КР интенсивен, но полный спектр содержит два набора дублетов, что затрудняет его расшифровку. В предложенной схеме

М.А.

X. 1985, 19, № 21

промежут. состояния для частоты  $\omega_2$  являются дискретными уровнями, а конечные состояния антистоксовского сигнала  $\omega_d$  принадлежат к континууму, лежащему выше порога диссоциации возбужденного В-состояния. Это дает более простой спектр при меньшем перекрывании двух наборов дублетов. В опытах применяли импульсный перестраиваемый лазер на красителе, дающий частоту  $\omega_d$  со спектральной шириной  $\Delta\nu_d = 0,1 \text{ см}^{-1}$ . Источником постоянной частоты  $\omega_2$  служит неодимовый лазер с удвоением частоты с  $\Delta\nu_2 = 0,013 \text{ см}^{-1}$ . Настройку разности  $\omega_2 - \omega_d$  в резонанс с различными колебат. состояниями производили путем изменения  $\omega_2$ . Приведены спектры когерентного антистоксовского КР  $J_2$  в области полос 6-го и 7-го обертонов и дана их идентификация.

В. Е. Скурат





I<sub>2</sub>

1985

102: 175402] Resonance-enhanced energy structure of optically pumped iodine molecules. Dimov, S.; Pavlov, L.; Khadzhiiski, N.; Al'tshuller, G. B. (Fac. Phys., Sofia Univ., 1126 Sofia, Bulg.). *Spectrosc. Lett.* 1985, 18(2), 89-104 (Eng). A new scheme of CARS in I<sub>2</sub>, when the intermediate states for the pump frequency are discrete levels, but the final states of the anti-Stokes signal belong to the continuum, is proposed. Several CARS resonances at room temp., in the 6th and 7th overtone bands are recorded and identified in terms of Q and S branches. Main advantages of the techniques, which is useful for assignments of the mol. lines or for simpler detection of the interacting waves, are demonstrated.

(CARS)

C.A. 1985, 102, N 20

2/2

Em. 23039

1985

Amitrieva I. R., Zere-  
vich V. A., et al.,

кривые  
потенц.  
энергии,  
теор.  
расчет.

Chem. Phys. Lett., 1985,  
121, N 6, 485-489.

(сер. N<sub>2</sub> III)

у  
2

От 22792

1985

10 Б4382. Флуоресценция ионной пары и ридберговских состояний  $J_2$ . Fluorescence from ion-pair and Rydberg states of  $J_2$ . Donovan R. J., O'Grady B. V., Shobatake K., Hiraya A. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 6, 612—616 (англ.).

С использованием синхротронного излучения определены спектры поглощения и Фл  $J_2$  в вакуумной УФ-области (1100—2100 Å). Широкая полоса в области 1760—2000 Å отнесена к поглощению ионной пары, два максимума в ней — к переходам в состояния  $D(0_u^+)$  и  $1_u$ , резкие пики в области 1320—1760 Å к переходам Ридберга, а широкое непрерывное поглощение <1320 Å к переходам с фотоионизацией  $J_2$ . Сильная полоса Фл 1720—2000 Å связана с переходом из состояния  $D(0_u^+)$  ионной пары. Фл в области 1320—1500 Å отнесена к излучению возбужденных атомов, образующихся за счет преддиссоциации ридберговских состояний.



Спектр

х. 1986, 19, № 10

92

(Om. 22792)

1985

78179a Fluorescence from ion-pair and Rydberg states of atomic iodine. Donovan, R. J.; O'Grady, B. V.; Shobatake, K.; Fays, A. (Dep. Chem., Univ. Edinburgh, Edinburgh, UK EH9 3JH). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 122(6), 612-16 (Eng). Absorption and fluorescence excitation spectra of  $I_2$  were recorded at 1100-2100 Å using synchrotron radiation. The strongest fluorescence was excited at 1730-2000 Å and was assocd. with the  $D(O_u^+)$  ion-pair state; fluorescence at 1320-1500 Å was assigned in part to excited ions formed by predissocn. of Rydberg states.

(check  
properties.)

C.A. 1986, 104, N 10

92

Om. 21049

1985

15 Б1168. Анализ дальнедействующей части потенциала йода в состоянии  $B^3\Pi^+_{ou}$ . Analysis of the long range potential of iodine in the  $B^3\Pi^+_{ou}$  state. Gerstenkorn S., Luc P., Amiot C. «J. Phys.» <Fr.>, 1985, 46, № 3, 355—364 (англ.; рез. фр.)

Методом обращенного возмущения, с использованием на начальном этапе потенциал РКР, вычисленный из коэф. Данхема, и коэф. разложения постоянных центростремительного искажения, рассчитана потенциальная кривая молекулы  $J_2$  в состоянии  $B^3\Pi^+_{ou}$  до уровня  $v=80$ , лежащего на  $1,64 \text{ см}^{-1}$  ниже диссоционного предела. Согласно результатам расчета внешняя ветвь потенциальной кривой может быть представлена в виде  $E = D_e - \sum C_n/R^n$ . Значения  $D_e$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) и  $C_n$  (в  $\text{см}^{-1} \cdot \text{А}^n$ ):  $4381,249$ ,  $C_5 = 3,161 \cdot 10^5$ ,  $C_6 = 1,506 \cdot 10^6$ ,  $C_8 = 0,248 \cdot 10^8$ ,  $C_{10} \leq 0,042 \cdot 10^{10}$ . Показано, что  $D_e$  и  $C_n$  не зависят от числа используемых поворотных точек  $P_t$ , а вклад члена  $C_{12}/R^{12}$  пренебрежимо мал.

В. М. Ковба

М. П., До

X. 1985, 19, N 15

92

DM-21049

1985

7 Д46. Анализ потенциальной энергии молекулы йода в состоянии  $B^3\Pi_{0u}^+$  при больших межъядерных расстояниях. Analysis of the long range potential of iodine in the  $B^3\Pi_{0u}^+$  state. Gerstenkorn S., Luc P., Amiot C. «J. Phys.» (Fr.), 1985, 46, № 3, 355—364 (англ.; рез. фр.)

На основании эксперим. данных о 17 800 колебательно-вращательных переходах серии В—Х в молекуле  $J_2$  при помощи обратного метода возмущений рассчитана ф-ция потенц. энергии электронного состояния  $B^3\Pi_{0u}^+$  в широкой области значений межъядерных расстояний ( $R=2,6\div 12,3$  Å). Для полученной ф-ции определены колебательные термы с квантовыми числами  $0\leq v\leq 80$  и соответствующие им значения вращательных постоянных. Дальнействующая ветвь потенциала, соответствующая поворотным точкам состояний с  $v=72\div 80$ , аппроксимирована мультипольным разложением, включающим члены порядков  $R^{-5}-R^{-10}$ , при этом получена оценка для энергии диссоциации молекулы  $D_e=4381,249\pm 0,001$  см $^{-1}$ . Обсуждается корректность пренебрежения обменными эффектами и сверхтонким взаимодействием при больших значениях  $R$ . Библ. 31. А. В. Зайцевский

М.Н., Яо;

ф. 1985, 18, № 7

72

[Om. 21049]

1985

гальногійств.  
потенциал в  
в  $3\Pi_{ou}^+$  сост.

102: 172910n Analysis of the long range potential of iodine in the B  $3\Pi_{ou}^+$  state. Gerstenkorn, S.; Luc, P.; Amiot, C. (Lab. Aime Cotton, CNRS, 91405 Orsay, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1985, 46(3), 355-64 (Eng). A quantum-mech. potential-energy curve (inverted-perturbation-approach potential) of the (Ii) B  $3\Pi_{ou}^+$  state was detd. The anal. of the outer branch of this potential (which encompasses 99.96% of the depth well from  $\delta = 0$  to  $v = 80$ ) was done by means of multipole-expansion of the interaction energies truncated up to the  $C_{10}/R_v^{10}$  term; the exchange energies  $V_{ex}(R)$  were small, and might even be canceled by the contribution of the neglected term  $C_{12}/R_v^{12}$ . The dissocn. energy limit  $D_e$  and the long-range, multipole-expansion  $C_n$  coeffs. obtained did not depend on the no. of turning points considered.



C.A. 1985, 102, 420

2

1985

20 Б1192. Описание спектра поглощения иода, полученного на фурье-спектрометре; система полос ( $B-X$ ). Description of the absorption spectrum of iodine recorded by means of Fourier transform spectroscopy: the ( $B-X$ ) system. Gerstenkorn S., Luc P. «J. phys.» (Fr), 1985, 46, № 6, 867—881 (англ.; рез. фр.)

Проведен теорет. анализ колебат.-вращат. структуры системы полос излучения электронного перехода  $B-X$  молекулы  $I_2$ , измеренной авторами ранее на фурье-спектрометре с разрешением  $0,01 \text{ см}^{-1}$  и опубликованной в виде атласа. Анализ проведен с использованием полиномиального выражения для колебат.-вращат. энергии состояний  $B$  и  $X$ . Из частот  $>100\,000$  линий в области  $11000-20040 \text{ см}^{-1}$  вычислены значения 46 спектроскопич. постоянных  $Y_{vi}$ . Расчет охватывает все колебат. уровни с  $v' \leq 19$  основного состояния  $X$  и уровни  $v' \leq 80$  возбужденного состояния  $B$  (уровень с  $v'=80$  расположен всего на  $1,6 \text{ см}^{-1}$  ниже порога диссоциации). Полученный набор постоянных описывает частоты всех линий со станд. отклонением  $0,002 \text{ см}^{-1}$ .

Е. В. Алиева

М.П.

х. 1985, 19,  
N 20



1985

J<sub>2</sub>

(B-X)

, 103: 29549s Description of the absorption spectrum of iodine recorded by means of Fourier transform spectroscopy: the (B-X) system. Gerstenkorn, S.; Luc, P. (Lab. Aime Cotton, CNRS II, 91405 Orsay, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1985, 46(8), 867-81 (Eng). An in extenso anal. of the (B-X) I<sub>2</sub> absorption spectrum recorded by means of Fourier transform spectroscopy is presented. The 100,000 recorded transitions covering the 11,000-20,040 cm<sup>-1</sup> range and published in several Atlases may be recalcd. by means of only 46 consts.: 45 are Dunham coeffs. describing the vibrational and rotational consts. of both X state (up to v'' = 19) and B state (up to v'' = 80, situated only at 1.6 cm<sup>-1</sup> from the disocn. limit of the B state), and 1 empirical scaling factor which takes account of neglected centrifugal consts. higher than M<sub>r</sub>. The overall std. error between computed and measured wavenumbers is equal to 0.002 cm<sup>-1</sup> in agreement with the differences of numerous independent abs. wavenumbers and the computed ones.

P. A. 1985; 103, N 4.

92

Am 21715

1985

1 Л195. Идентификация компонент сверхтонкой структуры молекулы иода в области 640 нм. Identification of hyperfine structure components of the iodine molecule at 640 nm wavelength. Gläser M. «Opt. Commun.», 1985, 54, № 6, 335—342 (англ.)

Рассчитаны частоты и относит. интенсивности колебательно-вращательных переходов молекул  $^{127}\text{J}_2$ ,  $^{129}\text{J}_2$  и  $^{127}\text{J}^{129}\text{J}$  в области 640 нм. Приведены интерполяционные ф-лы для различных электронных квадрупольных  $\Delta_e Q_q$  и спин-вращательных констант  $\Delta C$  молекулы  $^{127}\text{J}_2$ . Идентифицировано большинство известных линий сверхтонкой структуры в области 640 нм. М. А.

М. А.

ср. 1986, 18, 41

24

От 21715

1985

24 Б1198. Идентификация компонент сверхтонкой структуры молекулы иода в области 640 нм. Identification of hyperfine structure components of the iodine molecule at 640 nm wavelength. Gläser M. «Opt. Commun.», 1985, 54, № 6, 335—342 (англ.)

Рассчитаны частоты и относит. интенсивности линий колебательно-вращат. структуры перехода  $B-X$  молекул  $^{127}\text{J}_2$ ,  $^{127}\text{J}_2$  и  $^{127}\text{J}^{123}\text{J}$ , лежащих вблизи длины волны излучения HeNe лазера в обл. 640 нм. Дан перечень переходов  $(v'I' - v''I'')$ , для к-рых приведены значения факторов Франка — Кондона, энергии, рассчитанные и относит. интенсивности. Для разностей электр. квадрупольных постоянных,  $\Delta eQq$ , и постоянных спин-вращат. взаимодействия,  $\Delta C$ , молекулы  $^{127}\text{J}_2$  получены след. интерполяц. выражения:  $\Delta eQq$  (МГц) =  $1973,0307 - 0,020960 G(v') - (1,44051 E_r(v'I')) / (D_e - E(v'))$ ,  $\Delta C = 42993,4 [D_e - G(v')]^{0,82575} - 28,7532$ . Идентифицирован ряд ранее наблюдавшихся слабых линий в спектре.

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1985, 19, № 24

92

(Om. 21715)

1985

103: 131548c Identification of hyperfine structure components of the iodine molecule at 640 nm wavelength. Glaeser, Michael (Bur. Int. Poids Mes., F-92310 Sevres, Fr.). *Opt. Commun.* 1985, 54(6), 335-42. (Eng). The frequencies and the relative intensities of rotation-vibration transitions of  $^{127}\text{I}_2$ ,  $^{129}\text{I}_2$  and  $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$  near the He-Ne laser emission wavelength of 640 nm were calcd. Interpolation formulas for the differences of the elec. quadrupole consts.  $\Delta eQq$  and of the spin-rotation consts.  $\Delta C$  of  $^{127}\text{I}_2$  are given. Most of the weak satd.-absorption lines, elsewhere published, have been identified as cross-over and forbidden lines of the transitions  $P(10)8-5$  and  $R(16)8-5$ .

CNEMF

C.A. 1985, 103, N 16.

2  
2

[OM. 23269]

1985

Gobeli D. A., Yang J.  
et al.

спектр

4

массспектр  
(библиогр.  
обзор)

Chem. Rev., 1985,  
85, N 6, 529-554.

9  
2

1985

5 Д52 ДЭП. Вычисление структурных и колебательных констант двухатомных молекул с использованием потенциала Морзе. Горшенков В. Н., Янкина А. А.; Горьк. гос. пед. ин-т. Горький, 1984. 7 с. Библиогр. 6 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 11 февр. 1985 г., № 1095—84 Деп.)

Структурные и колебательные константы молекул  $J_2$  и  $H_2$  найдены методом эффективного гармонич. осциллятора (ЭГО) с использованием потенциала Морзе в качестве межатомного потенциала. Автореферат

геометр.,  
структура,  
м.п.

(4) 17

фр. 1985, 18, N 5

$\gamma_2$

1985

Jenč F., Brandt B. A.

кривые  
потемн.  
энергии  
основн.  
состоян.

J. Quant. Spectrosc. and  
Radiat. Transfer, 1985,  
33, N 6, 597-602.

● (см. Mg Ce; III)

22

1985

6 Л207. Высоковозбужденное отталкивательное состояние  $J_2$  исследованное методом тройного оптического резонанса. A highly excited repulsive state of  $J_2$  studied by an optical triple resonance. Kasatani Kazuo, Ito Junichi, Kawasaki Masahiro, Sato Hiroyasu. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 1—2, 113—117 (англ.)

Состояние  $J_2(1u)$ , коррелирующее с  $J^*(5p^4 6s^2 P_{3/2}) + J(5p^5 ^2 P_{3/2})$ , исследовано методом тройного оптич. резонанса. Получены спектры возбуждения флуоресценции. На основании подгоночных расчетов определена потенц. кривая состояния  $J_2(1u)$ . В. С. Иванов

ср. 1986, 18, № 6



1985

92

8 Б1151. Высоковозбужденное отталкивательное состояние  $J_2$  исследованное методом тройного оптического резонанса. A highly excited repulsive state of  $J_2$  studied by an optical triple resonance. Kasatani K., Ito J., Kawasaki M., Sato H. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 1—2, 113—117 (англ.)

Методом тройного оптич. резонанса исследовано отталкивательное состояние  $1_u$  молекулы  $J_2$ , коррелирующее с парой атомов  $J^*(5p^4 6s, ^2P_{3/2}) + J(5p^5, ^2P_{3/2})$ . Возбуждение осуществлялось тремя перестраиваемыми импульсными лазерами на красителях с общей накачкой ( $N_2$ -лазер) по схеме  $1_u \leftarrow EO_g^+ \leftarrow B^3\Pi(O_u^+) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ . Регистрировалась атомная флуоресценция йода (переход  $5p^4 6s, ^2P_{3/2} \rightarrow 5p^5, ^2P_{1/2}$ , 206,23 нм). Построение потенциальной кривой состояния  $1_u$  производили путем моделирования наблюдаемого эксперим. спектра, исходя из РКТ потенциальной кривой

спектр,  
потенц. крив.

X. 1986, 19, № 8

состояния  $E O_g^+$ . Для функции  $V(R) = A/R^n + D$ , использованной при описании потенциальной кривой приведены значения параметров  $n$  и  $A$  и обл. межъядерных расстояний в зависимости от номера колебат. уровня  $V_E$  ( $V = 15-19$ ). Использование Пт вида  $V(R) = A \exp(BR) + D$  не улучшает результатов моделирования.

В. М. Ковба

72

1985

' 104: 42156b A highly excited repulsive state of molecular iodine studied by an optical triple resonance. Kasatani, Kazuo; Ito, Junichi; Kawasaki, Masahiro; Sato, Hiroyasu (Fac. Eng., Mie Univ., Tsu, Japan 514). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 122(1-2), 113-17 (Eng). One of the repulsive  $1_u$  states of  $I_2$  which correlate with  $I^*(5p^4 6s \ ^2P_{3/2}) + I(5p^5 \ ^2P_{3/2})$  was investigated by optical triple resonance through the  $B^3\Pi_{30u}^+$  and  $E \ 0_g^+$  states. The potential curve was detd. by a simulation of the excitation spectrum of the I at. line.

номери-

ф-ии

воф. составл.

с. А. 1986, 104, № 6

$I_2$

(Om. 21507)

1985

102: 157234b Coupling of the green (506-nm) and ultraviolet (342-nm) emission bands of molecular iodine. Killeen, K. P.; Eden, J. G. (Univ. Illinois, Urbana, IL 61801 USA). *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* 1985, 2(3), 430-2 (Eng). Collisional coupling between the electronic excited states of  $I_2$  that are responsible for the green and UV ( $D' \rightarrow A'$ ) bands of the mol. (centered at 506 and 342 nm, resp.) was studied in electron-beam-pumped mixts. of Ar and HI. The dependence of the temporal decay of the green and UV fluorescence waveforms on the buffer-gas pressure demonstrates that the 2 bands do not originate from a common upper state. The interdependence of the 2 bands, however, is clear from the disappearance of gain at 506 nm, when an optical cavity having a high Q at 342 nm is installed around the excited medium ( $I_{\text{uy}} \sim 30 \text{ MW cm}^{-2}$ ). Also, the peak intensity of the UV band is suppressed by more than 40% when a green dye-laser pulse ( $\lambda = 503 \text{ nm}$ ,  $I \geq 5 \text{ MW cm}^{-2}$ ) is directed along the axis of the active medium.

M. Creekmp

C.A. 1985, 102, N 18.

32

OM 22930

1985

6 Б1214. Спектр трехфотонного поглощения молекулы йода. The three-photon absorption spectrum of the iodine molecule. King G. W., McLean T. D. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 121, № 1—2, 57—60 (англ.)

С высоким разрешением измерен спектр лазерного трехфотонного поглощения  $J_2$ . Молекулы  $J_2$  возбуждались в результате поглощения либо трех одинаковых, либо различных фотонов. Соотв. для возбуждения использовали один или два перестраиваемых лазера на красителях. Конечным верхним электронным состоянием переходов является состояние  $F'(O_u^+)$ . Приведены значения  $T_v$ , ( $Y=0$ ).  $B_v$  для уровней  $V'=0-4$  полученные из различных спектров. Значения молек. постоянных  $^{127}J_2$  в состоянии  $F'(O_u^+)$  следующие:  $T_e = 51706,3$ ,  $\omega_e = 130,5$ ,  $\omega_e x_e = 0,375$ ,  $B_e = 2,1991 \cdot 10^{-2}$ ,  $\alpha_e = 8,42 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ .

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1986, 19, № 6.

92

(Om. 22930)

1985

103: 223594t The three-photon absorption spectrum of the iodine molecule. King, G. W.; McLean, T. D. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 121(1-2), 57-60 (Eng). The 3-photon absorption spectrum of I<sub>2</sub> was recorded at 16,400-18,300 cm<sup>-1</sup> under high resolu., using both a single tunable dye laser (3P1C) and independently tunable pump and probe lasers (3P2C). Rotational anal. of the 3P2C spectrum confirmed the presence of the F(0<sub>u</sub><sup>+</sup>) state and gave improved spectroscopic consts. A sep. set of vibrational levels at 51,500-54,700 cm<sup>-1</sup>, with a spacing of 78 cm<sup>-1</sup>, was also identified.

(F'(0<sub>u</sub><sup>+</sup>), u.n.)

C.A. 1985, 103, N26

1985

J<sub>2</sub>

Kryachko Eugene S.

u.n.

Chem. Phys. Lett.,  
1985, 116, NS, 411-414.

(civ. Zn H; III)

$J_2$

1985

3 Б1141. Естественная преддиссоциация иода в состоянии В. Колебательные уровни  $v=17, 18, 19$  и  $20$ . Iodine B state natural predissociation. Vibrational levels  $v=17, 18, 19$  and  $20$ . Martinez E., Martinez M. T. «17 th Eur. Congr. Mol. Spectrosc., Madrid, 8—13 Sept., 1985: EUCMOS XVII. Abstr.», S. 1., s. a., P—40 (англ.)

При различных давл. измерены излучат. времена жизни ( $\tau$ ) след. отдельных колебательно-вращат. уровней ( $v', I'$ ) состояния  $B^3\Pi(O_n^+)$  молекулы  $J_2$ :  $v'=17, I=22-90$ ;  $v'=18, I=70-90$ ;  $v'=19, I'=48-77$ ;  $v'=20, I=38-72$ . Спектры возбуждались перестраиваемым (566,7—571,3 нм) импульсным узкополосным ( $0,15 \text{ см}^{-1}$ ) лазером на красителе. Определены  $\tau_0$  (в отсутствие столкновений) и сечения столкновений. Полученные данные по  $\tau_0$  обсуждены с учетом гироскопич. и происходящей с переносом заряда преддиссоциации возбужденных молекул. В. М. Ковба

М.П., пред-  
диссоц.

Х. 1986, 19, N 3



У<sub>2</sub>

(Dm. 24321)

[1985]

Morinaga A.,

сверхтонк.  
структура,  
постоян.  
сверхтонк.  
расщепл.

Bulletin of NRLM, 1985,  
34, N 3, 128-29.

9  
2

1985

9 Б1173. Возбуждение методом двойного оптического резонанса состояния  $O^+(^3P_0)$   $J_2$  вплоть до  $53\,800\text{ см}^{-1}$ . OODR excitation of the  $O_g^+(^3P_0)$  state of  $J_2$  up to  $53\,800\text{ см}^{-1}$ . Perrot J. P., Bouvier A. J., Bouvier A., Femelat B., Chevaleyre J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 114, № 1, 60—69 (англ.)

Методом двойного оптич. резонанса исследовано нонпарное состояние  $O_g^+$  молекулы  $^{127}J_2$ , коррелирующее с  $J^+(^3P_0) + J^-(^1S)$ , до энергий  $53\,800\text{ см}^{-1}$ . Накачка уровней промежуток. состояния  $BO_u^+$  ( $v=43, J=12, 16; v=14, J=9, 16, 80$ ) осуществлялась  $Ar^+$  лазером ( $514,5\text{ нм}$ ), переходы  $BO_u^+ \rightarrow O_g^+$  ( $v=44-75$ ) возбуждали излучением перестраиваемого кольцевого лазера на красителе с удвоением частоты ( $290-300\text{ нм}$ ). Рассчитаны значения  $E, R_{\text{млп}}, R_{\text{макс}}$  потенциальной кривой РКР  $J_2(O_g^+, v=0-75, \text{интервал } \Delta v=5)$ , значения факторов Франка—Кондона для переходов  $O_g^+(^3P_0) (v=66-75) \leftarrow BO_u^+ (v=43, J=12)$ . В спектрах возбуждения наблюдались также высоколежащие колебат. уровни состояния  $O_g^+(^3P_2)$ .

В. М. Ковба

М.П.

X. 1986, 19, № 9

Y  
2

1985

103: 223414] OODR excitation of the  $0_g^+(^3P_0)$  state of iodine up to 53,800  $\text{cm}^{-1}$ . Perrot, J. P.; Bouvier, A. J.; Bouvier, A.; Femclat, B.; Chevalerey, J. (Lab. Spectrometrie Ion. Mol., Univ. Lyon, 69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 114(1), 60-9 (Eng). Using the optical-ODR (OODR) technique, the  $0_g^+(^3P_0)$  ion-pair state of  $^{127}\text{I}_2$  was explored up to 53,800  $\text{cm}^{-1}$ . The 2nd excitation step was carried out with tunable UV laser radiation at 2900-3000 Å. A mol. const. set valid up to  $v = 75$  was derived. A highly vibrationally excited  $0_g^+(^3P_2)$  state was obsd.

(u.n.  $0_g^+/^3P_0$ )  
 $0_g^+(^3P_2)$ )

C.A. 1985, 103, N26

y  
2

[Om. 23250]

1985

Seal B.K., Bandyopad-  
hyay B., et al.,

Ac;

y. Indian Chem. Soc.,  
1985, 62, N 7, 504-506.

2

1985

23 Б1214. Потенциалы слабосвязанных состояний  $J_2$ , полученные из анализа диффузных спектров и данных по преддиссоциации. Potentials for weakly bound states in  $J_2$  from diffuse spectra and predissociation data. Tellinghuisen J. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 9, 4012—4016 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

С целью уточнения потенциальных кривых ( $U$ ) молекулы  $J_2$  в слабосвязанных состояниях  $a(1g^3\Pi)$  и  $^1\Pi_u$  проанализированы имеющиеся эксперим. данные по преддиссоциации, спектрам поглощения и испускания. Для состояния  $^1\Pi_u$  предложен Пт след. аналитич. вида:  $U = G[F \times (U_- - U_+) + U_+]$ , где  $U_- = 8,61 \cdot 10^7 / R^{9,5}$ ,  $U_+ = 180$ ,  $[1 - \exp(-1,43(R - 4,2))]^2 - 180$ ,  $F = [1 + e^{16(R - 3,32)}]^{-1}$ ,  $G = 1 - 0,09 \exp[-40(R - 3,34)^2]$  (значения  $V$  и др. параметров в  $\text{см}^{-1}$  или  $\text{\AA}$ ,  $R = 2,9 - 3,83 \text{ \AA}$ ). Для состояния  $a$  предложен Пт вида:  $U = 0,5(U_- + U_+ - [(U_+ - U_-)^2 + 140^2]^{1/2})$ , где  $U_- = 3,455 \cdot 10^8 / R^{10} - 131$ ,  $U_+ = 4,212 \cdot 10^9 / R^{12} - 487,5$  ( $R = 2,9 - 3,83 \text{ \AA}$ ). Рассмотрены

(м.п.)

X. 1986, 19, № 23

7 известных (из 10 возможных) электронных состояний  $J_2$ , коррелирующих с парой атомов йода в основном состоянии  $^2P_{3/2}$ . Из них три, потенциальные кривые которых пересекают при малых  $R$  потенциальную кривую состояния  $B_3\Pi(O_u^+)$ , играют существенную роль в процессах тушения  $J_2(B)$  при столкновениях и рекомбинации атомов йода.

В. М. Ковба

1985

92

103: 13672r Potentials for weakly bound states in molecular iodine from diffuse spectra and predissociation data. Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(9), 4012-16 (Eng). Potential curves are derived for the  $2431\ ^1I_u$  and  $2341\ a(1g\ ^3I)$  states of  $I_2$  by using existing data from several sources. Compared with previous ests., the new potentials are valid over a wider range of internuclear distance, spanning the shallow bound wells at large  $R$  ( $>4\text{\AA}$ ) and the repulsive regions where they cross the well-known  $B(O_u + ^3I)$  state at small  $R$  ( $<3.3\text{\AA}$ ). Seven of the 10 Hund's case (c) mol. states which correlate with ground-state I atoms are now known exptl., including 3 which cross the  $B$  state. The role of these states in the collisional quenching of  $B$  and in the geminate recombination of I atoms is considered.

domerel. p-ur  
 beryalg.  
 COCMOER.

C. A. 1985, 103, N. 2

92

[OM. 21274]

1985

Trautwein A. X.,  
Lauer S., et al.

геометрия,  
символьные  
компоненты,  
расчет.

Theor. Chim. Acta,  
1985, 67, №3, 175-185.



2  
2

OM. 21060

1985

9 Д77. Серийное описание большого набора спектроскопических данных вблизи границы диссоциации: система полос  $B(^3\Pi_{ou}^+) \leftarrow X(^1\Sigma_g^+)$  молекулы  $I_2$ . Near-dissociation expansion representation of ~~large~~ spectroscopic data sets. The  $B(^3\Pi_{ou}^+) \leftarrow X(^1\Sigma_g^+)$  system of  $I_2$ . W. Tromp John, Le Roy Robert J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 109, № 2, 352—367 (англ.)

Проведен теоретич. анализ колебательно-вращательной структуры системы полос электронного перехода  $B(^3\Pi_{ou}^+) \leftarrow X(^1\Sigma_g^+)$  молекулы йода. Анализ проведен с использованием выражения вращательной энергии в виде ряда по степеням  $J(J+1)$ , в котором зависимость параметров от колебательного квантового числа вычисляется с помощью ф-ции потенц. энергии  $V(r) = D - C_n/r^n$ , справедливой вблизи границы диссоциации. Модель с 33 параметрами удовлетворительно описывает положения 14712 линий 149 колебательных полос системы  $B \leftarrow X$  йода, измеренных на фурье-спектрометре (Gerstenkotn S., Luc P. «Laser Chem.», 1983, 1, 83) (линии этой системы используются для калибровки спектрометров).

М. Р. Алиев

спектр, М. П.

Ф. 1985, 18, N 9.

$J_2$

От. 21060

1985

17 Б1147. Представление разложения вблизи диссоциационного предела больших наборов спектроскопических данных. Система  $B^3\Pi_{0u^+} - X^1\Sigma_g^+ J_2$ . Near-dissociation expansion representation of large spectroscopic data sets: the  $B(^3\Pi_{0u^+}) - X(^1\Sigma_g^+)$  system of  $J_2$ . Tromp J. W., Le Roy R. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 109, № 2, 352—367 (англ.)

Продолжение работ одного из авторов (R. J. Le Roy, 1970—1980 гг.), связанных с более компактным представлением и анализом больших наборов эксперим. данных по электронно-колебательно-вращат. переходам в двухатомных молекулах вблизи диссоциационного пре-

М. П.

Х. 1985, 19, N 17.

дела. Вместо традиционных выражений для уровней энергии  $E(v, J) = \sum_{m=0}^m K_m(v) [I(I+1)]^m$ ,  $K_m(v) = \sum_{l=0} Y_{lm}(v+1/2)^l$  предлагается использовать более простые аналитич. выражения  $K_0 \sim (v) = D - X_0(n) (V_D - v)^{2n/(n-2)}$ , для  $m \geq 1$   $K_m \sim (v) = X_m(n) (v_D - v)^{[2n/(n-2) - 2m]}$ , полученные в предположении, что при больших межъядерных расстояниях определяющая даль-нодействующая часть  $\Pi_t$  имеет в пределе вид  $v(r) \simeq D - C_n/R^n$  ( $D$  — энергия диссоциации,  $v_D$  — эффектив-ное колебат. число, соотв. диссоционному пределу,  $X_m(n) = \bar{X}_m(n)/[\mu^n (C_n)^2]^{1/n-2}$ , где  $\bar{X}_m(n)$  — известные численные константы,  $\mu$  — приведенная масса). Преиму-щества метода продемонстрированы на примере перехо-да  $B^3\Pi_{ou}^+ - X^1\Sigma_g^+ J_2$  (около 15 тыс. линий).

В. М. Ковба

I<sub>2</sub>

Om. 21060

1985

/ 102: 102742k Near-dissociation expansion representation of large spectroscopic data sets: the  $B(^3\Pi_{ou+}) \leftarrow X(^1\Sigma_g^+)$  system of molecular iodine. Tromp, John W.; Le Roy, Robert J. (Guelph-Waterloo Cent. Grad. Work Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 109(2), 352-67 (Eng). The utility of near-dissocn. expansion functions for efficiently representing large spectroscopic data sets is demonstrated by an application to 14,712 lines of the visible B-X absorption spectrum of I<sub>2</sub>. In addn. to providing a more compact representation of the input data than is obtainable using traditional methods, this approach has a unique ability to provide reliable predictions for vibrational levels lying above the highest one obsd. Considerations governing choice of the no. of parameters to include in an expansion and of the no. of significant digits to quote for each of the resulting parameters are critically discussed.

$B^3\Pi_{ou+} \leftarrow X^1\Sigma$

C.A. 1985, 102, N12

22

(Om. 22519)

1985

7 Б1187. Обратная спектральная задача дискретного РКР в газовой фазе:  $^3\Pi_{0u}^+$  терм молекулы  $J_2$ . Уманский И. М., Бахрах В. Л., Ветчинкин С. И. «Оптика и спектроскопия», 1985, 59, № 3, 537—539

Показано, что квазиклассич. теория решает обратную задачу спектров РКР. По данным РКР восстановлен терм молекулы  $J_2$ .

Резюме

спектр

Х. 1986, 19, N 7.

I<sub>2</sub>

Om 22519

1985

103: 202970x Inverse spectral problem of discrete resonance Raman scattering in gas phase:  $^3\Pi_{ou}^+$  term of iodine molecule. Umanskii, I. M.; Bakhrakh, V. L.; Vetchinkin, S. I. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1985, 59(3), 537-9 (Russ). The inverse resonance Raman scattering spectral problem was solved with quasiclassical theory. With the data terms were established for the I<sub>2</sub> mol.

( $^3\Pi_{ou}^+$ )

C.A. 1985, 103, 124

1985

2 Б1247 Деп. Резонансный спектр комбинационного рассеяния паров йода и брома. Вертакова Л. В., Сержантов В. Г., Суркин Р. И. Саратов. политехн. ин-т. Саратов, 1985. 5 с. Библиогр. 2 назв. (Деп. в ВИНТИ 04.10.85, № 7074—В)

Получены спектры резонансного КР (РКР) паров йода и брома. Возбуждение Аг-лазером на  $\lambda = 488$  нм и  $\lambda = 514,5$  нм. В спектрах получены основные частоты и последовательности обертонов, интерпретируемые как непрерывные РКР для паров йода при возбуждении на  $\lambda = 488$  нм и дискретное РКР для паров йода и брома при возбуждении на  $\lambda = 514,5$  нм. Определены частоты и интенсивности более 15 обертонов для каждого вещества. Автореферат

спектр

Х. 1986, 19, № 2  $\text{Br}_2$

$\gamma_2$

Om. 22538

1985

Whitten W.B., Ramsey J.M.

check

Appl. Spectrosc., 1985,  
39, N 4, 582-586.



2  
2

[Om. 25677]

1986

Ashmore I. f., Tellinghui-  
sen I.,

м.п. в  
основн.  
составе.

I. Mol. Spectrosc., 1986,  
119, N1, 68-82.

(см. Cl<sub>2</sub>; III)

1986

J<sub>2</sub>

Ashmore J. Gail,  
Tellinghuisen Joel.

cr. n.

J. Mol. Spectrosc., 1986,

119, N1, 68-82.

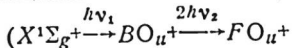
(cer. Cl<sub>2</sub>; III)

3  
2

1986

6 Б1245. Состояние  $F0_u^+$  двухатомного йода. Эффекты конфигурационного взаимодействия. The  $F0_u^+$  state of diatomic iodine: effects of configuration interaction Ной А. Р., Гранд Ж. С. Д. «Chem. Phys.», 1986, 109, № 1, 109—115 (англ.)

Методом лазерной спектроскопии трехфотонного поглощения



М.П.

исследовано ионно-парное состояние  $F0_u^+(v=0-220)$  молекулы  $J_2$ . Для возбуждения использовались два импульсных узкополосных перестраиваемых лазера на красителях с общей накачкой от XeCl-лазера. Регистрировались ионы, получающиеся в результате поглощения молекулами  $J_2(F0_u^+)$  4-го фотона  $(1+2+1)$  и перехода молекул в несвязанное состояние, вероятно, симметрии  $0_g^+$ . Наблюдались также переходы в др.

X. 1987, 19, № 6

близлежащие ионно-парные состояния  $D0_u^+$ ,  $F'0_u^+$ .  
 Приведены 2 набора молек. постоянных (в  $\text{см}^{-1}$ ) со-  
 стояния  $F0_u^+$ : для уровней  $v_F=1-9$  —  $T_e=47217,44$ ,  
 $\omega_e=96,08$ ,  $\omega_e x_e=0,412$ ,  $B_e=0,02071$ ,  $\alpha_e=5,0 \cdot 10^{-5}$ ,  
 $R_e=3,58$  А; для  $v_F=n+46$  ( $n=0-176$ ) положение тер-  
 мов описывается полиномом  $T_0=50978,65+78,944 (n+1/2) - 0,08216 (n+1/2)^2 - 3,886 \cdot 10^{-4} (n+1/2)^3 + 1,964 \cdot 10^{-6} (n+1/2)^4 - 3,0 \cdot 10^{-9} (n+1/2)^5 + 0,019693 \cdot J(J+1) - 5,88 \cdot 10^{-5} (n+1/2)J(J+1) + 6,23 \cdot 10^{-8} (n+1/2)^2 J(J+1) - 2,7 \cdot 10^{-9} J^2(J+1)^2 - 3 \cdot 10^{-11} (n+1/2)J^2(J+1)^2$ . Для  
 обеих областей  $v_F$  рассчитаны потенциальные кривые  
 РКР. Оценена  $D_e=31450 \text{ см}^{-1}$ , продукты диссоциа-  
 ции —  $J^+(^3P_0) + J^-(^1S)$ . Область  $v_F=9-45$  характе-  
 ризуется неразрешенной вращат. структурой соотв. по-  
 лос в спектрах и аномальным ходом изменения  
 $\Delta G_{vF+1/2}$ , что объясняется configuraц. взаимодейст-  
 вием состояний  $F$  и  $F'$ .

В. М. Ковба

92

1986

( $XO_g^+$ , u.n.)

105: 69439d Laser-induced-fluorescence Fourier transform spectrometry of the  $XO_g^+$  state of iodine: tests of the long-range behavior for three isotopes of iodine. Bacis, R.; Cerny, D.; Martin, F. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Claude Bernard, Lyon I, F-69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 118(2), 434-47 (Eng). Data from  $^{127}I_2$ ,  $^{127}I^{129}I$ , and  $^{129}I_2$  were used to examine the long-range behavior of the  $XO_g^+$  state of iodine. A direct application of R. J. Le Roy (1980) theory gives a satisfactory value of  $D_e$ , but the parameter  $C_6$  differs from that obtained from the potential curve, while an iterative procedure using the extended near-dissocn. theory of Le Roy enables consistent results to be found. The long-range parameters obtained are  $D_e = 12,547.355$  (128)  $cm^{-1}$ ,  $C_6 = 1.48(12) \times 10^6$   $cm^{-1}-\text{\AA}^6$ ,  $C_8 = 3.86(1.20) \times 10^7$   $cm^{-1}-\text{\AA}^8$ ,  $C_{10} = 1.0(0.5) \times 10^8$   $cm^{-1}-\text{\AA}^{10}$ .

C.A. 1986, 105, N8

$\gamma_2$

[Om. 25744]

1986

Bacis R., Cerny D.,  
Martin F.,

( $XO_9^+$ )

$\gamma$ . Mol. Spectrosc.,  
1986, 118, N2, 434 -

447

1986

92

4. 3 Б1208. Изучение состояния  $XO_g^+ J_2$  методом Фурье-спектрометрии индуцированной лазером флуоресценции. Проверка поведения трех изотопов иода в дальнедействующей области потенциала. Laser-induced-fluorescence fourier transform spectrometry of the  $XO_g^+$  state of  $J_2$ . Tests of the long-range behavior for three isotopes of iodine. Bacis R., Cerny D., Martin F. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 2, 434—447 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР.

М.П.

В рамках теории Ле Роя («J. Chem., Phys.», 1980, 73, 6003), используя описанную в работе итерационную процедуру, проведен совместный самосогласованный анализ результатов, выполненных авторами ранее прецизионных исследований спектров лазерной флуоресценции изотопов молекул  $J_2(^{127,129}J)$  с участием высоколежащих колебат. уровней ( $v \leq 110$ ) основного электронного состояния  $XO_g^+$ . Для дальнедействующей части потенциала  $V(R) = D_e - \sum C_n/R^n$  получены след. значения параметров:  $D_e = 12547,335 \text{ см}^{-1}$ ,  $C_6 = 1,48 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1} \text{Å}^6$ ,  $C_8 = 3,86 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1} \text{Å}^8$ ,  $C_{10} = 1,0 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1} \text{Å}^{10}$ . В. М. Ковба

N. 1987, 19, N3

22

1986

3 Л164. Фурье-спектрометрия лазерно-индуцированной флуоресценции из состояния  $XO_g^+$  молекулы  $I_2$ : исследование поведения при больших межатомных расстояниях для трех изотопов йода. Laser-induced-fluorescence Fourier transform spectrometry of the  $XO_g^+$  state of  $I_2$ : tests of the long-range behavior for three isotopes of iodine. Bacis R., Cerny D., Martin F. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 2, 434—447 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Экспериментальные результаты для изотопов  $^{127}J_2$ ,  $^{127}J^{129}J$ ,  $^{129}J_2$  использованы для проверки расчетов поведения потенц. кривой состояния  $XO_g^+$  при больших межъядерных расстояниях. Хорошее согласие с экспериментом дает применение при расчетах расширенной «околодиссоционной» теории Лероу. Отмечается, что применение традиционной теории Лероу дает удовлетворительное значение  $D_e$  и неудовлетворительные значения параметров, определяющих поведение потенц. кривой при больших межатомных расстояниях. М. А.

(м.п.)

ф. 1987, 18, № 3



22

1986

№10 Д112. Расчет молекул  $J_2$  и  $HJ$  расширенным методом модельного потенциала. Extended model potential calculations on  $J_2$  and  $HJ$  molecules. Barandian Zola, Seijo Luis. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 3, 1941—1942 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Электронное строение молекул  $HJ$  и  $J_2$  в основных электронных состояниях рассчитано при помощи расширенной версии метода модельного потенциала. Особенность этой версии заключается во введении нелокальных членов в операторы, моделирующие обменные взаимодействия валентных электронов с основными. Кулоновская корреляция электронов игнорировалась. Валентная оболочка включала  $5s5p$  либо  $5s5p4d$  — электроны иода; показано, что в обоих вариантах достигается приблизительно одинаковая точность результатов. Расхождение с данными неэмпирич. расчетов составляет  $0,04 \div 0,02 \text{ \AA}$  для длин связей,  $\sim 0,4 \text{ эВ}$  для энергий диссоциации и  $2\text{—}3\%$  для колебательных постоянных. Отмечены преимущества использованного подхода по сравнению с традиционным методом модельного потенциала Бонифачича—Хузинаги. А. В. Зайцевский

(и.п.)

⊗ (11)

ср. 1986, 18, №10

9  
2

1986

3 7 Л141. Относительные интенсивности линий вращательной структуры полос 43—1, 43—9 и 43—18 электронного перехода  $B \rightarrow X$  молекулы  $J_2$ . Relative rotational-line intensities of the 43—1, 43—9 and 43—18 transfer bands of  $I_2$ . Bertuccelli Daniela, Suárez Carlos B. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1986, 36, № 5, 453—457 (англ.)

С использованием спектрографа высокого разрешения и фотографич. регистрации излучения измерены относит. интенсивности линий вращательной структуры колебательных полос 43—1, 43—9 и 43—18 спектра излучения молекул  $J_2$ , возбуждаемого многомодовым Аг-лазером. Полученное распределение интенсивности линий согласуется с вычисленным в приближении Франка—Кондона.

М. Р. Алиев

М.П.

ср. 1987, 18, № 7

9  
2

1986

105: 123430j Relative intensity of the collision-induced rotational transfer 43-0 band of iodine, B-X system. Bertuccielli, D.; Suarez, C. B. (Cent. Provincia Buenos Aires, Univ. Nac., Buenos Aires, Argent.). *Spectrosc. Lett.* 1986, 19(7), 699-703 (Engl.). The intensity of the rotational lines of the 43-0 band of the B-X system of I was measured by using a high resolu. spectrograph. The band was excited by a multimode Ar-ion laser at 5145 Å and the fluorescence spectrum shows fully developed rotational lines produced by collisions.

(B-X)

C.A. 1986, 105, N 14

I<sub>2</sub>

1986

Buck U., Kesper J.,  
et al.

нрeгyecoы.  
чекmp. Chem. Phys. Lett.,  
1986, 125, N3, 257-  
- 262.

●  
(сuo. ICl; III)

22

1986

24 Б1230. Индуцированная лазером флуоресценция иода в состоянии  $B^3\Pi(0_u^+)$ , измеренная с временным разрешением. Изучение второго преддиссоционного максимума. Time-resolved laser-induced fluorescence of the iodine  $B^3\Pi(0_u^+)$  state. Study of the second maximum of predissociation. Castaño F., Martínez E., Martínez M. T. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 128, № 2, 137—140 (англ.)

(м.п.)

Измерены времена жизни флуоресцентного распада отдельных колебательно-вращат. уровней состояния  $B^3\Pi(0_u^+)$  молекулы  $I_2$ . Возбуждение молекул осуществлялось излучением узкополосного ( $0,15 \text{ см}^{-1}$ ) перестраиваемого ( $548,6—552,5 \text{ нм}$ ) импульсного лазера на красителе (обл. полос  $24—0$ ,  $25—0$ ,  $26—0$ ,  $26—1$  и  $27—1$  системы  $B—X$ ). Учитывая, что скорости распада СТ подуровней состояния  $B$  могут быть представлены в виде  $\Gamma = \Gamma_{\text{излуч}} + \Gamma_{\text{столкн}} + \Gamma_{IF}$ , где  $\Gamma_{\text{излуч}}$  и  $\Gamma_{\text{столкн}}$  — соотв. излучат. и столкновит. скорости распада, а  $\Gamma_{IF} = C_{v,J^2} J(J+1) + a_{v,J^2} f(I \cdot J) - a_{v,J} C_{v,J} G(I \cdot J)$ , определены значения параметров  $C_{v,J^2}$  и  $a_{v,J^2}$  для уровней  $v' = 24$  и  $v'' = 25$ , в обл. 2-го преддиссоц. максимума. Приведены значения времен жизни ряда уровней  $v' =$

х. 1986, 19, N 24

$=24$ ,  $J'=38-102$  и  $v'=25$ ,  $J'=0-106$  в отсутствие  
столкновений. В. М. Ковба



92

(Om. 24456)

1986

105: 105045h Time-resolved laser-induced fluorescence of the iodine  $B^3\Pi(0_u^+)$  state. Study of the second maximum of predissociation. Castano, F.; Martinez, E.; Martinez, M. T. (Fac. Cienc. Univ. Pais Vasco, Bilbao, Spain). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 128(2), 137-40 (Eng). Fluorescence decay lifetimes for specific rovibrational levels of the  $I_2 B^3\Pi(0_u^+)$  state, were obtained by time-resolved laser-induced fluorescence. Gyroscopic and hyperfine predissocn. parameters  $C_v^2$  and  $a_v^2$ , for vibrational levels of the  $B^3\Pi(0_u^+)$  state around the 2nd max. of predissocn.,  $v' = 24, 25$ , were detd. Results are discussed in terms of the dependence of the predissocn. parameters on the Franck-Condon densities and the corresponding electronic matrix elements.

лазер-всп.  
флуор.

C.A. 1986, 105, N 12

22

LM-25714 1986

3 Л393. Спектроскопия возбуждаемой лазером флуоресценции с преобразованием Фурье состояния  $XO_g^+$  молекулы  $J_2$ : расширенный анализ спектра флуоресценции перехода  $BO_u^+ \rightarrow XO_g^+$  молекул  $^{127}J^{129}J$  и  $^{129}J_2$ . Laser-induced-fluorescence fourier transform spectrometry of the  $XO_g^+$  state of  $J_2$ : extensive analysis of the  $BO_u^+ \rightarrow XO_g^+$  fluorescence spectrum of  $^{127}J^{129}J$  and  $^{129}J_2$ . Cerny D., Bacis R., Verges J. «J. Mol. Spectros.», 1986, 116, № 2, 458—498 (англ.)

(М.П.)

Методом спектроскопии с преобразованием Фурье получен спектр флуоресценции перехода  $BO_u^+ \rightarrow XO_g^+$  молекул  $^{127}J^{129}J$  и  $^{129}J_2$  при лазерном возбуждении  $\lambda = 520,832$  нм (Кг-лазер) и  $\lambda = 514,532, 501,716$  нм (Ar<sup>+</sup>-лазер). Спектральное разрешение составляет 0,02—0,01 см<sup>-1</sup>. Выполнен детальный вращательный анализ колебательных уровней состояния  $XO_g^+$  ( $v' = 5 \div 110$  (для  $^{127}J^{129}J$ ) и  $v' = 4 \div 108$  (для  $^{129}J_2$ )). Определен потенциал RKR и коэф. Данхема состояния  $XO_g^+$ . Полученные значения коэф. Данхема позволяют рассчитывать положение линий в спектре с точностью не хуже 0,01 см<sup>-1</sup>. Библ. 50.

В. А. Е.

ор. 1987, 18, №3



22

(Om. 25714)

1986

104: 158629n Laser-induced-fluorescence Fourier transform spectrometry of the  $X0_g^+$  state of diatomic iodine: extensive analysis of the  $B0_u^+ \rightarrow X0_g^+$  fluorescence spectrum of diatomic iodine ( $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$  and  $^{129}\text{I}_2$ ). Černý, D.; Bacis, R.; Verges, J. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Claude Bernard, 69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116(2), 458-98 (Eng). An extensive rotational anal. of the vibrational levels of the  $X0_g^+$  state of  $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$  ( $5 \leq v'' \leq 110$ ) and  $^{129}\text{I}_2$  ( $4 \leq v'' \leq 108$ ) was done from laser-induced-fluorescence analyzed with a Fourier transform spectrometer. The usual Dunham relationships were checked. For the range explored the lines can be recalcd. with an accuracy better than  $0.010 \text{ cm}^{-1}$  and even  $0.005 \text{ cm}^{-1}$  for low  $J$  values. Checks are done from abs. hyperfine measurements.

( $B0_u^+ - X0_g^+$ )  
laserless  
pnyop.

C. A. 1986, 104, N 18.

22

OM. 25714

1986

§ 3 Б1209. Изучение состояния  $XO^+_g$   $J_2$  методом фурье-спектрометрии лазерной флуоресценции. Расширенный анализ спектра флуоресценции  $BO^+_u \rightarrow XO^+_g$   $^{127}J$   $^{129}J$  и  $^{129}J_2$ . Laser-induced-fluorescence fourier transform spectrometry of the  $XO^+_g$  state of  $J_2$ . Extensive analysis of the  $BO^+_u \rightarrow XO^+_g$  fluorescence spectrum of  $^{127}J$   $^{129}J$  and  $^{129}J_2$ . Cerny D., Bacis R., Verges J. «J. Mol. Spectros.», 1986, 116, № 2, 458—498 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР.

М.П.

Проведено детальное исследование спектров лазерной флуоресценции (Фл) молекул  $^{127}J$   $^{129}J$  и  $^{129}J_2$  возбуждаемых многомодовыми  $Kr^+$  (520,832 нм) и  $Ag^+$  (514,532 и 501,716 нм) лазерами. Спектры Фл регистрировались в обл. 0,5—1,35 мкм на фурье-спектрометре с разрешением 0,01—0,04  $cm^{-1}$ . Дан перечень возбуждаемых переходов ( $V', J' \rightarrow V'', J''$ ) в системе  $BO^+_u \leftarrow XO^+_g$  и переходов ( $V' \rightarrow V''$ ) в спектре Фл вплоть до диссоционного предела состояния  $XO^+_g$ . Приведены

X. 1987, 19, N3

значения  $G_v$ ,  $B_v$ ,  $D_v$ ,  $H_v$  ( $^{127}\text{J}^{129}\text{J}-V_x=5-110$ ,  $^{129}\text{J}_2-V_x=4-108$ ) (для высоколежащих колебат. уровней даны также значения  $L_v$  и  $M_v$ ). Рассчитаны потенциальные кривые РКР (приведены уровни колебат. энергии,  $R_{\text{мин}}$ ,  $R_{\text{макс}}$ ). Получены наборы параметров полиномиального разложения для  $G_v$  и  $B_v$  и логарифмич. полиномиального разложения для  $D_v$ ,  $H_v$ ,  $L_v$ ,  $M_v$ . Сопоставлены теорет. и эксперим. изотопич. соотношения для коэф. Данхема. Определены параметры дальнедействующей части потенциала. Рассчитаны положения линий переходов в системе  $\text{BO}^+_u-\text{XO}^+_g$  ( $V_B=0-70$ ).  
В. М. Ковба.



I<sub>2</sub>

[Om. 26710]

1986

Delgado-Barrio B.,  
Cortina A.M., et al.,

мониторинг  
параметров

J. Comput. Chem., 1986,  
7, N2, ● 208-212

92

1986

/101: 174955w Matrix elements for anharmonic potential application to molecular iodine Morse oscillator. Delgado-Barra, G.; Cortina, A. M.; Varade, A.; Mareca, P.; Villarreal, J.; Miret-Artés, S. (Inst. Estruct. Mater., CSIC, Madrid, Spain 28002). *J. Comput. Chem.* 1986, 7(2), 208-12 (Eng). A numerical method is proposed to calc. the anal. matrix elements for Morse oscillator. The results given for the  $I_2$  system by Gallas et al. and the variational method are compared.

НОСМ. АНУАР -  
НОН.

С.А. 1986, 104, N 20.

Л2

1986

3 5 Д61 ДЕП. Вычисление констант двухатомных молекул с модифицированным потенциалом Морзе. Горшенков В. Н.; Горьк. ун-т. Горький, 1986. 10 с. Библиогр. 5 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ. 14.02.86, № 1115-В)

Получены в общем виде выражения для вычисления колебательных и структурных констант двухатомных молекул методом эффективного гармонич. осциллятора, когда межъядерный потенциал аппроксимируется потенциалом Морзе с двумя варьируемыми параметрами. Численные результаты даны для молекулы йода.

Автореферат

М-П.  
ср. 1986, 18, N5

2

6 Л185 К. Атлас спектров поглощения молекулы йода в области  $14\,800\text{--}20\,000\text{ см}^{-1}$ . Идентификация переходов системы (B—X). Atlas du spectre d'absorption de la molécule d'iode.  $14\,800\text{--}20\,000\text{ см}^{-1}$ . Complément: Identification des transitions du système (B—X) assignments of the (B(I<sub>2</sub>)—X) iodine lines. Gerstenkorn S., Luc P. (Paris): CNRS, s. a. Var. pag. (франц., англ.)

(м.п.)

Издание продолжает серию атласов спектра поглощения молекулярного йода. Спектры получены методом фурье-спектроскопии с разрешением  $0,001\text{ см}^{-1}$  в области  $14\,800\text{--}20\,000\text{ см}^{-1}$ . Аппаратура, методика измерений и спектры поглощения приведены в 1-м издании серии (Gerstenkorn S., Luc P., Atlas du spectre d'absorption de la molécule d'iode. Part I—IV, Lab. Aime Cotton, 1978). В настоящем атласе представлены результаты по идентификации линий спектра, отнесенных к переходу (B—X).

М. А.

ф. 1987, 18, 46

92

Om. 24935

1986

( $F0_u^+$  cocrm.)

/ 105: 216093s The  $F0_u^+$  state of diatomic iodine: effects of configuration interaction. Hoy, A. R.; Brand, J. C. D. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *Chem. Phys.* 1986, 109(1), 109-15 (Eng). The  $F0_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g$  transition of  $I_2$  was investigated at  $\nu_F = 0-220$  by 3-photon spectroscopy using multiphoton ionization detection. Massive anomalies obsd. near the base of the potential well describing the  $F$  state were attributed to CI with a higher state of  $0_u^+$  symmetry, possibly the ion-pair state  $F'$  which lies  $\sim 4500$   $\text{cm}^{-1}$  above  $F$ .

C.A. 1986, 105, ~24



92

1986

12 Л233. Анализ состояния ионной пары  $F^1(0_u^+)$  молекулы  $J_2$  методом спектроскопии двойного оптического резонанса. An analysis of the  $F^1(0_u^+)$  ion-pair state of  $J_2$  by optical-optical double resonance. Ishi-wata Takashi, Tokunaga Atsuto, Shinzawa Tsutomu, Tanaka Ikuzo. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 89—101 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом спектроскопии двойного оптич. резонанса исследовано состояние  $F^1(0_u^+)$  молекулы  $J_2$ , которое коррелирует с распадом молекулы на ионную пару  $J^-(^1S) + J^+(^1D)$ . Получен спектр перехода  $F^1 \leftarrow B$  с разрешенной колебательно-вращательной структурой. На основании совместного анализа 1361 перехода ( $v' = 0-38$ ,  $J' = 6-108$ ) определены потенциал RKR и коэф. Данхема состояния  $F^1(0_u^+)$ .  
В. А. Е.

(М.П.)



Ю. 1986, 18, N 12.

$\gamma_2$

[Om. 25851]

1986

Ishiwata T., Kusayanagi T.,  
Hara T., et al.,

( $F(Ou^+)$ )

$\gamma$ -Mol. Spectrosc., 1986,  
119, N2, 337-351.

2  
2

(Om. 25668)

1986

Ishiwata T., Tokunaga A.,  
et al.,

(F' O<sub>u</sub><sup>+</sup>)  
u.n.

J. Mol. Spectrosc.,  
1986, 117, 89-101.

9  
2

1986

$F'(0_u^+)$

104: 176811v An analysis of the  $F'(0_u^+)$  ion-pair state of molecular iodine by optical-optical double resonance. Ishiwa, Takashi; Tokunaga, Atsuto; Shinzawa, Tsutomu; Tanaka, Ryo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(1), 89-101 (Eng). An optical-ODR technique utilizing a stepwise 3-photon transition was applied to study the  $F'(0_u^+)$  ion-pair state of  $I_2$  which correlated with  $I(^1S) + I(^1D)$  at the dissociation limit. Two pulsed tunable dye lasers were used to excite the molecules to appropriate levels of the  $B^3\Pi(0_u^+)$  state, and subsequently into the  $F'(0_u^+)$  state by a simultaneous 2-photon transition. The optical-ODR excitation spectra showed vibrational progressions consisting of O, Q, and S branches in accordance with the selection rule ( $\Delta J = 0, \pm 2$ ) of the  $F'(0_u^+) - B^3\Pi(0_u^+)$  2-photon transition. The absolute vibrational numbering of the  $F'(0_u^+)$  state was established by the direct observation of the  $F'(0_u^+) - X^1\Sigma_g^+$  fluorescence interpreted using the Franck-Condon factor calculations. Dunham parameters of the  $F'(0_u^+)$  state, based on a global least-squares fit analysis of 100 transitions ( $v' = 0-38, J' = 6-108$ ), were determined.

C. A. 1986, 104, N20

7  
2.

1986

( $F(0_u^+)$ )  
many

105: 142352b An analysis of the  $F(0_u^+)$  ion-pair state of iodine by optical-optical double resonance. Ishiwata, Takashi; Kusayanagi, Tatsuo; Hara, Takefumi; Tanaka, Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(2), 337-51 (Eng). An optical-optical double resonance (OODR) technique was used to study the spectroscopic details of the  $F(0_u^+)$  ion-pair state of  $I_2$  which correlates with  $I(^1S) + I(^3P_0)$  at the dissociation limit. In the excitation scheme,  $F(0_u^+) - B^3\Pi(0_u^+) - X^1\Sigma_g^+$ , the OODR excitation spectra show the vibrational progressions consisting of O, O, and S branches in accordance with the selection rule ( $\Delta J = 0, \pm 2$ ) of the  $F(0_u^+) - B^3\Pi(0_u^+)$  2-photon transition. The  $F(0_u^+) - X^1\Sigma_g^+$  fluorescence was resolved to establish the absolute vibrational numbering of the  $F(0_u^+)$  state. Dunham parameters of the  $F(0_u^+)$  state, based on a global least-squares fit analysis of 1184 transitions ( $v' = 0-48, J = 6-107$ ), are reported. The main parameters,  $T_e = 47\,217.350\text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e = 96,313\text{ cm}^{-1}$ , and  $r_e = 3.596\text{ \AA}$ , are consistent with the results derived from the vibrational analyses of the  $F(0_u^+) - X^1\Sigma_g^+$  emission in the discharge. The detailed analysis indicates some evidence that the lower vibrational levels of the  $F(0_u^+)$  state are perturbed by an ion-pair state.

C.A. 1986, 105, N16

Y<sub>2</sub>

1986

Ma Zhongsun, Dai  
Shushan.

л. п.

Хуасюэ тунбао,  
Chemistry, 1986,  
N11, 35-36.

(см. HF; III)

92

1986

7 9 Л449. Фурье-спектроскопия с лазерно-индуцированной флуоресценцией состояния  $XO_g + J_2$ . Подробный анализ спектра флуоресценции  $BO_u + \rightarrow XO_g + {}^{127}J_2$ . Laser-induced-fluorescence Fourier transform spectrometry of the  $XO_g$  state of  $J_2$ : extensive analysis of the  $BO_u + \rightarrow XO_g +$  fluorescence spectrum of  ${}^{127}J_2$ . Martin F., Bacis R., Churassy S., Vergès J. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 71—100 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры возбужденной лазерами на  $Ag^+$  и  $Kr^+$  флуоресценции паров  $J_2$  в области 0,5—1,35 мкм с разрешением 0,007 см<sup>-1</sup>. Измерены частоты линий с точностью 0,002 см<sup>-1</sup>. Выполнено отнесение линий к колебательно-вращательным компонентам электронного перехода  $BO_u + \rightarrow XO_g +$  на колебательные уровни нижнего состояния от  $v'' = 8—108$ . Приведены параметры B, D, H, L и колебательные энергии молекулы  $J_2$  в состоянии X для  $v''$  от 8 до 108. Рассчитана форма потенц. кривой в основном электронном состоянии и франк-кондоновские факторы. Отмечена специфика возмущения состояний при  $v''$  выше 90. Библ. 43.

М. В. Т.

(л.п.)

ср. 1986, 18, № 9

2

1986

(М.П.)

У 17 Б1180. Изучение индуцированной лазером флуоресценции молекулы  $J_2$  в состоянии  $XO_g^+$  методом фурье-спектрометрии. Расширенный анализ перехода  $BO_u^+ \rightarrow XO_g^+$  в спектре флуоресценции  $^{127}J_2$ . Laser-induced fluorescence fourier transform spectrometry of the  $XO_g^+$  state of  $J_2$ : extensive analysis of the  $BO_u^+ \rightarrow XO_g^+$ . Fluorescence spectrum of  $^{127}J_2$ . Martin F., Bacis R., Churassy S., Vergès J. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 71—100 (англ.)

В области 0,5—1,35 мкм с высоким разрешением (фурье-спектрометр) измерены спектры флуоресценции (Фл) молекулы  $^{127}J_2$  возбуждаемые  $Ar^+$  ( $\lambda_{возб} = 514,5$  и 501,5 нм) и  $Kr^+$  (520,8 и 530,8 нм) лазерами. Приведены относит. интенсивности Фл с отдельных колебат. вращат. уровней состояния  $BO_u^+$ . Для невозмущенных уровней  $v_x = 8-108$  (возмущены уровни с  $v'' = 90, 93, 97, 98, 101-103$ ) приведены значения  $G_v, B_v, D_v, H_v, L_v$ .

X. 1986, 19, N 17



Рассчитаны значения  $G(v)R_{\text{мин}}, R_{\text{макс}}$  потенциальной кривой РКР  $J_2(XO_g^+, v=0-108)$ ; факторы Франка—Кондона (ФК) для основных наблюдаемых флуоресцентных серий. Результаты использованы для построения дальнодействующей части потенциала состояния  $XO_g^+$  и оценки путем экстраполяции значений  $G_v, B_v, D_v$  для последних связанных уровней  $v_x=108-113$ .

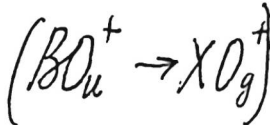
В. М. Ковба

92

(Om 23686)

1986

138647p Laser-induced-fluorescence Fourier transform spectrometry of the  $XO_g^+$  state of molecular iodine: extensive analysis of the  $BO_u^+ \rightarrow XO_g^+$  fluorescence spectrum of molecular iodine ( $^{127}I_2$ ). Martin, F.; Bacis, R.; Churassy, S.; Georges, J. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Claude Bernard Lyon I, 69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116(1), 100 (Eng). A comprehensive description of the  $XO_g^+$  ground state of  $^{127}I_2$  is given. Rotational consts. are detd. for all vibrational levels up to  $v' = 107$  and estd. by extrapolation for the last bound levels ( $v'' = 108-113$ ). Long-range parameters are discussed.



c.A. 1986, 104, N16

2

1986

1 Б4416. Распределения продуктов по состояниям в фотодиссоциации кластеров йода с благородными газами. Product state distributions in the photodissociation of iodine-rare gas clusters. Philippoz J. - M., Monot R., Bergh H. van den. «Helv. phys. acta», 1986, 59, № 6—7, 1089—1092 (англ.)

Изучены спектры Фл  $J_2$  (макс. разрешение 70 мА), возбуждаемые при фотодиссоциации (ФД) в сверхзвуковой газовой струе, истекающей в вакуум, вандерваальсовых комплексов  $J_2M$  (где  $M=He, Ne, Ar, Kr, Xe$ ), в процессе  $J_2M + h\nu \rightarrow J_2(B^3\Pi_{0+u}, v', J') + M + \text{кинетич. энергия}$  (1) под действием света 496,5; 488 и 476,5 нм лазера на ионах  $Ag^+$  мощностью 20 Вт. При ФД  $J_2Xe$  при 488 нм спектр Фл  $J_2$  в области 500—575 нм соответствует переходам с уровней  $v'=20-46$  на уровни  $v''=0-3$ . Колебат. распределения имеют значит. ширину. Их максимум смещается в сторону высоких

спектр

X. 1987, 19, N1.

энергий с ростом энергии возбуждающих фотонов. Энергия, переходящая в кинетич. энергию продуктов в процессе (1), немного возрастает с ростом энергии возбуждения, что расходится с предсказаниями на основе траекторных расчетов. При 476,5 нм кинетич. энергия равна  $2000 \text{ см}^{-1}$  и не зависит от  $M$ , тогда как при 496,5 нм имеется минимум  $\sim 1200 \text{ см}^{-1}$  для  $M=\text{Ag}$ , для  $M=\text{Xe}$  эта величина равна  $1600 \text{ см}^{-1}$ , а для  $M=\text{Ne}$  и  $\text{Ne} \geq 1700 \text{ см}^{-1}$ . При ФД  $\text{J}_2\text{Ag}$  и  $\text{J}_2\text{Xe}$  наблюдали больцмановские распределения низших вращат. состояний для колебат. перехода  $29-0$ , тогда как заселенности высших вращат. состояний завышены по сравнению с больцмановскими, т.е. процесс ФД  $\text{J}_2\text{M}$  сопровождается вращат. возбуждением  $\text{J}_2$ . В. Е. Скурат

2  
2

Im. 25311

1986

106: 10604w Hyperfine interactions in homonuclear diatomic molecules and  $u-g$  perturbations. I. Theory. Pique, J. P.; Hartmann, F.; Churassy, S.; Bacis, R. (Lab. Spectrometr. Phys., Univ. Sci. Technol. Med. Grenoble, 38402 Saint-Martin-d'Heres, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1986, 47(11), 1909-16 (Eng). The hyperfine interactions in heavy homonuclear diat. mols. were studied theor. The general matrix element of the related Hamiltonian was derived in the general case and detailed in the case of an ensemble of electronic states sharing the same dissocn. limit. The predicted hyperfine perturbation effects were illustrated through the example of the  $I_2 B$  state. A mixing of the  $B O_u^+$  state with a  $1_g$  state is expected near the dissocn. limit. As the calcn. methods apply to any non-0 nuclear spin homonuclear diat. mol., similar  $u-g$  symmetry breakings are likely to be met in other mols.

$BO_u^+$  сост.,  
сверхтонк.  
расщеплений  
с  $1_g$  состоян.

с. А. 1987, 106, № 2



92

Om- 25312

1986

106: 10758z Hyperfine interactions in homonuclear diatomic molecules and  $u-g$  perturbations. II. Experiments on Iodine. Pique, J. P.; Hartmann, F.; Churassy, S.; Bacis, R. (Lab. Spectromet. Phys., Univ. Sci. Technol. Lille, France; Martin d'Hères, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1986, 4(11), 1917-20 (Eng). The  $I_2 B O_u^+$  state was studied near its dissocn. limit using sub-Doppler high resolu. techniques. The recording of >10,000 hyperfine lines allowed a systematic anal. of the hyperfine structure. All the obsd. features were accounted for by the calcn. of the interactions of the  $B$  state with the other electronic states sharing the same dissocn. limit. Three different situations were encountered: weak perturbation situations treated in the 2nd-order approxn. of the M. Broyer et al. (1976, 1979, 1981) theory, superhyperfine structures obsd. in several band heads, and strong perturbation cases (vibrational levels  $v' = 76-78$ ). This last situation required the utilization of the full exact interaction matrix of  $B O_u^+$  with a  $1_g$  state, leading to direct evidence of a  $u-g$  symmetry breaking in a homonuclear diat. mol.

$BO_u^+$ , сверх-  
молк. спектр  
мппа



с. А. 1987, 106, N 2

Y  
2

(Om. 27330) 1986

Seal B.K., Banerjee B.,  
et al.,

Ac;

Indian J. Chem.,  
1986, 25A, N10,  
942-943

2

1986

24 Б1263. Двухфотонное последовательное возбуждение молекулярных состояний фотонами с постоянной разностью энергий. Constant-energy-difference sequential two-photon photoexcitation of excited states. Sharma S. D., Ray A. K., Saksena G. D. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 127, № 4, 319—323 (англ.)

Двухфотонное последоват. возбуждение фотонами с постоянной разностью энергий использовано для возбуждения и идентификации колебательно-вращат. уровней молекул. Получены спектры возбуждения  $J_2(B \leftarrow X)$  и спектры двухфотонного возбуждения  $J_2(E^3\text{ПО}_g^+)$ . Возбуждение  $B \leftarrow X$  достигалось перестройкой (545—580 нм) лазера на красителе, накачиваемого Nd-ИАГ-лазером (1064 нм). Одновременно возбуждали  $J_2(E \leftarrow B)$  перестраиваемым УФ-излучением (360—375 нм), к-рое получали смешиванием фотонов ИК- и видимого диапазона. За счет ограничений, накладываемых правилами отбора при двухфотонном поглощении, достигалось значит. упрощение молек. спектра по сравнению со спектром  $J_2(B \leftarrow X)$ . Это позволило идентифицировать отдельные колебательно-вращат. переходы  $J_2(E \leftarrow B \leftarrow X)$ .

Л. Ю. Мельников

спектр.

х. 1986, 19, № 24



Y<sub>2</sub>

1986

Schwerdtfeger P.,  
Szentrály L.V., et al.

J. Chem. Phys., 1986,  
u. n. 84, n3, 1606-1612.

( HBr; III)

22

1986

24 Б1229. Изучение с высоким разрешением перехода  $E(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+)$  (4400—4000 Å)  $J_2$ . High resolution study of the  $E(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+)$  transition (4400—4000 Å) of  $J_2$ . Venkateswarlu P., Pramila T., Venkateswara Rao Y. «Spectrochim. acta.», 1986, A42, № 2—3, 285—298 (англ.)

С высоким разрешением сфотографирован спектр испускания (переход  $E(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+)$ ) молекулы  $J_2$ , возбуждаемый в высоковольтном безэлектродном разряде через пары иода. Выполнен анализ вращат. структуры полос 0—20, 0—19, 0—18, 0—17, 1—24, 1—14; 3—13 и 3—15. Приведены положение и отнесение наблюдаемых линий, положения начал полос, значения  $B_v'$ ,  $D_v'$ ,  $B_v''$ ,  $D_v''$ . Равновесные молек. постоянные  $B_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $\gamma_e$ ,  $D_e$ ,  $\beta_e$  (в  $\text{см}^{-1}$ ) и  $R_e$  (в Å) след.: состояние  $B^3\Pi(0_u^+)$  —  $2,798 \cdot 10^{-2}$ ,  $3,285 \cdot 10^{-5}$ ,  $-4,684 \cdot 10^{-6}$ ,  $3,365 \cdot 10^{-9}$ ,  $4,177 \cdot 10^{-10}$ , 3,082; состояние  $E(0_g^+)$  —  $2,0044 \cdot 10^{-2}$ ,  $9,240 \cdot 10^{-5}$ , —,  $3,653 \cdot 10^{-9}$ ,  $3,207 \cdot 10^{-10}$ , 3,6409;  $T_e(E) = 41411 \text{ см}^{-1}$ . Обсуждена природа верхнего возбужденного электронного состояния молекулы  $J_2$ .

В. М. Ковба

(М.П.)

X. 1986, 19, N24

$J_2$

1986

1 Л224. Исследование с высоким разрешением перехода  $E(O_g^4) \rightarrow B^3\Pi(O_u^4)$  молекулы  $J_2$  в области 4400—4000 Å. High resolution study of the  $E(O_g^4) \rightarrow B^3\Pi(O_u^4)$  transition (4400—4000 Å) of  $J_2$ . Venkateswarlu Putcha, Pramila T., Venkateswara Rao Yerneni. «Spectrochim. acta», 1986, A42, № 2—3, 285—298 (англ.)

Переход  $E \rightarrow B$  молекулы  $J_2$  в области 4400—4000 Å исследован с высоким разрешением в 14-м порядке 7,3-метрового вакуумного спектрографа Эберта. Выполнен анализ 9 полос этой системы и определены значения колебательно-вращательных постоянных для обоих состояний. Библ. 26. В. С. Иванов

(м.п.)

гб. 1987, 18, N 1

I<sub>2</sub>

DM 24320

1986

/ 104: 233325r High resolution study of the  $E(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+)$  transition (4400-4000 Å) of iodine. Venkateswarlu, Putcha; Pramila, T.; Rao, Yerneni Venkateswara (Dep. Phys., Alabama A and M Univ., Normal, AL 35762 USA). *Spectrochim. Acta, Part A* 1986, 42A(2-3), 285-98 (Eng). The  $E \rightarrow B$  transition of I<sub>2</sub> at 4400-4000 Å was studied under high resolu. using a 7.3 m vacuum Ebert spectrograph in the 14th order. The values of the consts.  $B_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $\gamma_e$ ,  $D_e$  and  $\beta_e$  of both  $E$  and  $B$  states detd. from the anal. of the rotational structure of 9 bands of the system are presented. Vibrational consts. of the  $E$  state obtained from the anal. of all the bands so far reported and consistent with the precise consts. of the  $B$  state given in previous work are also presented. The origin of the upper state,  $E(0_g^+)$ , of the transition is discussed.

$(E(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+))$

C.A. 1986, 104, N 26

2  
2

1986

1 1001 08044r Hyperfine spectra of iodine at 629 nm. Wu, Chengjiu; Blalaw, J. (Anhui Inst. Opt. Fine Mech., Acad. Min. Hefei, Peop. Rep. China), *Zhongguo Jiguang* 1986, 13(7), 432-3 (Ch). Hyperfine spectrum of a rovibrational line of the  $I_2$  mol. using the 629 nm line of a He- $^{22}$ Ne laser was obsd. by a specific satd.-absorption spectroscopy.

(cnxmp)

c.A. 1987, 106, N 8

9  
2

1986

106: 110332z Hyperfine spectrum of iodine molecules  $^{127}\text{I}_2$  and  $^{129}\text{I}_2$   
Wu, Chengjiu (Anhui Inst. Opt. Fine Mech., Acad. Sin., Hefei, P.R.  
Rep. China). *Guangpuxue Yu Guangpu Fenxi* 1986, 6(6), 1-3, 5  
(Ch). The hyperfine spectrum (HFS) of another rovibrational line of  
 $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$  was obsd. by a sp. satd.-absorption spectroscopy. The  
characteristics of the HFS of  $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$  are discussed and compared  
with that of  $^{127}\text{I}_2$  and  $^{129}\text{I}_2$ .

сверхтонкое  
расщепление

C.A. 1987, 106, N 14

2

[Om. 26093]

1987

Bowmaker G.A., Boyd P.D.W.

смыктыра,  
меф. паерм

J. Mol. Struct. (Theochem.),  
1987, 150, 327-344.

of  
22

[Om. 29/193]

1987

Brand F.C.D., Hoy A.R.,

(M. Cocmo-  
XIII) Appl. Spectro Rev.,  
1987, 23, N 3-4,

285-328●



I<sub>2</sub>

1987

Bernusai A. A., Geal-  
betro G. M.

u.n. 7. Raman Spectrosc.  
1987, 18, N2, C. 93-95.

● (cell. Br<sub>2</sub> ; III)

2  
2

1987

108: 103210w High resolution optical multiplex spectroscopy. Dinse, K. P.; Winters, M. P.; Hall, J. L. (Inst. Phys., Univ. Dortmund, D-4600 Dortmund, 50 Fed. Rep. Ger.). *Springer Ser. Opt. Sci.* 1987, 55(Laser Spectrosc. 8), 388-9 (Eng). High resn. optical multiplex spectroscopy was achieved in which the correlator output is equiv. to a free induction decay signal, obtained after a single pulse stimulation of the sample. The essence of the method is the stimulation of the system with broad-band noise, being characterized by a correlation time  $\tau$ . In a true multiplex fashion the sample is excited within a spectrum interval  $\Delta\Omega \approx 2/\tau_c$  and the response is unfolded by cross-correlation with a varying delay. Due to the continuous excitation in contrast to the single pulse excitation, the power requirements to excitation are greatly reduced. In addn. a signal/noise advantage of  $\sim(\Delta\Omega/\Delta\omega)^{1/2}$  ( $\Delta\omega$  denoting the single line spectral width) can be obtained when comparing the noise excitation expt. with a conventional scan expt. An example is given showing the cross-correlation signal when tuning the unmodulated frequency close to the b8/b9 region of the R(15) 43-0 transition.

(cnekmp)

C.A. 1988, 108, N12.

2

1987

1 Б1084. Осциллирующий континуум связанный с испусканием ионно-парного состояния  $F(0_u + J_2)$ . Oscillatory continuum emission from the  $F(0_u +)$  ion-pair state of  $J_2$ . Donovan R. J., Macdonald M. A., Lawley K. P., Yench A. J., Hopkirk A. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 6, 571—574 (англ.)

При однофотонном возбуждении второго ионно-парного состояния ( $FO_u +$ ) молекулы  $J_2$  синхротронным излучением (169 нм) в спектрах испускания наблюдались два осциллирующих континуума в области 250—270 нм (переход  $FO_u + \rightarrow XO_g +$ ) и в области 280—330 нм (переход  $DO_u + \rightarrow XO_g +$ ). Для подтверждения отнесения проведено сопоставление эксперим. спектров с результатами модельных расчетов выполненных на основании известных данных по молек. постоянным с использованием экспоненциальной ф-ции для момента перехода. Для потенциальной кривой состояния  $DO_u +$  использована приближенная ф-ция Риттнера,  $U(R) = Ae^{-bR} - C_1/R + C_3/R^3 - C_4/R^4 - C_6/R^6 + T_{inf}$ . Зна-

М.П.

Х. 1988, 19, N 1

чения указанных параметров:  $A=1,0392 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$ ,  
 $b=1,9017 \text{ Å}^{-1}$ ,  $C_1=1,16142 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1} \text{ Å}$ ,  $C_3=1,3553 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1} \text{ Å}^3$ ,  
 $C_4=2,0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1} \text{ Å}^4$ ,  $C_6=2,0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1} \text{ Å}^6$ ,  
 $T_{inf}=72\,161 \text{ см}^{-1}$ . Спектры испускания получены также с использованием более коротковолнового излучения (158 нм предполагаемая обл. возбуждения 3-го ионно-парного состояния молекулы). В этом случае наблюдалась малоинтенсивная структурированная флуоресценция, связанная предположительно с переходом  $F'O_u^+ \rightarrow XO_g^+$ .

В. М. Ковба



1987

I<sub>2</sub>\*

WO 31 Two-Photon Photoacoustic Spectrum of I<sub>2</sub><sup>\*</sup>, G. Chakrapani, Putcha Venkateswarlu and M. C. George, Alabama A&M University--Laser two-photon photoacoustic spectrum of I<sub>2</sub> beyond the convergence limit of the B<sup>3</sup>π (0<sup>+</sup>) state has been recorded in the region 20,050-21800 cm<sup>-1</sup>. The high sensitive photoacoustic spectrometer system used for this work was built in this laboratory. The tunable output from a nitrogen laser pumped dye laser has been made to double-pass after focussing through the saturated iodine vapor at room temperature and filled along with air at atmospheric pressure in the sample cell of the spectrometer system. Using four different coumarine dyes, the dye laser is scanned to cover the wavelength region 460-510nm and the resulting photoacoustic spectrum along with the optogalvanic spectrum in neon discharge is recorded. The photoacoustic spectrum shows discrete structure which could be explained as due to an overlap of two-photon transitions from the X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>(0<sup>+</sup>) state to four of the high lying states with T<sub>n</sub> values at

двухфотон.  
фотоакустич.  
спектр

"BULL. AMER. PHYS. SOC.", 1987,  
32, N8.

~~38517~~

~~A7 982493~~

~~ISSN 9993-9593~~

~~US~~

40766, 41355, 41562 and 41732  $\text{cm}^{-1}$  respectively. Intensity dependence of the spectrum on laser power and the probable assignments will be discussed.

\*Work supported by the U. S. Department of Energy,  
Grant #DE-FG05-84ER13206.

2  
2

Am. 28437

1987

чекмы  
некорро  
павлен.

Felker P.M., Henson B.F.,  
Corcoran T.C. et al.,

Chem. Phys. Lett., 1987,  
142, N 6, 439-445.

У  
2

От 27887

1987

3 Д56. Точное вычисление потенциалов Ридберга — Клейна — Риса. On accurate computation of RKR potentials. Gallas Jason A. C. «Phys. Lett.», 1987, A124, № 4—5, 290—294 (англ.)

При описании кривых потенц. энергии атомов в двухатомных молекулах введена вспомогательная ф-ция, использование которой оказывается предпочтительным по сравнению с ф-цией Клейна. Вычисления с использованием предложенной ф-ции не связаны с решением проблемы расходимости интегралов и могут выполняться стандартными методами интегрирования, приводя к точным результатам. Приведен пример вычисления значений точек поворота для потенц. кривых молекулы  $I_2$  (для 18 значений колебательного квантового числа  $v$  состояния  $B$  от  $v=0$  до  $v=85$ ) и молекулы  $CO$  (для 15 значений  $v$  состояния  $X$  от  $v=0$  до  $v=28$ ) с использованием метода Симпсона.

В. А. Морозов



М.П.

ф. 1988, 18, №3



2  
2

7 11 Б1162 К. Атлас спектра поглощения молекулы йода. 14 800—20 000  $\text{см}^{-1}$ . Дополнение. Идентификация переходов системы (B—X). Отнесение линий йода [B(J<sub>2</sub>)—X]. Atlas du spectre d'absorption de la molécule d'iode. 14 800—20 000  $\text{см}^{-1}$ . Complément: Identification des transitions du système (B—X) assignments of the [B(J<sub>2</sub>)—X] iodine lines. Gerstenkorn S., Luc P. (Paris): CNRS, s. a. Var. pag. 285 (фр.)

Дан анализ отнесения переходов, наблюдаемых в спектре поглощения йода в обл. 14 800—20 000  $\text{см}^{-1}$  ( $\sim 10^5$  переходов системы B,  $v'=0-80-X$ ,  $v''=0-19$ ), широко используемом в оптич. спектроскопии для калибровки. Описаны физ. основы и критерии анализа и идентификации переходов, приведены наборы параметров Данхема для обоих электронных состояний. Дан атлас линий и примеры использования программы IDENTIFICATION для расчета всех возможных переходов в задаваемом спектральном диапазоне. Библ. 23.

М.А.

X-1987, 19, N 11

J2

1987

108: 84616q Amplified spontaneous emission of the  $B^3\Pi(0_u^+) - X^1\Sigma(0_g^+)$  system. Glessner, John W. (Air Force Technol., Dayton, OH USA). 1987. 222 pp. (Eng). Avail. Microfilms Int., Order No. DA8720497. From *Diss. Abstr.* 1987, 48(6), 1724.

( $B^3\Pi - X^1\Sigma$ )

C.A. 1988, 108, N10.

92

М.П.

М. 28827

ф. 1988, 18, № 6

1984  
6 Л231. Ионное состояние третьего яруса,  $f'0_g+(^1D)$ , молекулы  $J_2$ , заселяемое при четырехфотонных переходах. A third-tier ionic state of iodine,  $f'0_g+(^1D)$ : access by four-photon transitions. Ной А. Р., Тейлор А. В. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 2, 484—485 (англ.)  
Переход в ионно-парное состояние  $f'0_2+(^1D)$  молекулы  $J_2$  исследован с использованием схемы четырехфотонного возбуждения  $f'0_2+ \leftarrow F0_u+ \leftarrow B0_u+ \leftarrow X$ . При трехфотонном (1+2) возбуждении в видимой области спектра заселялось ионно-парное состояние  $F0_u+$  (с промежуточным резонансом в состоянии  $B0_u+$ ), из которого наблюдался переход (при поглощении четвертого, ИК-фотона) в состояние  $f'0_u+$ . При сканировании частоты ИК-лазера удалось наблюдать хорошо разрешенные линии Р, R-пар перехода  $f'0_g+ \leftarrow F$ . Выполнен частичный колебательно-вращательный анализ, однако установить точную колебательную нумерацию наблюдаемых линий не удалось. Для частоты колебаний в состоянии  $f'0_2+$  получено значение  $\omega_e = (100 \pm 3) \text{ см}^{-1}$ .  
В. С. Иванов

I<sub>2</sub>

(Om. 28827)

1987

108: 28822s A third-tier ionic state of iodine,  $\text{fO}_2^+(\text{^1D})$ : access by four-photon transitions. Hoy, A. R.; Taylor, A. W. (Dep. Chem., Univ. Western Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 126(2), 484-5 (Eng). Vibrational levels of a 3rd-tier state of  $\text{I}_2$ ,  $\text{fO}_2^+(\text{^1D})$ , were obsd. in an expt. which forms the case where a rotationally resolved spectrum was recorded with state selection in a 4-photon transition. Transitions  $\text{fO}_2^+ \leftarrow \text{X}$  were accomplished in a sequence of 3 visible and 1 far-red (or near-IR) photons, using photolionization detection.

( $\text{f}^1\text{O}_g^+$ )

ремкпх ротдх.  
переход

C.A. 1988, 108, ~4

I<sub>2</sub>

OM 26815 1987

(R $0_u^+$ )

106: 185305b A rotationally-resolved Rydberg transition of molecular iodine. The R  $0_u^+$  state. Hoy, A. R.; Jaywant, S. M.; Brand, J. C. D. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *Mol. Phys.* 1987, 60(4), 749-59 (Eng). Rotationally-resolved bands leading to a Rydberg state R  $0_u^+$  of I<sub>2</sub> were obsd. in a 2-stage, 3-photon transition from the ground state. The R  $0_u^+$  state interacts homogeneously with high vibrational levels,  $v_F \approx 200-250$ , of an ionic state F'  $0_u^+$ , the perturbation being directed by the vibrational overlap integrals towards even-numbered vibrational levels of R. Spectral consts. of R  $3_u^+$  are (in cm<sup>-1</sup>):  $T_c = 61665.15$ ,  $\omega_c = 209.29$ ,  $\omega_c x_c = 0.859$ ,  $B_c = 0.03842$ , and  $\alpha_c = 1.6 \times 10^{-4}$ . The electronic matrix element for the R, F' interaction (excluding 1 deviant result) is  $[W_c] = 107 \pm 1$  cm<sup>-1</sup>; thus  $W_c/\omega_c \approx 0.5$ , corresponding to intermediate coupling. R should be assigned to the  $0_u^+$  state of either the configuration (2430  $\Pi_{1/2g}$ )6p $\sigma_u$ , or of (2421  $^4\Sigma_u^-$ )6s $\sigma_g$ .

C.A. 1987, 106, N22

I<sub>2</sub>

1987

107: 66796y A spectroscopic study of the  $D(0_u^+)$  ion-pair state of molecular iodine by optical-optical double resonance. Ishiwata, Takashi; Tanaka, Ikuzo. (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Laser Chem.* 1987, 7(2,3,4), 79-93 (Eng). The  $D(0_u^+)$  ion-pair state of  $I_2$  was analyzed by optical-ODR (OODR). In a stepwise 3-photon excitation scheme,  $D(0_u^+)-B^3\Pi(0_u^+)=X^1\Sigma_g^+$ , the  $D(0_u^+)$  state appeared in the OODR spectrum as the vibrational progressions consisting of O, Q, and S branches in accord with the rotational selection rule of  $\Delta J = 0$  and  $\pm 2$  for the coherent 2-photon transition from the  $B^3\Pi(0_u^+)$  state. The  $D(0_u^+)-X^1\Sigma_g^+$  fluorescence was resolved to det. the abs. vibrational numbering of the  $D(0_u^+)$  state. Dunham parameters were derived effective for  $v = 0-124$  which were used to construct a Rydberg-Klein-Rees (RKR) potential curve.

( $D(0_u^+)$  com.)

c.A. 1987, 107, N 8

1987

24 Б1166. Спектроскопическое исследование ионно-парного состояния  $D(O_u^+)$   $J_2$  методом двойного оптического резонанса. A spectroscopic study of the  $D(O_u^+)$  ion-pair state of  $J_2$  by optical-optical double resonance. Ishiwata T., Tanaka I. «Laser Chem.», 1987, 7, № 2—3—4; 79—93 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом двойного оптич. резонанса, с высоким разрешением исследовано ионно-парное состояние  $D(O_u^+)$  молекулы  $J_2$ . Возбуждение молекул осуществлялось в результате трехфотонного поглощения излучения 2 независимо перестраиваемых лазеров на красителях по схеме  $X^1\Sigma_b^+ \xrightarrow{h\nu_1} B_3\pi(O_u^+) \xrightarrow{2h\nu_2} D(O_u^+)$  ( $v_D = 0—124$ ,  $J = 11—132$ ). Регистрировалась флуоресценция связанная с переходом  $D \rightarrow X$ . Значения (в  $\text{см}^{-1}$ ) параметров Данхема для состояния  $D: Y_{00} = 41028.584$ .  $Y_{10} =$

X. 1987, 19, N24

$=94.9928$ ,  $Y_{20}=-0,10919$ ,  $Y_{30}=-5,80 \cdot 10^4$ ,  $Y_{40}^{\sim}=$   
 $=3,7 \cdot 10^{-5}$ ,  $Y_{50}=7,6 \cdot 10^{-9}$ ,  $Y_{01}=0,020715$ ,  $Y_{11}=$   
 $=-4,374 \cdot 10^{-5}$ ,  $Y_{21}=-8,99 \cdot 10^{-8}$ ,  $Y_{31}=6,58 \cdot 10^{-10}$ ,  $Y_{02}=$   
 $=-4,93 \cdot 10^{-9}$ ,  $R_e=3,583$  А. Рассчитана потенциальная  
 кривая РКР для этого состояния и приведены значе-  
 ния  $T_v$ ,  $B_v$ , поворотные точки потенциальной кривой  
 ( $v \leq 124$ ). Результаты сопоставлены с данными по др.  
 изоэлектронно-парным состояниям молекулы  $I_2$ . В. М. Ковба



22

1987

Г 12 Л171. Спектроскопическое исследование ионного состояния  $D(0_u^+)$  молекулы  $I_2$  методом двойного оптически-оптического резонанса. A spectroscopic study of the  $D(0_u^+)$  ion-pair state of  $I_2$  by Optical-optical double resonance. Ishiwata Takashi, Tanaka Ikuzo. «Laser Chem.», 1987, 7, № 2—3—4, 79—93 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом двойного оптически-оптич. резонанса с использованием ступенчатой трехфотонной схемы возбуждения  $D(0_u^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$  исследовано ионно-парное состояние  $D(0_u^+)$  молекулы  $I_2$ . В соответствии с правилами отбора  $\Delta J = 0 \pm 2$  для двухфотонного перехода из состояния  $B^3\Pi(0_u^+)$ , состояние  $D(0_u^+)$  проявляется в спектре в виде колебательной прогрессии, содержащей O, Q и S-ветви. Определены коэф. Данхема для состояния  $D(0_u^+)$  и построен РКР потенциал этого состояния вплоть до уровня  $v=124$ . Библ. 26.

В. С. Иванов

М.А.

ср. 1987, 18, № 12

J<sub>2</sub>

1987

Gene F. Brandt B.A.

u.n. Theor. Chim. Acta,  
1987, 72, N5-6, 411-432.

(Cen. ● HF; III)

№  
2

Опш. 27890

1987

Карачевцев Т. В.,

(He)

Ис. прил. химии, 1987,  
61, № 8, 2070-2074.



2  
2

[Ом. 27 896]

1987

по темиз.

фр - ии

из электро-  
ногаринск.  
датека.

Люцарев В.С., Зеринский А.П.  
и др.,

Жл. физ. химии,  
1987, 61, N 8, 2225-2228

22

1987

107: 13251k Microphone detection of the predissociation of iodine in a supersonic beam. McMillan, K.; Bevan, J. W.; Fry, E. S. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *J. Appl. Phys.* 1987, 61(10), 4902-8 (Eng). Use of a condenser microphone as a detector in laser-mol. beam studies of excited state mol. dynamics is demonstrated through the observation of predissocn. in  $I_2$  seeded in a supersonic He beam. Resultant beam loss with the absorption of cw dye laser radiation in individual rotational lines of the  $^{127}I_2B^3\Pi_{0u}^+ - X^1\Sigma_g^+(25,0)$  transition is measured by the on-axis microphone and shows partially resolved hyperfine structure.

набл. предис-  
соцналь. в  
(сверхзвуком)  
луче

с. А. 1987, 107, N2

J<sub>2</sub>

(Om. 26806)

1987

Miller J.C.,

cnexmp.

J. Phys. Chem., 1987, 91,  
N10, 2589 - 2592.

72

1987

7 Б1241. Электронные моменты переходов включающих ионные состояния  $I_2$  как по данным измерений интенсивности флуоресценции, так и измерений времен жизни. Electronic transitions moments from both fluorescence intensities and lifetime measurements for transitions involving the  $I_2$  ionic states. Perrot J. P., Femelat B., Subtil J. L., Broyer M., Chevaleyre J. «Mol. phys.», 1987, 61, № 1, 85—95 (англ.)

М. П.

Методом двойного оптич. резонанса исследованы спектры флуоресценции (Фл) молекулы  $I_2$  из ионных состояний  $1_g(v=0-38)$  и  $O_g^+(v=0-33)$  и измерены времена жизни ( $\tau$ ) этих состояний. Возбуждение осуществлялось двумя лазерами (накачивающий,  $h\nu_1$  — Ar<sup>+</sup>-лазер, либо кольцевой лазер на красителе; пробный,  $h\nu_2$  — перестраиваемый лазер на красителе) по схеме  $1_g, O_g^+ (^3P_2) \xrightarrow{h\nu_1} BO_u^+ \xrightarrow{h\nu_2} X^1\Sigma_g^+$ . На основании результатов измерений распределения интенсивности полос в спектре Фл и най-

X. 1988, 19, № 7

денных  $\tau$  рассчитаны электронные дипольные моменты перехода,  $M_e(R)$ , в системах  $1g(^3P_2 \sim A^3\pi(1_u)$  и  $O_g^+(^3P_2) \sim B^3\pi(O_u^+)$  (представлены графически). В первой системе величина  $M_e(R)$  монотонно и приблизительно равномерно убывает от  $\sim 4$  до  $\sim 2,2D$  в интервале  $R \simeq 3,2 - 4,1 \text{ \AA}$ . Во второй системе  $M_e(R)$  остается постоянной ( $\sim 3,15D$ ) в обл.  $R \simeq 3,2 - 3,7 \text{ \AA}$  и затем убывает до  $\sim 1,5D$  при  $R \simeq 4,5 \text{ \AA}$ . В. М. Ковба





ay  
2

DM 28066

1987

10 Б1142. Переходы между связанными и несвязанными состояниями и предел диссоциации. Bound-free transitions and the dissociation limit. Ray A. K., Sharma S. D., Saksena G. D. «Pramana. J. Phys.», 1987, 29, № 5, 497—507 (англ.)

Исследована Фл молекул  $J_2$  связанная с переходами в системе  $E^3\Pi(O_g^+) \rightarrow B^3\Pi(O_u^+)$ . Отдельные колебательно-вращат. уровни ( $v'=32, J'=51,73; v'=34, J'=101; v'=42, J'=96$ ) состояния  $E^3\Pi(O_g^+)J_2$  заселялись в результате последоват. двухфотонного возбуждения по схеме  $E^3\Pi(O_g^+) \leftarrow B^3\Pi(O_u^+) \leftarrow X_1\Sigma_g^+$ . Спектры Фл представляли собой как серии резких линий соотв. переходам на дискретные колебательно-вращат. уровни вблизи диссоц. предела состояния  $B^3\Pi(O_u^+)$ , так и ряд широких линий связанных с переходами в обл. континуума состояния  $B^3\Pi(O_u^+)$ . Граница между обоими участками флуоресцентных серий использована для оценки величины диссоц. предела молекулы  $J_2$  в состоянии  $B^3\Pi(O_u^+)$ . Средн. по 4 сериям величина  $D_0(B) = 20042,6 \text{ см}^{-1}$ .

В. М. Ковба

М.П.

X. 1988, 19, №10

Л

От. 28066 1987

4 Л493. Связанно-свободные переходы в диссоциативном пределе. Bound-free transitions and the dissociation limit. Ray A. K., Sharma S. D., Saksena G. D. «Прамана. J. Phys.», 1987, 29, № 5, 497—507 (англ.)

Получены спектры флуоресценции  $E^2\Pi_{0g^+} \rightarrow B^3\Pi_{0u^+}$  молекулы  $J_2$ . Колебательно-вращательные уровни состояния  $E$  заселялись селективно двухквантовым последовательным переходом  $E \leftarrow B \leftarrow X^1\Sigma_g^+$  с использованием лазерного излучения с длинами волн 545—580 и 360—375 нм. Для каждого верхнего ровибронного уровня спектр состоит из серии узких линий, переходящих в ряд уширенных линий, отвечающих переходам в континуум состояния  $B$ . Определен диссоциационный предел состояния  $B$ . Усредненное по различным верхним уровням значение энергии диссоциации составляет  $20042,6 \text{ см}^{-1}$ .

Е. П. Смирнов

М.П.

ср. 1988, 18, №4

Y  
2

Om 28066

1987

108: 13361s Bound-free transitions and the dissociation limit.  
 Ray, A. K.; Sharma, S. D.; Saksena, G. D. (Spectrosc. Div., Bhabha  
 At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *Pramana* 1987, 29(5),  
 497-507 (Eng). Following a sequential 2-photon excitation,  
 fluorescence is obsd. from several selectively excited single rotation=  
 al-vibrational energy levels of the  $E^3\pi 0_g^+$  state of mol.  $I_2$ . The  
 reemitted  $E \rightarrow B$  fluorescence spectrum from each of the populated  
 rovibrational level of the E state consists of a series of sharp lines  
 terminating on the various discrete rovibrational levels of the B state  
 and a few broad lines due to transitions taking place on to the  
 continuum of the B state. The point of transition from sharp lines to  
 broad features in the fluorescence spectrum was utilized to det. the B  
 state dissocn. limit. This method of obtaining the dissocn. limit of  
 the mol. electronic states appears to be quite simple and straightforward.

guccos. nre-  
 gen.

C. A. 1988, 108, N 2

1987

$I_2$   
 $Br_2$   
 $Cl_2$   
Йод, бром, хлор. Жидкое и твердое состояние, термодинамические свойства / А. А. Славин, А. А. Абрамзон, З. Н. Славина и др.

// Журн. общ. химии. — 1987. — Т. 57, вып. 5. — С. 969—974.  
Библиогр.: 14 назв.

— 1. Йод — Термодинамические свойства. 2. Бром — Термодинамические свойства. 3. Хлор — Термодинамические свойства.



№ 89797  
18 № 5719  
ВКП 12.08.87  
Изд-во «Книга»

УДК 536.70  
ЕКЛ 17.4

2

[om. 28710]

1987

Inadden R.B.,

онрежелт.  
д.п. и  
снхмрб

J. Chem. Educ., 1987,  
64, N 11, 919-921.

2

1987

108: 46230b Spectroscopic studies of the halogens. Tellinghuisen, J. B. (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN USA). *Report* 1987, AFOSR-TR-87-0567; Order No. AD-A179551, 10 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Gov. Rep. Announce. Index (U. S.)* 1987, 87(16), Abstr. No. 734,694. A range of work, both theor. and exptl., is summarized involving the spectroscopy of the diat. halogens in the gas phase. Included are 1) Anal. of absorption, fluorescence, and emission spectra, both discrete and diffuse, of  $I_2$ ,  $Br_2$ ,  $Cl_2$ ,  $ICl$ ,  $IBr$ ,  $IF$ ,  $BrCl$  and  $BrF$ ; 2) the development of improved computational methods for evaluating diat. partition functions, simulating spectra, computing centrifugal distortion consts., fitting spectral data to mixed polynomial and near-dissocn. representations by the method of least squares, analyzing predissocn. data, and calcg. total radiative decay rates; 3) the detn. of the transition moment function for the B-X transition in  $I_2$  from high resolu. measurements of absorption by single rotational lines, using a continuous-wave dye laser as source; and 4) kinetics studies of the thermal dissocn. of the A' state of  $I_2$  following prepn. via excimer laser photolysis of  $I_2$  in He, Ar,  $Ni_2$ , and  $SF_6$ .

7

7

чекны и чык.  
ноуоуеа,  
фрыорелл,  
фачем чык  
но чыкел.  
ночм-беремпобн.

с. А. 1988, 108, N 6

2

DM-27643

1987

107: 165090v. Laser photoacoustic spectroscopy of iodine molecule: single and two-photon absorption. Venkateswarlu, Putcha; Chakrapani, G.; George, M. C.; Rao, Y. V.; Okafor, C. (Dep. Phys., Alabama A and M Univ., Normal, AL 35762 USA). *Pramana* 1987, 29(3), 261-77 (Eng). Photoacoustic spectroscopy of iodine mol. was studied in gas phase by using a N laser-pumped tunable dye laser. The exptl. yielded the vibrational spectrum corresponding to  $X^1\Sigma^+(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_g^+)$  transition up to the convergence limit. The photoacoustic spectrum at 17,850-18,850  $\text{cm}^{-1}$  is presented along with the vibrational anal. Five of the vibrational bands reported earlier were partially resolved and the structure of one of them was analyzed and is due to an overlap of (14, 2) and (12, 1) bands. The structure obsd. at 20,200-20,750  $\text{cm}^{-1}$  which is beyond the convergence limit of the transition  $X^1\Sigma^+(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_u^+)$  has been due to 2-photon absorption. Most of the bands could be assigned to 2 transitions both originating in the ground state and terminating in 2 different electronic states  $1_g$  and  $E(0_g^+)$ , at  $T_e = 40,821 \text{ cm}^{-1}$  (or  $T_0 = 41,355 \text{ cm}^{-1}$ ) and  $T_e = 41,411 \text{ cm}^{-1}$  (or  $T_0 = 41,355 \text{ cm}^{-1}$ ), resp.

$X^1\Sigma^+(0_g^+) \rightarrow B^3\Pi(0_g^+)$

M.A.



C.A. 1987, 107, N18

22

М 27643

1987

2 Л155. Фотоакустическая лазерная спектроскопия молекул иода. Одно- и двухфотонное поглощение. Laser photoacoustic spectroscopy of iodine molecule. Single and two-photon absorption. Venkateswarlu Putcha, Chakrapani G., George M. C., Rao Y. V., Okafor C. «Pramana. J. Phys.», 1987, 29, № 3, 261—277 (англ.)

М.П.

С помощью опто-акустич. методики, при использовании перестраиваемого наносекундного лазера на красителе, измерены спектры однофотонного ( $15\,900\text{--}18\,850\text{ см}^{-1}$ ,  $(B^3\Pi(0_u^+ \leftarrow X^1\Sigma^+(0_g^+))$ ) и двухфотонного ( $20\,200\text{--}20\,750\text{ см}^{-1}$ ) поглощения (в спектральной области выше границы электронно-колебательно-вращательной полосы однофотонного поглощения  $B \leftarrow X$ ) паров иода (0,4 мм рт. ст.) в воздухе при атмосферном давлении. Приведены: спектральное положение, относительные интенсивности и отнесение зарегистрированных в спектре полос колебательно-вращательных переходов  $(B^3\Pi(v^1) \leftarrow X^1\Sigma^+(v''))$ , где  $v'' = 0; 1$ ;

ф. 1988, 18, № 2.



2, а  $\nu' = 18-32$ . Наиболее подробно исследованы полосы для  $(\nu', \nu'') = (14, 2)$  и  $(12, 1)$ . Спектр двухфотонного поглощения связан с переходом из состояния  $X$  в состояния  $\beta(1_g)$  и  $E(0_g^+)$ , положение полос  $0 \leftarrow 0$  переходов в которые из состояния  $X$  составляют 40 766 и 41 355  $\text{см}^{-1}$  соответственно. Библ. 31.

В. А. Л.

I<sub>2</sub>

1988

Бибинов Н.К., Виноградов И.П.

Кинетика заселения  $D'^3P_{2d}$ -состояния молекулы иода  
// Хим. физика. – 1988. – Т. 7, № 4. – С. 455–461..

Библиогр.: 12 назв.

– – 1. Иод – Возбужденные состояния.

IIIк.

№ 80581

УДК 535.37+541.124

18

№ 4465

НПО ВКП 1.08.88

ЕКЛ 17.8

1988

24 Б1368. Влияние скоростей реакций на спектры комбинационного рассеяния молекулярных комплексов. Influence of reaction rates on Raman spectra of molecular complexes. Eskola S. M., Keskisaari L., Stepman F. «J. Mol. Struct.», 1988, 175, 383—388 (англ.)

Исследована концентрац. зависимость спектров КР ( $\lambda$  647,1 нм) р-ров комплексов  $I_2$  с бензолом и рядом его метилзамещ. в н-гептане. В спектре наблюдали линии, относящиеся к колебаниям свободного  $210\text{ см}^{-1}$  и комплексно связанного  $I_2$  ( $200\text{—}204\text{ см}^{-1}$ ). Анализ концентрац. зависимости контура линии, относящейся к колебанию комплексно связанного  $I_2$  позволил оценить время жизни комплекса ( $T$ ) и скорость р-ции комплексобразования. Для комплекса  $I_2$  с бензолом ( $203,3\text{ см}^{-1}$ )  $T = 10 \pm 3$  пс. Короткое время жизни комплекса приводит к уширению линии на  $\sim 1\text{ см}^{-1}$ . В то же время уширение линии, обусловленное переориентацией молекул, не превосходит нескольких десятых  $\text{см}^{-1}$ .

А. В. Бобров

X. 1988, N 24

32

1988

/ 110: 15172w Calculation of the vibrational force constants of diatomic molecules. Gorshenkov, V. N. (Gor'k. Inst. Fiz. Tekh., Gorkiy, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1988, 24(4), 485-7 (Russ). For the calcn. of the vibrational constns. of 2-atom mols the Wigner function of effective harmonic oscillators (EHO) was used with a Morse potential function. Single particle system are described by the operation of the presented Wigner function. EHO parameters were found both for individual mols. and for equil. assemblies of mols. Numerical values of the const. were obtained for  $I_2$ .

расчет

функции

рассмотрения

(11) 15172

с. А. 1989, 110, № 2

2

1988

5 Б1213. К расчету колебательных постоянных двухатомных молекул. / Горшенков В. Н., Рачков Г. М., Шустова Е. Н. // 20 Всес. съезд по спектроскопии, Киев, сент., 1988: Тез. докл. Ч. 1.— Киев.— 1988.— С. 242.— Рус.

Для расчета колебат. постоянных двухатомных молекул и их электронографич. постоянных использована модель эффективного гармонич. осциллятора с молек. Пт Морзе, Кратцера и (8—6) Леннарда — Джонса. Указанные постоянные рассчитаны для молекул  $I_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2^+$ ,  $CO$ ,  $CsCl$ ,  $HF$ ,  $HCl$ ,  $LiH$  при  $0 \leq v \leq 10$  и ряда т-р. Пт Морзе дает удовлетворит. согласие рассчитанных и эксперим. значений колебат. постоянных для всех перечисленных молекул.

С. Н. Мурзин

М.А.

(47)

X

X. 1989, N5

2  
2

1988

1 Б1162. О вычислении колебательных констант двухатомных молекул. Горшенков В. Н. // Теор. и эксперим. химия.— 1988.— 24, № 4.— С. 485—487.— Рус.

Для вычисления колебат. констант двухатомных молекул применена ф-ция Вигнера эффективного гармонич. осциллятора (ЭГО) с потенциальной ф-цией Морзе. Одночастичная система описывается операторным представлением ф-ции Вигнера. Найдены параметры ЭГО для отдельной молекулы и для равновесного ансамбля молекул. Получены численные значения констант для молекулы иода.

Резюме

М.А.

Х. 1989, №1

У<sub>2</sub>

(OM. 28527)

1988

У<sub>2</sub>-

Буцев Г. П., Богатырев А. И.  
и др.,

Электрон.  
структуры,  
расчет.

Ис. пр. из. Иссл. и, 1988,  
62, №2, 383-385.

9  
2

Am. 28851

1988

9 15 B1270. Возбуждаемые излучением азотного лазера при 337 нм резонансы связанные с переходами  $f0_g + (^3P_0) - B0_u +$  молекулярного иода ( $J_2$ ). The 337-nm nitrogen laser resonances with the  $f0_g + (^3P_0) - B0_u +$  transitions in molecular iodine ( $J_2$ ). Hickmann J. S., De Oliveira C. R. M., Francke R. E. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 2, 556—558 (англ.)

M. A.

Методом двойного оптич. резонанса исследовано состояние  $f0_g + (^3P_0)$  молекулы  $J_2$ . Для возбуждения использовались два лазера, один из к-рых (перестраиваемый лазер на красителе, ширина полосы возбуждения  $0,08 \text{ см}^{-1}$ ) осуществлял накачку уровней про-

X. 1988, 19, N 15.



межут. состояния  $B0_u^+$ , а второй (азотный лазер со стабилизированной частотой, обл. 337 нм) — за счет случайных резонансов возбуждал переходы в системе  $f0_g^+ \leftarrow B0_u^+$ . Излучение обоих лазеров вводилось в оптич. ячейку в противоположных направлениях. Регистрировалась (с помощью фильтров и монохроматора) флуоресценция в видимой и УФ-областях. В результате совместной обработки данных полученных в настоящей работе и опубликованных ранее рассчитан новый набор параметров Данхема для  $J_2(f0_g^+)$  (в  $\text{см}^{-1}$ ):

$$Y_{00}(T_e) = 47026,910, \quad Y_{10}(\omega_e) = 104,1862, \quad Y_{20}(-\omega_e x_e) = -0,21418,$$

$$Y_{30}(\omega_e J_e) = 2,93 \cdot 10^{-4}, \quad Y_{40}(\omega_e Z_e) = -7,8 \cdot 10^{-7},$$

$$Y_{50} = 3,7 \cdot 10^{-9}, \quad Y_{01}(B_e) = 2,08023, \quad Y_{11}(-\alpha_e) = -5,68 \cdot 10^{-5},$$

$$Y_{21}(\gamma_e) = 3,85 \cdot 10^{-8}, \quad Y_{02}(-D_e) = -3,35 \cdot 10^{-9}.$$

В. М. Ковба

24  
22

от 28 986

1988

17 Б1234. Спектр возбуждения вакуумной ультрафиолетовой флуоресценции  $J_2$ . Vacuum ultraviolet fluorescence excitation spectrum of  $J_2$ . Hiraya A., Shobotake K., Donovan R. J., Hopkirk A. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 1, 52—57 (англ.)

Методами спектроскопии поглощения и спектроскопии возбуждения флуоресценции (Фл) проведено изучение спектра  $J_2$  в вакуумной УФ-области (110—210 нм). Использовался непрерывно перестраиваемый синхротронный источник излучения. В спектре поглощения наблюдались: прогрессия полос перехода в ионно-парное состояние  $D(0_u^+)$  (178—200 нм); интенсивные ридберговские переходы с колебат. структурой (обл. 132—178 нм); структурированный фотоионизац. континуум при  $\lambda < 132$  нм. В спектре возбуждения Фл (обл. регистрации Фл  $\lambda > 180$  нм) наблюдались: переход в состояние  $D(0_u^+)$  с развитой колебат.

спектр

X. 1988, 19, N 18

структурой (184—198 нм); слабые полосы при  $\lambda_{\text{возб.}} = 170$  и 150 нм, связанные с переходами в ионно-парные состояния  $F(0_u^+)$  и  $F'(0_u^+)$ . При  $\lambda_{\text{возб.}} < 149$  нм наблюдалась атомная Фл иода ( $6s \rightarrow 5p$ ) связанная с образованием электронно-возбужденных атомов иода в состояниях  $6s^4P_{5/2}$  и  $6s^2P_{3/2}$  (пороги образования при  $150,0 \pm 0,5$  и  $147, \pm 0,5$  нм) при преддиссоциации высоколежащих ридберговских и ионно-парных состояний молекулы  $J_2$ . В. М. Ковба



2

(On 28 986) 1988

108: 65248e Vacuum ultraviolet fluorescence excitation spectra of molecular iodine. Hiraya, A.; Shobatake, K.; Donovan, R. J.; Hopkirk, A. (Inst. Mol. Sci., Myodaiji, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(1), 52-7 (Eng). A detailed study of the vacuum UV fluorescence excitation spectrum of  $I_2$  at 110-210 nm is reported. Both absorption and fluorescence excitation spectra were recorded simultaneously using continuously tunable synchrotron radiation. At long wavelengths (176-210 nm) the fluorescence excitation spectrum was dominated by the  $D(O_u^+)$  ion-pair state. Perturbations between the  $D(O_u^+)$  state and isoenergetic levels of the  $ca$  Rydberg state led to pronounced resonances (dips) in the fluorescence excitation spectrum. Weaker absorption to the  $F(O_u^+)$  and  $F'(O_u^+)$  ion-pair states was identified at 170 and 150 nm, resp. At  $<149$  nm electronically excited  $I(6s \ ^4P_{3/2})$  and  $6s \ ^2P_{3/2})$  were formed by predissociation of high-lying Rydberg and ion-pair states.

( $D(O_u^+)$ ,  $F(O_u^+)$ )

$F'(O_u^+)$

enikmf pnyop.

C.A. 1988, 108, 28

2

от 28 986

1988

9 Л460. Спектр возбуждения флуоресценции  $J_2$  в вакуумной УФ-области. Vacuum ultraviolet fluorescence excitation spectrum of  $J_2$ . Hiraya A., Shobatake K., Donovan R. J., Hopkirk A. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 1, 52—57 (англ.)

С использованием синхротронного излучения получены в области 110—210 спектр поглощения и спектры возбуждения флуоресценции  $J_2$ . Регистрировалась интегр. интенсивность флуоресценции в широкой спектральной области 180—650 нм, а также интенсивность выделенных узкополосными фильтрами атомных линий йода 183 и 206 нм. В спектрах определены области, в которых преимущественно возбуждаются ридберговские молекулярные состояния  $J_2D(0_u^+)$ ,  $F(0_u^+)$  и  $F'(0_u^+)$ . Измерены пороговые длины волн диссоциативного фотовозбуждения атомов йода в состояниях  $6s^4P_{5/2}$  и  $6s^2P_{3/2}$ , равные  $150,5 \pm 0,5$  и  $147,0 \pm 0,5$  нм соответственно.

Е. Н. Т.

М.П.

ср. 1988, 18, № 9

1988

22

9 Л169. Переходы с большими  $\Delta v'$  и изотопный эффект при неупругом рассеянии  $J_2^*$  ( $v'=35$ ) на  $H_2$  и  $D_2$  в пересекающихся пучках. Large  $\Delta v'$  transitions and isotope effects in the crossed beams inelastic scattering of  $I_2^*$  ( $v'=35$ ) from  $H_2$  and  $D_2$ . Krajnovich Douglas J., Butz Kirk W., Du Hong, Parmenter Charles S. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 6, 1388—1392 (англ.)

М.А.

Исследованы колебательно-вращательные переходы в молекулах йода в состоянии  $BO_u^+$ ,  $v'=35$ ,  $J'=8-11$  при рассеянии молекулярного пучка  $J_2$  на газовых мишенях — пучках водорода и дейтерия с энергией столкновения в Ц-системе 89 и 103 мэВ соответственно. Состояние  $BO_u^+$   $J_2$  заселялось лазером из основного состояния йода. Переходы при столкновениях детектировались по флуоресценции  $B \rightarrow X$ . Обнаружены переходы с изменением колебательного квантового числа  $\Delta v' = \pm 7$ , причем зависимость сечения переходов от  $\Delta v'$  симметрична относительно  $\Delta v' = 0$ . Изотопный эффект в зависимости сечения от  $\Delta v'$  обусловлен различием импульса столкновения для водорода и дейтерия.

ф. 1988, 18, № 9

Е. П. Смирнов

$J_2$

1988

6 Л206. Двухфотонная оптогальваническая регистрация ионно-парного состояния  $J_2(F'(O_u^+))$ . Two-photon optogalvanic detection of the  $F'(O_u^+)$  ion pair state of  $J_2$  / Kumar Vinod, Rai A. K. Rai D. K. // Pramāna: J. Phys.— 1988.— 31, № 5.— С. L421—L425.— Англ.

Методом 2-фотонного возбуждения с оптогальванич. регистрацией исследован спектр перехода в ионно-парное состояние  $J_2(F'(O_u^+))$  из состояния  $V^3Po_u^+$ . Состояние  $V^3Po_u^+$  заселялось в тлеющем разряде. Выполнено отнесение полос спектра.

В. С. Иванов

И.А.

ф. 1989, № 6

9  
2

1988

24 B4335. Исследования йода в  $B$ -состоянии методом лазеро-индуцированной флуоресценции. Времена жизни слабо преддиссоциирующих уровней. Laser induced fluorescence studies of the iodine  $B$  state. Lifetimes of weakly-predissociated levels. Martinez E., Martinez M. T., Puyuelo M. P., Castaño F. «J. Mol. struct.», 1988, 175, 7—12 (англ.)

/ Измерены времена  $\tau$  затухания Фл паров  $I_2$  при давл. 3—218 мТорр при возбуждении узкополосным (спектр. ширина  $\sim 0,08 \text{ см}^{-1}$ ) перестраиваемым в обл. 591—595 нм и 510—521 нм импульсным лазером на красителе индив. вращательно-колебат. слабо преддиссоциирующих уровней  $I_2(B^3\Pi_{0,u}^+, v'=14, 15, 39-57)$ . Путем экстраполяции к нулевому давл. определены времена жизни  $\tau_0$  этих уровней при нулевом давл. Величины  $\tau_0$  (мкс) для различных уровней  $v'(J')$  таковы: 14(43—74) 1,21—1,29; 15(78—94) 1,20—1,27; 39(54) 1,10; 44(43) 1,84. С ростом  $v'$  до 51—52 величина  $\tau_0$  медленно

Спектр

Х. 1988, № 24



возрастает до 2,53 мкс, в дальнейший рост  $\nu'$  до 57 сопровождается более быстрым ростом  $\tau_0$  до 11,05 мкс. Не обнаружено заметной зависимости  $\tau_0$  от вращат. квант. числа  $J'$ , что соответствует слабо предиссоциирующим уровням. В. Е. Скурат



2

1988

108: 213004q Iodine  $B^3\Pi(0_u^+)$  state predissociation: evaluation of the interaction mechanisms for predissociated levels of the B state. Martínez, E.; Martínez, M. T.; Castano, F. (Fac. Cienc., Univ. Pais Vasco, Bilbao, Spain). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(2), 554-63 (Eng). Gyroscopic and hyperfine predissocn. parameters,  $C_v^2$  and  $a_v^2$ , for vibrational levels  $v' = 17-25$  of the  $B^3\Pi(0_u^+)$  state of  $I_2$  were evaluated by laser-induced fluorescence. Measurements of fluorescence decay of rovibrational levels of the B state are efficient in the detn. of predissocn. parameters in the region of interest between the 1st relative min. and the 2nd max. of predissocn. of the B state. Contributions of the interaction mechanism to the natural predissocn. of the  $I_2$  B state were evaluated, showing a higher preponderance of the hyperfine predissocn. interaction than previously estd.  $C_v^2$  And  $a_v^2$  dependence on Franck-Condon densities and electronic matrix elements is discussed.

$(B^3\Pi(0_u^+))$

predissociation

C.A. 1988, 108, N 24

$J_2$

(Om. 28300)

1988

момент  
электрон.  
переход

Perrot J.P., Femelat B.,  
et al.,

Molecular Phys., 1988, 61,  
N1, 85-95.

$I_2$

(Om. 28299)

1988

Perrot J.P., Femelat et al.,

Нусо-  
ени

Molecular. Phys., 1988,

61, N1, 97-108.



J<sub>2</sub>

1988

Saethre L. J., Groper O.,  
et al.

Acta chem. scand., 1988,  
442, N1, 16-26.

( J<sub>3</sub><sup>-</sup>; III)

2  
2

От 29289

1988

11 Л214. Функции ядерного квадрупольного взаимодействия в состояниях  $^1\Sigma_g^+$  и  $^3\Pi_{ou}^+$  молекулярного йода. Nuclear quadrupole coupling functions of the  $^1\Sigma_g^+$  and  $^3\Pi_{ou}^+$  states of molecular iodine. Špirko V., Blabla J. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 1, 59—71 (англ.)

Предложено несколько полиномиальных выражений для зависимости сверхтонкого квадрупольного взаимодействия от колебат. квантового числа в состояниях  $X^1\Sigma_g^+$  и  $B^3\Pi_{ou}^+$  молекулы йода. Будучи прокалиброваны по имеющимся эксперим. данным, предложенные ф-ции позволяют вычислять эффективные константы сверхтонкого квадрупольного взаимодействия для ранее не наблюдавшихся колебательно-вращательных уровней.

Е. П. Смирнов

М.А.

2

ф. 1988, N 11

22

05 29289

1988

21 Б1133. Функции ядерного квадрупольного взаимодействия состояний  $^1\Sigma_g^+$  и  $^3\Pi_{0u}^+$  молекулярного иода. Nuclear quadrupole coupling functions of the  $^1\Sigma_g^+$  and  $^3\Pi_{0u}^+$  states of molecular iodine. Spirko V., Bla-bla J. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 129, № 1, 59—71 (англ.)

На основе эксперим. спектроскопич. данных для электронных состояний  $X^1\Sigma_g^+$  и  $B^3\Pi_{0u}^+$  получены константы ядерного квадрупольного взаимодействия как ф-ции межъядерного расстояния. Определены параметры полиномиальных представлений констант квадрупольного взаимодействия. Полученные ф-ции обеспечивают близкое воспроизведение исходных эксперим. данных и дают возможность определить эффективные константы квадрупольного взаимодействия тех ровибронных состояний, для к-рых отсутствуют эксперим. данные.

А. А. Сафонов



М.А.

Х. 1988, 19, № 21

$I_2$

(Im. 29289) 1988

108: 228600e Nuclear quadrupole coupling functions of the  $^1\Sigma_g^+$  and  $^3\Pi_{ou}^+$  states of molecular iodine. Spirko, V.; Blabla, J. (J. Heyrovsky Inst. Phys. Chem. Electrochem., Czech. Acad. Sci., 100 00 Prague, Czech.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 129(1), 59-71 (Eng). Simple polynomial functions describing the vibrational dependence of hyperfine quadrupole coupling in the B and X electronic states of mol.  $I_2$  are presented. The functions, when related to available exptl. data, can be used to est. the effective hyperfine quadrupole coupling consts. for nonmeasured rovibrational states.

$(^1\Sigma_g^+, ^3\Pi_{ou}^+)$

Квадруполь-  
расщепл.

C.A. 1988, 108, N 26



2/2

1988

109: 82484s Hyperfine structure of the P(48) line in the 11-3 band of iodine molecules by FM saturation spectroscopy at 612 nm. Sugiyama, K.; Iwasaki, S.; Morinaga, A. (Natl. Res. Lab. Metrol., Japan 305). *Opt. Lett.* 1988, 13(7), 556-8 (Eng). The hyperfine intervals of the P(48) line in the 11-3 band of B ← X electronic transition of I<sub>2</sub> were measured by the beat frequency between a stabilized dye laser and a 612-nm I<sub>2</sub>-stabilized He-Ne laser. Hyperfine components were detected by using frequency modulation (FM) satn. spectroscopy, and the dye laser was stabilized to each of them without internal modulation. The hyperfine coupling const. were detd. from the measured hyperfine intervals as follows:  $\Delta eQq = 1945.0 \pm 0.7$  MHz,  $\Delta C = 28.2 \pm 1.3$  kHz.

спектр,  
спектральная  
структура P(48)  
B ← X

C.A. 1988, 109, N 10-

2

1988

110: 30792s Hyperfine structure near the 13-1 band head in the B-X transition of iodine-127 molecule. Wakasugi, M.; Horiguchi, T.; Koizumi, M.; Yoshizawa, Y. (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan 730). *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* 1988, 5(11), 2298-304 (Eng). Hyperfine structure of the rovibronic transitions  $R(3)-R(10)$  and  $P(1)-P(5)$  in the 13-1 band belonging to the B-X system of  $^{127}\text{I}_2$  was studied by rectangular-crossing mol.-beam laser-induced fluorescence. The full width at half-max. of the obsd. lines was 5 MHz, which corresponds to a resolving power of  $10^8$ . Not only allowed transitions  $\Delta F = \Delta J$  but forbidden transitions  $\Delta F = 3$  and  $\Delta F = \Delta J$  were identified, and abs. hyperfine coupling consts. of the rovibronic states ( $J = 0-10$ ) in the  $B(v' = 13)-X(v'' = 13)-X(v'' = 1)$  transition were detd. The relative line strength of each hyperfine transition was compared with the theor. value.

сверхтонкая  
структура

с.А.1989, 110, №

$I_2$ 

1989

, 111: 47465f First experimental evidence for the existence of blue-shifted iodine band: the  $^3\pi_1-^1\Sigma^+$  transition. An anecdote. Bhat, S. N.; Shedbalkar, V. P. (Dep. Chem., North Eastern Hill Univ., Shillong, 793 003 India). *Proc. - Indian Acad. Sci., Chem. Sci.* 1989, 101(1), 89-91 (Eng). The absorption max. of the  $^3\pi_1-^1\Sigma^+$  transition of the  $I_2$  mol. in cyclohexane is at 689 nm. Deriv. spectroscopic evidence for the blueshift of the above band in complexed I is provided for the 1st time.

 $(^3\pi_1 - ^1\Sigma^+)$ 

c.A. 1989, 111, 46

1989

T<sub>2</sub>

Bowmaker G. A.,

Schwerdtfeger P., et al.

Ze, De,

THEOCHEM 1989, 53

сущ. новея., (1-2), 87-101.

T, Ae;

(сущ. ● Br<sub>2</sub>; III)

I<sub>2</sub>

1989  
Dierking R., Tiemann E.,

Multiphoton - Ionization  
of the  $Og^+$  Ion - Pair  
States of Iodine Molecule

Eleventh Colloquium on  
High Resolution Molecular  
Spectroscopy, Giessen, 1989

September 18-22, 1983,  
A1, D14.

D14.

2/2

1989

6 Д55 ДЕП. К вычислению постоянных двухатомных молекул / Горшенков В. Н., Рачков Г. М.; Горьк. ун-т.— Горький, 1989.— 18 с.— Библиогр.: 3 назв.— Рус.— Деп. в ВИНТИ 21.03.89, № 1785—В89

Рассчитаны колебательные постоянные молекулы  $J_2$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $H_2^+$ ,  $HCl$ ,  $CsCl$ ,  $HF^+$ ,  $LiH$  методом эффективного гармонич. осциллятора (ЭГО). Потенц. ф-ция молекул задавалась потенциалами Морзе и Кратцера. Приведены ф-лы для расчета параметров ЭГО с указанными потенциалами и потенциалом (8—6) Леннард-Джонса. Рассчитаны также колебательные уровни энергии  $E_v$  ( $v=0, 1, \dots, 5$ ) молекулы  $CO$  с потенциалом Морзе.

Автореферат

М.П.

(47) X



ср. 1989, № 6

2

1989

5 Б1220. Спектры трех-фотонного поглощения  $^{127}\text{I}_2$  и  $^{129}\text{I}_2$  в области  $16\,500\text{--}18\,500\text{ см}^{-1}$ . The three-photon absorption spectrum of  $^{127}\text{I}_2$  and  $^{129}\text{I}_2$  in the region  $16\,500\text{--}18\,500\text{ см}^{-1}$  / King G. W., McLean T. D. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 135, № 2.— С. 207—222.— Англ.

М.П.

Исследованы спектры многофотонного поглощения  $^{127}\text{I}_2$  и  $^{129}\text{I}_2$  с высоким и низким разрешением. В экспериментах использовался либо один перестраиваемый лазер на красителях, либо два лазера на красителях: зондирующий и лазер накачки, работающие в зелено-красн. обл. спектра. При регистрации спектра с высоким разрешением ширина лазерной линии составляла  $0,12\text{ см}^{-1}$ , с низким разрешением —  $0,7\text{ см}^{-1}$ . В спектрах зарегистрированы полосы, ранее отнесенные к 2Р1С возбуждению молекул  $\text{I}_2$  в высоковозбужденные состояния в обл.  $35\,000\text{ см}^{-1}$ . На основании анализа спектров

X.1990, N5



с высоким разрешением доказано, что наблюдаемые полосы относятся к  $3P1C$  переходам в  $F^1O_u+(^1D)$  и  $FO_u+(^3P_0)$  состояния. Из анализа вращат. структуры полос определены молек. постоянные данных состояний. Отмечается, что полученные спектры не дают доказательств существования стабильных возбужденных состояний иода в обл.  $35\,000\text{ см}^{-1}$ . Е. А. Пазюк



9  
22

1989

111: 14612y The three-photon absorption spectrum of iodine-127 and iodine-129 in the region 16,500-18,500  $\text{cm}^{-1}$ . King, G. W.; McLean, T. D. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, ON Can. L8S 4M1). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 135(2), 207-22 (Eng). The multiphoton absorption of  $^{127}\text{I}_2$  and  $^{129}\text{I}_2$  was examd. under both low and high resolu., using either a single tunable dye laser or 2 independently tunable pump and probe dye lasers, operating in the green-red regions. The 1-color (1C) spectrum excited by a single laser at low resolu. shows bands that were interpreted by previous workers as 2-photon-1C excitation to  $\geq 1$  excited states at  $\sim 35,000 \text{ cm}^{-1}$ ; under high resolu. these bands revealed a complex rotational structure, which was reinterpreted as due mainly to 3-photon-1C transitions to the ion-pair states  $\text{F}'\text{O}_u^+(^1\text{D})$  and  $\text{FO}_u^+(^3\text{P}_0)$ , for which mol. consts. were derived. No evidence was found from the spectral anal. for stable excited states of  $\text{I}_2$  at  $\sim 35,000 \text{ cm}^{-1}$ .

$\text{F}'\text{O}_u^+(^1\text{D})$   
 $\text{FO}_u^+(^3\text{P}_0)$

c.A. 1989, III, N2

92

[Am. 33571]

1989

Kröckel H., Richter H.,  
et al.,

Mol. Phys. 1989, 68,  
917-930

N<sup>4</sup>,  
Hyperfine

● structure ~~of~~

the lowest  $Og^+$  and  $1g$   
ion pair states of  $Li$ .

1989

10 Б1020. Спектральные характеристики и кривые потенциальной энергии  $I_2$  и  $I_2^+$ . Spectroscopic properties and potential energy curves of  $I_2$  and  $I_2^+$  / Li J.; Balasubramanian K. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 138, № 1.— С. 162—180.— Англ.

Теоретически рассчитаны энергия и форма потенциальных кривых 30 электронных состояний  $I_2$  и 13 электронных состояний  $I_2^+$ . Расчеты проводили методом самосогласованного поля в релятивистском приближении при учете конфигурац. и спин-орбитальных взаимодействий. Сравнение результатов теорет. расчетов с эксперим. данными позволило уточнить идентификацию состояний  $X, A, A', B, B', B'', a, a', C, D', E, G, G'$  и  $H$   $I_2$  и состояний  $X, A$  и  $B$   $I_2$ . Отмечена существенная роль спин-орбитальных взаимодействий. Оценены спектроскопич. постоянные  $I_2$  и  $I_2^+$ . А. В. Бобров

(4) ~~2~~

Х. 1990, N 10.

1989

$I_2$   
 $I_2^+$   
 $I_2$

111: 204183g Spectroscopic properties and potential energy curves of iodine ( $I_2$  and  $I_2^+$ ). Li, Junqing; Balasubramanian, K. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 138(1), 162-80 (Eng). Multiconfiguration CAS-SCF followed by 1st-, 2nd-order, and relativistic CI calcs. were carried out on 30 electronic states of  $I_2$  and 11 electronic states of  $I_2^+$ , among which the spectroscopic properties of the bound states were calcd. The potential curves of the calcd. low-lying states are reported. These calcs. confirm earlier assignments of the X, A, A', B, B', B'', a, a', C, D', E, G, G', and H states of  $I_2$ , and the X, A, and B states of  $I_2^+$ . Spectroscopic properties of many states of  $I_2^+$  and a few states of  $I_2$  are predicted which are yet to be obsd. The spin-orbit effects are significant for many states of  $I_2$  and  $I_2^+$ . The nature of electronic states as a function of internuclear distance is provided. The exptl. predicted max. in the potential curve of the B state of  $I_2^+$  is explained by theor. calcs.

param in  
 comments

C.A. 1989, 111, N 22

2

1989

/ 111: 104888x Electronic spectroscopy and energy transfer pathways of matrix isolated iodine. Macler, Michel; Nicolai, Jean Philippe; Heaven, Michael C. (Dep. Chem., Emory Univ., Atlanta, GA 30322 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(2), 674-82 (Eng). Visible laser excitation (460-725 nm) of dil. rare gas/I<sub>2</sub> (2000:1) matrixes resulted in emission from the I<sub>2</sub>A <sup>3</sup>I(1<sub>u</sub>) state. Reanal. of the A → X spectra provided revised mol. consts. for matrix isolated I<sub>2</sub>. A state lifetimes of 70 ± 20, 80 ± 20, and 110 ± 30 μs were obsd. in Ar, Kr, and Xe hosts, resp. Excitation spectra for the A state closely followed the I<sub>2</sub> continuum absorption spectrum, indicating that transfer from the B <sup>3</sup>I(O<sub>g</sub>+) and <sup>1</sup>I(1<sub>u</sub>) states was effective in populating I<sub>2</sub>(A). At diln. ratios of 600:1 or lower the I <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>-<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub> transition was obsd. in conjunction with the A-X bands. Excitation studies showed that isolated I atoms, trapped

(L)

M. Macler &  
M. Nicolai

C.A. 1989, 111, N12

during the deposition process, were excited by energy transfer from nearby  $I_2^*$  mols. A vibronic progression, similar to the A-X bands, but shifted to longer wavelengths, was noted in coned. rare gas/ $I_2$  (100:1) matrixes. This system, which was emitted with a lifetime of about 10 ns, most probably originated from perturbed  $I_2A'$   $^3\Pi(2_u)$ . Internol. energy transfer was obsd. in matrixes that contained  $I_2$  codeposited with  $O_2$ . Electronic excitation of  $I_2$  resulted in a long-lived emission from  $O_2a^1\Delta_g$ . Matrixes contg. high concns. of  $I$  also exhibited  $O_2(a) \rightarrow I(^2P_{1/2})$  transfer.



127 J<sub>2</sub>

(Dm. 33184)

1989

cmprkpgg. Morinaga A., Sugiyama K.,  
et al.,

J. Opt. Soc. Amer. B  
1989, 6, N 9, 1656-1659.

Hypersfine structure of low-  
lying vibrational levels in the

B electronic state of molecular iodine.

9  
2

1989

нмнссс.

111:143289x Laser-induced time-resolved fluorescence study of the predissociation of low levels ( $v' = 8-12$ ) of the  $B^3\Pi(0_u^+)$  state of molecular iodine. Martinez, E.; Basterrechea, F.; Castano, F.; Martinez, M. T. (Fac. Cienc., Univ. Pais Vasco, Bilbao, Spain). *An. Quim., Ser. A* 1989, 85(1), 82-7 (Span). A time resolved fluorescence study, induced by a pulsed narrow band dye laser, for different rovibrational levels ( $v', J'$ ) of  $I_2 B^3\Pi(0_u^+)$  state, was carried out. Gyroscopic and hyperfine predissocn. parameters,  $C_2$  and  $a_2$ , for a set of  $B$  state vibrational levels,  $v' = 9-12$ , near the 1st max. of predissocn., were obtained. The validity of time resolved laser induced fluorescence to obtain  $I_2 B$  state predissocn. parameters, was checked. The higher preponderance of the hyperfine predissocn. mechanism was confirmed.

C.A. 1989, 111, n 16

2  
2

(Im. 33764)

1989

B-X-ray  
pixels,  
2,

Martinez E., Baster-  
rechea F.J., et al.,

Spectrosc. Lett., 1989,  
22, N8, 1007 - 1017

Validity of ● the electronic

transition moment functions  
for the B-X transition  
of  $I_2$  from radiative life-  
times of the vibrational le-  
vels of the B state.

I<sub>2</sub>

1989

111: 104628n Accurate determination of wavenumbers for iodine molecular lines in the red spectral region. Rakowsky, S.; Zimmermann, D.; Ernst, W. E. (Inst. Strahlungs- Kernphys., Tech. Univ., D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *Appl. Phys. B* 1989, B18(6), 463-6 (Eng). The hyperfine structure of various absorption lines of mol. iodine with wavenumbers between 12980 and 13890 cm<sup>-1</sup> was resolved using Doppler-free polarization spectroscopy. The wavenumbers of the  $\sigma$ -component of 17 rovibrational lines of I<sub>2</sub> due to the transition B<sup>3</sup>I<sub>0g</sub>-X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> with even rotational quantum nos. were detd. with an accuracy of 0.001 cm<sup>-1</sup>. A comparison of the centers of gravity of these 17 lines with the values of the iodine atlas of S. Gerstenkorn et al. yields a difference of  $\delta\nu = \nu_{\text{exp.}} - \nu_{\text{at.}} = -(1.8 \pm 1.2) \times 10^{-3}$  cm<sup>-1</sup> thus corroborating the data of the iodine atlas in the red region within limits of error.

(B-X)

C.A. 1989, 111, N12

22

[Im 34065] 1989

20 Б1212. Интенсивности во флуоресцентной 43- $\nu''$  серии  $I_2$ . Intensities in the 43- $\nu''$  fluorescence series of,  $I_2$  / Suárez Carlos B., Bertuccelli Daniela // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.— 1989.— 42, № 6.— С. 559—601.— Англ.

Представлены результаты измерений относит. интенсивностей вращат. линий ( $1 \leq l \leq 35$ ) 43—2, 43—10, 43—11, 43—19 и 43—20 полос в системе В—Х молекулы  $I_2$  возбуждаемых методом лазерно-индуцир. Фл. Источником возбуждения служил многомодовый аргон-ионный лазер с эффективной мощностью 1,5 Вт при  $\lambda_{\text{exc}} = 5145$  А. Для рассматриваемых переходов вычислены факторы Франка—Кондона с учетом колебательно-вращат. взаимодействия. Отмечено хорошее согласие рассчитанных и эксперим. данных.

А. В. Столяров

М.П.

X. 1990, № 20

1279  
2

(Dm. 33183)

1989

Nakasugi M., Koizumi M.,  
et al.,

J. Opt. Soc. Amer. B.  
1989, 6, N9, 1660-1664.

Rotational - ● quantum-num-



her dependence of hyper-  
fine transition intensity  
near the B ( $v' = 14$ ) -  $X(v'' = 1)$   
bandhead of  $^{127}\text{I}_2$ .

22

1989

→ 17 Б1143. Высоколежащие четные ридберговские состояния молекулярного иода. High lying gerade Rydberg states of molecular iodine / Wu Ming, Johnson Philip M. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 1.— С. 74—80.— Англ.

Методом спектроскопии многофотонной (2+1) ионизации (МФИ) исследованы 4 четных ридберговских состояния молекулы  $I_2$ . Спектры измерялись с использованием как обычной ячейки МФИ (статич. условия), так и с использованием время-пролетной системы (в режиме молек. пучка). Возбуждение осуществлялось излучением импульсного перестраиваемого (277—325 нм) лазера на красителе. В диапазоне 310—322 нм наблюдалась развитая прогрессия (полосы  $v' = 0-9 \leftarrow v'' = 0$  и полоса 0—1), отнесенная к двухфотонному переходу в ридберговское состояние  $^2g(^2\Pi_{3/2g})nd\sigma_g$  (начало перехода при  $62\,440\text{ см}^{-1}$ , средняя величина колебат. интервала в верхнем состоянии  $231\text{ см}^{-1}$ , главное квантовое число и квантовый дефект равны, соотв.  $n=7$ ,  $\delta=4,135$ ). В диапазоне 286—295 нм наблюда-

М.П.

Х. 1989, N 17

лись 3 прогрессии (полосы  $v'=0-6 \leftarrow v''=0$  и полоса  $0-1$ ), отнесенные к двухфотонным переходам в ридберговские состояния  $0_g(2P_{3/2g})(n+1)d\sigma_g$ ,  $1_g(2P_{3/2g})(n+1)d\sigma_g$ ,  $2_g(2P_{3/2g})(n+1)d\sigma_g$  (I—III). Начала переходов и средние колебат. интервалы верхнего состояния (в  $\text{см}^{-1}$ ), значения  $n$  и  $\delta$ : I—68335; 228; 8; 4,1695; II—68407; 211; 8; 4,1509; III—68434; 234; 8; 4,1439. Распределение интенсивности в колебат. структуре спектров МФИ оказалось сильно зависящим от того регистрировались ли ионы  $I^+$  или ионы  $I_2^+$ , что связано с факторами Франка—Кондона и предиссоц. скоростями для различных колебат. уровней промежут. состояний. Обсуждены каналы диссоциации  $I_2$  в процессе МФИ. В. М. Ковба

9  
2

1989

Pugsten.  
COCMOCH.

110: 84720k High lying gerade Rydberg states of molecular iodine. Wu, Ming; Johnson, Philip M. (Dep. Chem., State Univ. New York, Stony Brook, NY 11794-3400 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(1), 74-80 (Eng). Two new (2+1) multiphoton ionization (MPI) spectra of gerade Rydberg states of I are obsd. at 310.0-322.5 and 285.5-295.5 nm. These spectra were obtained in both a conventional MPI cell and in a time-of-flight mol. beam app. A long progression at 310.0-322.5 nm is possibly  $2_g (2I_{3/2g})nd\sigma_g$ , having band origin at 62,440  $\text{cm}^{-1}$ . Three progressions 285.5-295.5 nm are possibly  $2_g, 1_g, 0_g (2I_{3/2g}) (n+1)d\sigma_g$ , having band origins at 68,335, 68,407, and 68,434  $\text{cm}^{-1}$ , resp. The photodissocn. behavior of I in a MPI process is discussed.

C.A. 1989, 110, N10

92

1990

113: 198338j Shifted  $1/N$  expansion for the energy levels of the Varshni potential. Bag, M.; Dutt, R. (Dep. Phys., Visva-Bharati Univ., Santiniketan, 731235 India). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1990, 23(18), 3075-82 (Eng). The recently proposed shifted large- $N$  method is applied to the eigenvalue problem of Varshni's third potential, which provides a good representation of the potential energy curves of many covalent diat. mols. Anal. results for the vibrational and rovibrational energy levels of  $I_2(X)$ ,  $CO(X)$  and  $H_2(X)$  mols. compare fairly well with the exact ones obtained numerically. The accuracy of the eigenvalues is found to depend significantly on the width of the potential.

no metels.  
критике

(42)  $\boxtimes$  CO, H<sub>2</sub>

C. A. 1990, 113, n 22

(om. 33584) 1990

$J_2$

$J_2^+$

Balasubramanian K.,

Chem. Rev. 1990, 90, N1,  
93-167.

номемц.  
крупере,  
и.н.

Spectroscopic Constants  
and Potential Energy Curves  
of Heavy p-Block Dimers

and Trimmers.

$I_2$

1990

Dai Sheshan,

Ma Zhongxin.

расчёт

электрон.

структ. ч.

стабильн.

Министерство Лесоводства

1990, 48(4), 315-9.



(Сел.  $F_2$ ; III)



29  
02

CM 35282

1990

2. 16 B1250. Низколежащие четные ридберговские состояния  $I_2$ . Low lying Rydberg gerade states of  $I_2$  / Däsari R. R., Dalby F. W. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 6.— С. 3984—3986.— Англ.

Обсуждена и уточнена интерпретация спектров многофотонной  $(2+1)$  ионизации молекул йода в области 360—415 нм связанных с переходами в низколежащие четные ридберговские состояния  $(^2\Pi_g)ns\sigma_g$ . На основании сопоставления с экспериментом рассчитанного контура огибающей вращат. структуры, полосы 0—0 при  $48\,436\text{ см}^{-1}$  сделан вывод о типе верхнего электронного состояния,  $1_g(^2\Pi_{3/2g})ns\sigma_g$ , к-рый подтвержден также результатами расчетов относит. и абс. положения четырех ридберговских состояний относящихся к указанной электронной конфигурации:  $1_g(^2\Pi_{1/2g})ns\sigma_g$ ,  $0_g(^2\Pi_{1/2g})ns\sigma_g$ ,  $1_g(^2\Pi_{3/2g})ns\sigma_g$  и  $2_g(^2\Pi_{3/2g})ns\sigma_g$  (2, 1, 0 относятся к полному угловому моменту молекулы). Рассчитанные

М.А.

X. 1991, N 16

(эксперим.) электронные энергии перечисленных состояний равны соотв. (в  $\text{см}^{-1}$ ): 53 572 (53 563), 53 011 (52 994), 48 390 (48 417), 47 931 (—). Эффективная константа спин-орбитального взаимодействия остова,  $A = -5081 \text{ см}^{-1}$ . Оптим. величина обменного параметра  $G$  входящего в матрицу энергии описывающую относит. расположение ридберговских состояний равна  $510 \text{ см}^{-1}$ . Для состояния  $1g(^2\Pi_{3/2}\sigma)$  определена также величина  $B_e = 0,0384 \text{ см}^{-1}$ . В. М. Ковба

I<sub>2</sub>

Am. 35282

1990

/ 112: 188356d Low lying Rydberg gerade states of molecular iodine. Dasari, Ramachandra R.; Dalby, F. W. (Dep. Phys., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1W5). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(6), 3984-6 (Eng). A polemic. The multiphoton ionization of I<sub>2</sub> band with origin at 48,417 cm<sup>-1</sup>, identified by K.K. Lehmann et al. (*ibid.* 1978, 69, 1569) as excited state 2<sub>g</sub> was reanalyzed by band contour anal., and it is 1<sub>g</sub>. Confirmation comes from calcn. of relative electronic energy levels involved in (2Π<sub>3/2g</sub> and 3Π<sub>2/2g</sub>)nsσ<sub>g</sub> configuration.

Руггембл  
СОСМОЛМ

C.A. 1990, 112, N 20

92

Qm. 34489

1990

Donovan R.F., Nishi N.,

Chem. Phys. Lett.

Mem. Maps. vol  
1990, 169, N 1, 2, 74-76

Time - of - flight spectra  
of biond - to - free

transitions in  $\mathbb{Z}_2$ .

2  
2

1990

DM 34519

113: 220293q On the hyperfine structure of iodine-127 molecule lines at the 543 nm wavelength of the helium-neon laser. Fredin-Picard, Susanne; Razet, Annick (Bur. Int. Poids Mes., 92312 Sevres, Fr.). *Opt. Commun.* 1990, 78(2), 149-50 (Eng). Fitted hyperfine consts. of the  $R(12)26-0$  and  $R(16)28-0$  lines in the B-X system of  $^{127}\text{I}_2$  are presented. The std. deviation of the fittings were 15 and 115 kHz, resp.

B-X

Сверхтонкая  
структура

С.А. 1990, 113, N24

2  
2

[Om. 33.934]

1990

Bruebele M., Roberts F.,  
et al.,

Chem. Phys. Lett., 1990,  
166, N. 5-6, 459-469

Femtosecond ● temporal

spectroscopy and direct inter-  
sion to the potential:  
Application to Iodine.



2  
a2

от 34465 1990

4 Б1233. Повторное исследование системы полос Кордеса молекулярного йода с помощью вакуумного ультрафиолетового лазера. Reinvestigation of the Cordes band system of  $I_2$  using a vacuum ultraviolet laser / Hoy A. R., Lipson R. H. // Chem. Phys.— 1990.— 140, № 1.— С. 187—193.— Англ.

В вакуумной УФ области (168—195 нм) измерены спектры лазерного возбуждения ФЛ молекул  $I_2$ , охлажденных в струе. Использован лазерный источник с четырехволновым разностным смешиванием на парах ртути или газообразном ксеноне излучения перестраиваемого лазера на красителе. Наблюдалась система полос Кордеса, связанная с переходом молекулы  $I_2$  из состояния  $XO_g^+ (v''=0)$  в ионно-парное состояние  $D0_u^+ (v' = 140—290)$ . Значения рассчитанных параметров Данхема для  $^{127}I_2$  в состоянии  $D0_u^+$  (в  $cm^{-1}$ ):  $T_e' + Y_{00} =$

М.П.

Х. 1991, № 4

$=41028,54$ ;  $Y_{10}=94,997$ ,  $Y_{20}=-0,10879$ ,  $Y_{30}=-6,15 \cdot 10^{-4}$ ,  $Y_{40}=4,5 \cdot 10^{-6}$ ,  $Y_{50}=-1,57 \cdot 10^{-8}$ ,  $Y_{60}=3,3 \cdot 10^{-11}$ ,  $Y_{70}=-3,6 \cdot 10^{-14}$ ,  $Y_{80}=1,3 \cdot 10^{-17}$ . В спектре наблюдались также переходы на уровни с  $\nu' \geq 309$ . Интенсивности и возмущения этих полос связаны с вз-вием состояния  $D0_u^+$  с ридберговым состоянием  $c_6$ . Наблюдались кроме того малоинтенсивные полосы перехода  $F0_u^+ \leftarrow X0_g^+$  и полосы  $0-0$  и  $2-0$  системы  $c_6 \leftarrow X0_g^+$ . В. М. Ковба

92

Om 34485

1990

112: 107761g Reinvestigation of the Cordes band system of iodine molecule using a vacuum ultraviolet laser. Hoy, A. R.; Lipson, R. H. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *Chem. Phys.* 1990, 140(1), 187-93 (Eng). Vacuum UV (VUV) fluorescence excitation spectra of jet-cooled  $I_2$  between 195 and 168 nm were recorded using a tunable VUV "laser" generated by 4-wave difference mixing in Xe gas and Hg vapor. The strongest absorption in the VUV is between the ground state and the first tier ion-pair state  $DO_u^+$  (Cordes band system). Band edge wavenumbers measured in this work confirm the vibrational numbering proposed by Tellinghuisen for the VUV spectrum. D state levels between  $v' = 140$  and 290 were excited and mol. consts. valid between  $v' = 0$  and 290 were derived. Perturbed D levels having  $v' \geq 309$  were also obsd. Their band intensities appear to be related to homogeneous interactions with the  $ec$  Rydberg state.

$DO_u^+ \leftarrow X^1\Sigma$   
M.A.

C.A. 1990, 112, N 12

92

01. 33918 1990

19 Б1179. Переход  $D'-A'I_2$ , возбуждаемый коронным разрядом в сверхзвуковой струе. The  $D'-A'$  transition of  $I_2$  from a corona-excited jet discharge / Lipson R. H., Hoy A. R., McDonald N. // Chem. Phys. Lett. — 1990. — 168, № 1. — С. 25—29. — Англ.

Сфотографирована система полос перехода  $D'2_g (v'=0-9) \rightarrow A'2_u (v''=10-28)$  в спектре испускания молекулы  $I_2$  в области 320—345 нм. Спектр возбуждался при прохождении сверхзвуковой струи  $I_2$  в аргоне через коронный разряд. Пригодными для анализа вращат. структуры оказались лишь полосы 0—10, 0—11, 0—14, 1—10 и 1—14 (начала первых трех полос соотв. при 29 399, 5626; 29 320, 1266; 29 099, 354  $\text{см}^{-1}$ ). Значения рассчитанных молек. постоянных  $^{127}I_2$  (в  $\text{см}^{-1}$ . состояние  $D'2_g - \Delta G_{1/2} = 130,5342$ ,  $Y_{01} (\simeq B_e) = 0,020524$ ,  $Y_{11} (\simeq -\alpha_e) = -4,84 \cdot 10^{-5}$ ,  $Y_{02} (\simeq -D_e) = -3,1 \cdot 10^{-9}$ ; состояние  $A'2_u - Y_{01} = 0,02842$ ,  $Y_{11} = -2,32 \cdot 10^{-4}$ ,  $Y_{21} (\simeq \gamma_e) = -4,1 \cdot 10^{-6}$ ,  $Y_{02} = -3,88 \cdot 10^{-9}$ ,  $Y_{12} (\simeq -\beta_e) = -9,2 \cdot 10^{-10}$ . Найденные значения  $B_e'$  и  $B_v''$  сопоставлены с результатами выполненных ранее исследований и оценками.

В. М. Ковба

М.А.

X. 1990, N 19

2

[Om. 33575]

1990

струк-  
тура

Morinaga A., Sugiyama K.,  
Ito N.,

Кэүре Кэккюгзе Хоко-  
кү = Bull. NPLM. 1990,  
39, N151, ● 101-102

Hyperfine structure of  
low-lying vibrational  
levels in the B electronic  
state of molecular  
iodine\*

92

OM 34350

1990

1 B1028. Расчет валентных возбужденных состояний молекулы иода с помощью метода релятивистского эффективного потенциала. Calcul des états excités de valence de la molécule d'ode par une méthode de potentiel effectif relativiste / Teichtel C. // J. chim. phys. et phys.—chim. biol.— 1990.— 87, № 5.— С. 963—988. — Фр.; рез. англ.

Многоконфигурационным методом ССП и пертурбац. методом конфигурац. взаимодействия с использованием релятивистского псевдопотенциала, рассчитаны 23 возбужденных валентных состояния молек. иода, отвечающих диссоциации на атомы в состояниях  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$ . Предложена процедура введения поправок к рассчитанным спектроскопич. постоянным, использующая известные эксперим. данные для основного электронного состояния. Вычислены энергии электронных переходов при равновесном расстоянии 2,667 А основного состояния. Б. И. Жилинский

М.П.

X. 1991, N1

$I_2$

ДМ 34350

1990

7 12 Д140. Расчет валентных возбужденных состояний молекулы йода методом релятивистского эффективного потенциала. Calcul des états excités de valence de la molécule d'iode par une méthode de potentiel effectif relativiste / Teichteil C. // J. chim. phys. et phys.-chim. biol.— 1990.— 87, № 5.— С. 963—988.— Фр.; рез. англ.

М.П. Неэмпирическим методом МК ССП с использованием релятивистского эффективного потенциала в гауссовом базисе исследовано электронное строение  $J_2$  в 23 валентных возбужденных состояниях, диссоциирующих на атомы в состояниях  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$ . Приведены потенц. кривые, энергии диссоциации, колебательные частоты, значения  $\omega_{ex}$  и  $T_e$ . Введены поправки на неполноту базиса и конфигурац. взаимодействия, оцененные на основании эксперим. данных для основного состояния.

В. Л. Лебедев

Фр. 1990, N 12



of  
2

(DM 35346)

1991

Bharate N.S., Behere S.M.,  
et al.,

M.N. Nuovo Cim. D. 1991, 13, N1,  
15-20.

Estimation of Rotational and  
Vibrational Constants for

Diatomic Molecules Using  
Mattera's Potential Function.

127, 129 of  
22

DM 36544

1991

129, 130 of  
22

116: 94433g Molecular constants describing the  $B(^3\Pi_{0u}^+) - X(^1\Sigma_g^+)$  transitions of molecular iodine isotopomers  $^{127,129}\text{I}_2$  and  $^{129,129}\text{I}_2$ . Gerstenkorn, S.; Luc, P.; Le Roy, R. J. (Lab. Aime Cotton, CNRS II, 91540 Orsay, Fr.). *Can. J. Phys.* 1991, 69(10), 1299-303 (Eng). Mol. consts. describing the B-X absorption spectra of the radioactive species  $^{127,129}\text{I}_2$  and  $^{129,129}\text{I}_2$ , are presented. Combined with previous results for the naturally occurring isotopomer  $^{127,127}\text{I}_2$ , they provide the basis for a publicly accessible interactive computer program that automatically yields an ordered and assigned list of all transitions in a specified frequency range, together with the assocd. (predicted) Franck-Condon and Boltzmann factors.

$B^3\Pi_{0u}^+ - X^1\Sigma_g^+$ ,

M. N.

C.A. 1992, 116, N 10

2/2

m 36544

1991

10 Д96. Молекулярные постоянные, описывающие переходы  $B(^3\Pi_{0u}^+) - X(^1\Sigma_g^+)$  в  $^{127,129}\text{J}_2$  и  $^{129,129}\text{J}_2$ . Molecular constants describing the  $B(^3\Pi_{0u}^+) - X(^1\Sigma_g^+)$  transitions of  $^{127,129}\text{I}_2$  and  $^{129,129}\text{I}_2$  / Gerstenkorn S., Luc P., Le Roy R. J. // Can. J. Phys.— 1991.— 69, № 10.— С. 1299—1303.— Англ.; рез. фр.

М.А.

Рассчитаны наборы молекулярных постоянных, описывающих спектры поглощения  $B-X$  двух радиоактивных изотопомеров  $^{127,129}\text{J}_2$  и  $^{129,129}\text{J}_2$ . В сочетании с ранее полученными результатами для изотопомера  $^{127,127}\text{J}_2$  эти данные использованы для создания программы, которая автоматически позволяет получить список всех переходов в определенном диапазоне частот, а также значения факторов Франка—Кондона и Больцмана.

Ф, 1992, № 10