

CS₂

NO

N₂O

NO₂

спектры
испуск.

(+3) X

X1976 V6

X26901-5X

6 Б91. Спектры испускания и функции возбуждения CS₂, NO, N₂O и NO₂ при электронном ударе низкой энергии. Fukui Kiyoshi, Fujita Iwao, Kuwata Keiji. Emission spectra and excitation functions of CS₂, NO, N₂O and NO₂ by low energy electron impact. «Сингурё бунсэки, Mass Spectrosc», 1975, 23, № 2, 105—117 (англ.)

1975

Изучены спектры испускания CS₂, NO, N₂O и NO₂ в области 240—650 нм при возбуждении этих молекул электронами с энергией $E=2-25$ эв и зависимости сечений возбуждения от E [функции возбуждения (ФВ)] в условиях однократных столкновений электронов с молекулами. Получены ФВ для процессов: 1) CS₂→CS₂^{*}, 2) NO→NO(A)^{*}, 3) N₂O→N₂(C³Π_u)+O, 4) N₂O→N₂O⁺⁺+e, 5) NO₂→NO₂^{*}, 6) NO₂→NO (A и/или B)+O. Кроме состояния ³A₂ для CS₂, в области спектра 400—600 нм проявляется состояние, лежащее на 0,8 эв ниже R-системы (³A₂). Вид функции возбуждения N₂O подтверждает существование двух эмиттирующих состояний N₂O (дублет и квартет) в области 400—600 нм. Несколько резонансных пиков обнаружено на ФВ CS₂, NO и NO₂. Структура ФВ для процесса 4 хорошо согласуется с пороговым законом ионизации. Резюме

* 4 - 8656

1975

CS₂

(м.н.)

8 Д391. Высшие обертоны деформационных колебаний молекул $^{12}\text{CS}_2$ и $^{13}\text{CS}_2$ в основном электронном состоянии. Hallin K. - E. J., Malm D. N., Merer A. J. Higher overtones of the bending vibrations of the ground states of $^{12}\text{CS}_2$ and $^{13}\text{CS}_2$. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 54, № 2, 318—327 (англ.)

С высоким разрешением исследована R-система электронно-колебательно-вращательных переходов в молекулах $^{12}\text{CS}_2$ и $^{13}\text{CS}_2$ (область 3400—4100 Å). Вращательные постоянные высших обертонов деформационных колебаний в основном электронном состоянии определены: для $^{12}\text{CS}_2$ — вплоть до $v=6$ и $l=3$, для $^{13}\text{CS}_2$ — $v=4$ и $l=2$ (v и l — соответственно колебательное и вращательное квантовые числа). Энергетич. зазоры между электронно-колебательно-вращательными уровнями с одинаковым l определены с точностью $\pm 0,006 \text{ см}^{-1}$. Результаты хорошо согласуются с данными, полученными методами ИК-спектроскопии. Библ. 16. А. Перов

 (XIX-XIV)
 ВР-6266-XIV
 ВР-6266-XIV

Ф 1975 N 8

XU-8656

1975

CS₂

1) 17 B148. Высшие обертоны деформационных колебаний $C^{12}S_2$ и $C^{13}S_2$ в основном состоянии. Halpin K.-E. J., Matsumoto D. N., Merer A. J. Higher overtones of the bending vibrations of the ground states of $^{12}CS_2$ and $^{13}CS_2$. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 54, № 2. 318—327 (англ.)

Сфотографированы в области 3400—4100 Å (часть перехода $^3\Delta_u - ^1\Sigma_g^+$, «горячие полосы») спектры поглощения высокого разрешения газ. $C^{12}S_2$ и $C^{13}S_2$ и выполнен анализ тонкой колебательно-вращательной структуры переходов; получены точные значения вращательных постоянных для обертонов деф. кол. основного состояния вплоть до $\nu_2=6$ и $l=3$ в случае $C^{12}S_2$ и $\nu_2=4$, $l=2$ для $C^{13}S_2$. Б. В. Рассадин

17 B148

См. также

спектры

поглощения

в газе

XU-8656-117

X 1975 N17

CS₂

X45-8656

1975

B40-6268-XIV

D. Kemp.

C. Kemp.

141541d Higher overtones of the bending vibrations on the ground states of carbon-12 disulfide and carbon-13 disulfide. Hallin, K. E. J.; Malm, D. N.; Merer, A. J. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, B. C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 54(2), 318-27 (Eng). Large nos. of hot bands in the 1st electronic absorption system of ¹²CS₂ and ¹³CS₂ were analyzed from plates taken at high dispersion and accurate rotational consts. were obtained for the overtones of the ground state bending vibration up to $\nu_2 = 6$ and $l = 3$ for ¹³CS₂ and $\nu_2 = 4$, $l = 2$ for ¹²CS₂. The energy differences between the various levels with the same l value were detd. to an accuracy of $\sim \pm 0.006$ cm⁻¹, but (because of the parallel polarization of the electronic transition) the abs. energies of levels with $l > 0$ cannot be obtained.

C.A. 1975, 82, N22

1978

C 82

Murkin-Franskin M.J et al
J. Electron. Spectrosc.

спектр and Relat. Phenom,
1975, 7, №2, 133-149.

are CO_2 ; III

CS₂

*4 - 11208

1975

10 Б1267. Флуоресценция $CS_2 + (B^2\Sigma_u^+, A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$, возбуждаемая фотоионизацией паров CS_2 . Lee L. C., Judge D. L., Ogawa M. $CS_2 + (B^2\Sigma_u^+, A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ fluorescence from photoionization excitation of CS_2 vapor. «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 19, 1861—1868 (англ.; рез. франц.)

(У. и. и.)
Исследованы и отождествлены полосы испускания в диапазонах 275/295 нм, (переход $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Pi_g$) и 300—580 нм. (переход $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$) при фотоионизации паров CS_2 излучением в диапазоне длин волн 46,2—97,7 нм. Для перехода $A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$ приведена диаграмма колебательных полос, по которой уточнены значения потенциалов ионизации CS_2 из ряда колебательных уровней основного состояния, а также величина спин-орбитального расщепления уровня $A^2\Pi_u$ — 169 ± 20 см⁻¹. Измерены абс. значения сечений образования уровней флуоресценции состояний $A^2\Pi_u$ и $B^2\Sigma_u^+$ в диапазоне 46—98 нм, сопоставление которых с абс. значениями сечений поглощения позволило определить квантовые выходы флуоресценции и выявить вклад процессов диссоциативной ионизации.

Г. К. Васильев

X1976 N10

#4 - 11208

1975

84: 36998e Carbon disulfide+ ($B^2\Sigma_u^+, A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g$) fluorescence from photoionization excitation of carbon disulfide vapor. Lee, L. C.; Judge, D. L.; Ogawa, M. (Dep. Phys., Univ. South. California, Los Angeles, Calif.). *Can. J. Phys.* 1975, 53(19), 1861-8 (Eng). $CS_2 + (B^2\Sigma_u^+, A^2\Pi_u \rightarrow X^2\Pi_g)$ fluorescence bands produced by irradiation of CS_2 vapor with emission lines from $\lambda\lambda 462-977 \text{ \AA}$ were analyzed and their production cross sections measured. The assignments for the emission bands of the bending transitions, $B^2\Sigma_u^+(0v0) \rightarrow X^2\Pi_g(0v0)$, are suggested. By using the tentatively assigned positions of the band heads for the $A^2\Pi_u(v00) \rightarrow X^2\Pi_g(000)$ transitions, the ionization potentials for the $A^2\Pi_u(v00)$ vibrational levels were obtained and are in good agreement with the photoelectron data. The splitting constant of the spin-orbit interaction for the $A^2\Pi_u$ state was $169 \pm 20 \text{ cm}^{-1}$. The CS_2^+ ($A^2\Pi_u, B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Pi_g$) fluorescence has exceptionally high production cross sections at the absorption bands associated with the $n = 3$ members of the Rydberg series III and V.

CS₂u, n;
cncatp
p. 100 p. 101

C. A. 1976. 84. N6

51111.7202
Ch, Ph, TC, MGU

40892
 CS_2 (протогиссая)
1975
*У-10391

Lee L.C., Judge D.L.

$CS(A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+)$ fluorescence from
photodissociation of CS_2 and OCS.

"J.Chem.Phys.", 1975, 63, N 7, 2782-2787

(англ.)

0432 ББК

460 462

4 R 4

ВИНИТИ

CS₂

(M)

ФР 1976 № 6

6 Д359. Дипольный момент CS₂ в состоянии $\bar{a}^3A_2$.
Larzillière M., Ramsay D. A. Dipole moment of
CS₂ in its $\bar{a}^3A_2$ state. «Can. J. Phys.», 1975, 53, № 16,
1579—1586 (англ.; рез. франц.)

Исследован эффект Штарка в системе $\bar{a}^3A_2 - X^1\Sigma_g^+$ молекулы ¹²C³²S₂. Наиболее сильно воздействие электр. поля проявилось на вращательных уровнях 27_{0,27} и 26_{1,26} колебательного состояния 140 и вращательных уровнях 29_{0,29} и 28_{1,28} колебательного состояния 050. Эти пары уровней почти вырождены и в присутствии электр. поля связаны взаимодействием, описываемым недиагональными матричными элементами. Анализ штарковского сдвига и формы уширенных в электр. поле линий дал следующие значения дипольного момента и энергетич. зазора между уровнями в отсутствие поля: $\mu'(140) = 0,37 \pm 0,04$ ед. Дебая; $\mu'(050) = 0,47 \pm 0,05$ ед. Дебая; $F'(27_{0,27}) - F'(26_{1,26}) = +0,025 \pm 0,010$ см⁻¹; $F'(29_{0,29}) - F'(28_{1,28}) = +0,035 \pm 0,010$ см⁻¹. Сравнение полученных положений уровней с величинами, определенными из спектроскопич. измерений в ближней УФ-области и данных о значениях термов нижнего состояния, обнаружило систематич. расхождение, равное 0,02 см⁻¹. Библ. 11. И. Дворников

1975

СММ, 3588

C.S. 2

Ommuck 3588

1975

84: 51711z Dipole moment of carbon disulfide in its a^3A_2 state. Larzilliere, M.; Ramsay, D. A. (Div. Phys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Can. J. Phys.* 1975, 53(16), 1579-86 (Eng). The Stark effect on the $a^3A_2-X^1\Sigma_g^+$ system of $^{12}C^{32}S_2$ was investigated. The most pronounced effects involve the 27_{0,27} and 26_{1,26} rotational levels of the 140 vibrational state and the 29_{0,29} and 28_{1,28} rotational levels of the 050 vibrational state. These pairs of levels are nearly degenerate and are coupled by an off-diagonal matrix element in the presence of an elec. field. An anal. of the Stark shifts and the shapes of the Stark broadened lines yields $\mu'(140) = 0.37 \pm 0.04$ D; $F'(27_{0,27}) - F'(26_{1,26}) = +0.025 \pm 0.010$ cm⁻¹; $\mu'(050) = 0.47 \pm 0.05$ D; $F'(29_{0,29}) - F'(28_{1,28}) = +0.035 \pm 0.010$ cm⁻¹. Comparison of these energy sepsns. with values calcd. from measurements in the near uv spectrum and lower state term values based primarily on ir data reveals a systematic discrepancy of 0.02₂ cm⁻¹.

C.A. 1976 84 N8

CS₂

XIV-7253

1975

Overend J.

Vibr. Spectra and
chemtp. Struct. Vol. 3. New York,
1975, 131-238.



(cm HCN) III

CS₂

1975

ν_i, ν_{ij}

87: 108879d Vibrational anharmonicity of carbon disulfide molecules in solution. Sukarova, B. N.; Ribnikar, S. V. (Fac. Sci., Univ. Skopje, Skopje, Yugoslavia). *Glas. Hem. Tehol. Makedonija* 1975, 2(1-2), 11-21 (Eng). The IR and Raman spectra of a 1% CS₂ soln. in CCl₄ were analyzed. From 10 chosen transitions, the 3 zero-order frequencies and 7 anharmonicity consts. were derived. Comparison with the corresponding values of CS₂ in vapor and liq. states show that the soln. data take an intermediate position in most cases, indicating a real change of these consts. on dissoln. and liquefaction. The Fermi resonance const. does not seem to be appreciably affected by the changes of state.

C. A. 1977. 87 N 14

CS₂

1975

cur. no. cur.

87536q General anharmonic force constants of carbon disulfide. Suzuki, Isao (Educ. Comput. Cent., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1975, 48(6), 1685-90 (Eng). Twelve force consts. in the general quartic force field of CS₂ were detd. by a least-squares method from the available spectroscopic data on 4 isotopic species: ¹²C³²S₂, ¹³C³²S₂, ¹²C³²S³⁴S, and ¹³C³²S³⁴S. A reasonable set of force consts. is obtained together with a set of the 3rd order parameters λ_1 , λ_2 , λ_3 , and δ which appear in Fermi coupling off-diagonal matrix elements. From the converged set of force consts., *l*-type doubling consts. for a few π -vibrational states are calcd. through a direct numerical diagonalization method of vibrational Hamiltonian matrix. They agree well with the obsd. *l*-type doubling consts.

C. S. 1975. 83 N10

1975

 CS_2

11 Д154. Общие ангармонические силовые постоянные дисульфида углерода. Suzuki Isao. General anharmonic force constants of carbon disulfide. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1975, 48, № 6, 1685—1690 (англ.)

Сил. пост.

Из эксперим. данных для частот колебаний, постоянных ангармоничности и колебательно-вращательного взаимодействия и параметра резонанса Ферми четырех изотопич. разновидностей молекулы CS_2 методом наименьших квадратов вычислены квадратич., кубич. и квартичные силовые постоянные CS_2 , отнесенные к внутренним колебательным координатам. Связь между

ф. 1975 №11

величинами и знаками полученных силовых постоянных такая же, как и для CO_2 и OCS . Величины недиагональных постоянных по крайней мере на порядок меньше величин соответствующих диагональных силовых постоянных: все кубич. постоянные отрицательны, а квартичные постоянные положительны. Вычислены также ангармонич. силовые постоянные в нормальных координатах для CS_2 , $^{13}\text{CS}_2$, $\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ и $^{13}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$.

М. Р. Алиев

60315.1229

Ch, Ph, TC

92073 CS_2
 CO_2

1975

X 4-11803

Suzuki Isao. Anharmonic potential
functions of simple molecules. II. Di-
rect numerical diagonalization of
vibrational hamiltonian matrix and its
application to CO_2 and CS_2 . "Bull. Chem.
 Soc. Jap.", 1975, 48, N12, 3565-3572 (англ.)

U569

557 557

(сер. CO_2 , III) ВИННИТИ

XIV - 7018

CS_2

Liesel J.P
et al

1975

диссоциат. Я. Chem. Phys.,
приметание 1975, 62 n 5
Электронов

1936 - 40

(см. 5, III)

CS₂

XIV-7804

1976

1 Д505. Переход $^1\Sigma_g \rightarrow ^1B_2$ в кристаллическом сероуглероде. Bertinelli F., Brillante A., Chiodelli L., Taliani C. $A^1B_2 \leftarrow ^1\Sigma_g^+$ transition in crystalline carbon disulphide. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 1, 95—99 (англ.)

у. гр. спектр
показан

Получены УФ-спектры поглощения в области 300—350 нм, а также ИК-спектры поглощения в области 1400—1600 и 380—410 см⁻¹ ориентированных монокристаллов CS₂ в поляризованном свете при t-ре 9° К. В ИК-спектре зарегистрированы и интерпретированы давыдовские мультиплеты, соответствующие колебаниям ν_3 и ν_2 молекулы сероуглерода. В УФ-спектре обнаружена полоса поглощения с расстоянием между вибронными компонентами около 580 см⁻¹, что коррелирует с частотой колебания ν_1 в основном состоянии, равной 657 см⁻¹. Авторы относят зарегистрированную полосу поглощения к переходу из основного состояния $^1\Sigma_g^+$ в состояние 1B_2 , в котором молекула CS₂ имеет симметрию C_{2v}. Это отнесение подтверждается сравнением эксперим. отношения интенсивностей поглощения в двух поляризациях с рассчитанным из модели ориентированного газа. Библ. 10. Ю. М. Л.

(21)

Ф 1977 N1

CS₂

XIV-7807

1976

2 Б146. $A^1B_2 \leftarrow \Sigma_g^+$ -переход в кристаллическом дисульфиде углерода. Bertinelli F., Brillante A., Chiodelli L., Taliani C. $A^1B_2 \leftarrow \Sigma_g^+$ transition in crystalline carbon disulphide. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 1, 95—99 (англ.)

переход
($A^1B_2 \leftarrow \Sigma_g^+$)

Исследованы спектры поглощения в ИК- и УФ-областях поликрист. CS₂ и его монокристаллов, выращенных при медленной кристаллизации расплава между кварцевыми дисками. ИК-спектры исследованы при т-ре 9° К, а УФ — в интервале т-р 9—140° К. Использовано излучение, поляризованное в направлении главных осей ромбич. кристалла CS₂. Групповой анализ ИК-спектров показал наличие переходов $\Sigma_u^+ \rightarrow B_{2u}$ (1531,0 см⁻¹) и $\Sigma_u^+ \rightarrow B_{1u}$ (1523,1 см⁻¹) для валентных и $\Pi_u \rightarrow B_{1u}$ (393,7 см⁻¹), $\Pi_u \rightarrow B_{2u}$ (399,8 см⁻¹) и $\Pi_u \rightarrow B_{3u}$ (391,2 см⁻¹) для деф. колебаний. Электронные спектры крист. CS₂ в УФ-области сходны с таковыми для газо-

X 1944 N2

образного CS_2 , но отличаются большей диффузностью, обусловленной процессами колебательной релаксации. Отношение поляризации $f_b/f_c = 1,23$ и не зависит от T -ры в интервале $9-140^\circ \text{K}$. Полоса поглощения CS_2 в области $340-290 \text{ нм}$ отнесена к переходу $(^1\Delta_u)^1B_2 \leftarrow ^1\Sigma_g^+$.
В. Нешпор

льное
и зн:

*3-16557

1976

6 Д436. Измерения интенсивности и длин волн для систем полос $\text{CS}^+(\text{A}^2\Pi - \text{X}^2\Sigma^+)$ и $\text{CS}(\text{A}^1\Pi - \text{X}^1\Sigma^+)$, возбуждаемых в реакции метастабильных атомов $\text{He}(2^3\text{S})$ с CS_2 . Сохон J. A., Marcoux P. J., Setser D. W. Intensity and wavelength measurements for the $\text{CS}^+(\text{A}^2\Pi - \text{X}^2\Sigma^+)$ and $\text{CS}(\text{A}^1\Pi - \text{X}^1\Sigma^+)$ band systems excited by the reaction of metastable $\text{He}(2^3\text{S})$ with CS_2 . «Chem. Phys.», 1976, 17, № 4, 403—415 (англ.)

В спектральной области 200—1050 нм исследовано излучение, обусловленное реакцией метастабильных атомов гелия $\text{He}(2^3\text{S})$ с молекулами CS_2 . Обнаружены: интенсивные системы полос $\text{CS}^+(\text{A}^2\Pi - \text{X}^2\Sigma^+)$ и $\text{CS}(\text{A}^1\Pi - \text{X}^1\Sigma^+)$, слабые системы $\text{CS}_2(\text{A}^2\Pi_u - \text{X}^2\Pi_g)$, $\text{CS}_2^+(\text{B}^2\Sigma_4^+ - \text{X}^2\Pi_g)$, $\text{CS}(\text{a}^3\Pi - \text{X}^2\Sigma)$, несколько неидентифицированных переходов и атомное излучение (главным образом S^*) в вакуумной УФ-области спектра. В системе $\text{CS}^+(\text{A} - \text{X})$ наблюдались новые полосы, которые позволили уточнить спектроскопич. постоянные верхнего и нижнего состояний, участвующих в переходе. Необходимые для анализа результатов термодимич. константы молекулы CS и иона CS^+ по-

CS₂

CS

CS⁺

спектр,

до, днф

(45)

(3)

ф. 1977 № 6

лучены в результате критич. анализа имеющихся в ли-
 тературе данных. Авторы рекомендуют значения:
 $\Delta H_{f0}^0(\text{CS}) = (65,1 \pm 0,5)$ ккал/моль, $D_0^0(\text{CS}) = (170,2 \pm$
 $\pm 0,6)$ ккал/моль, $\Delta H_{f0}^0(\text{CS}^+) = (326,4 \pm 0,7)$ ккал/моль,
 $D_0^0(\text{CS}^+) = (147,8 \pm 0,9)$ ккал/моль и $D_0^0(\text{CS}^+, A^2\Pi_i) =$
 $= (115,9 \pm 0,9)$ ккал/моль. С использованием потенциала
 Морзе для состояния $\text{CS}^+(X)$ и потенциала РКР для
 $\text{CS}^+(A)$ рассчитаны коэф. Франка-Кондона системы
 $\text{CS}^+(A - X)$. Результаты расчета скомбинированы с
 измеренными интенсивностями полос этой системы и
 определены заселенности различных колебательных
 уровней состояния $\text{CS}^+(A)$. Используя измеренные
 интенсивности и рассчитанные с потенциалами РКР
 коэф. Франка-Кондона для системы полос $\text{CS}(A^1\Pi, v' =$
 $= 0 \div 4 - X^1\Sigma^+)$ проанализирована зависимость элек-
 тронного момента перехода от r центроида. Резуль-
 таты, касающиеся реакции $\text{He}(2^3S) + \text{CS}_2$, сравнены с
 полученными при исследовании фотоионизации CS_2 .
 Библи. 50.

В. С. Иванов

CS₂

1976

1 Д391. Индуцированные столкновениями спектр комбинационного рассеяния жидкого CS₂. Сох Т. И., Madden P. A. Collision induced Raman-spectra of liquid CS₂. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 11, 188—191 (англ.)

Получены спектры жидкого CS₂ в области запрещенных по симметрии полос $\nu_2(\Pi_u) = 327 \text{ см}^{-1}$ и $\nu_3(\Sigma_u^+) = 1151 \text{ см}^{-1}$. Их интенсивности составляют 1/32,2 и 1/98,6 от интенсивности разрешенного дублета 650 см^{-1} .

спектр
комбин.
рассеяния

Ф. 1977 № 1

а степени деполяризации $\sim 0,4$. Полосы имеют одинаковую форму с экспоненц. крыльями. Крутизна экспоненты равна $0,028$ см, что совпадает с результатом, полученным для индуцированного спектра в далекой ИК-области. Соответствующая величина для разрешенной полосы и для крыла релеевской линии составляет $0,045$ см. Для качеств. объяснения полученных результатов авторы привлекают выражения для индуцированных дипольного момента и поляризуемости, возникающих у молекулы в жидкости под влиянием межмолекулярных взаимодействий. Показано, что индуцированная интенсивность «запрещенных полос» определяется тензорами гиперполяризуемости 1-го порядка. Библ. 13.

М. В. Тонков

70222.9248

96601

1976

4908

Ch, Ph, TC, MGU

CS₂

Čermák V. Penning ionization electron spectroscopy of CO, HCl, HBr and of triatomic molecules N₂O, NO₂, CO₂, COS and CS₂. "J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.", 1976, 9, N 6, 419-439 (англ.)

(сч. с. 111)

0817

770 775 809

ВИНИТИ

*US - 13596

1976

CS₂

(μ)

84: 82078c Electric field-induced spectrum of carbon disulfide: excited state dipole moment. Dows, David A.; Jung, Hyun Chai (Dep. Chem., Univ. South. California, Los Angeles, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 59(2), 255-64 (Eng). The elec. field-induced spectrum (EFS) of CS₂ vapor was obsd. in a no. of vibronic bands in the 3300-3750 Å region of the $B_2 \leftarrow 1E_g^+$ electronic system. A detailed anal. of the $\Sigma 0^{+2}$ band at 241.8 cm⁻¹ has yielded the elec. dipole moment of the bent excited state of the transition as 0.7 ± 0.1 D. Consideration of the line shapes of the EFS lines in this band gives a confirmation of the value of A' near 4.3 cm⁻¹. The ratio of induced absorption intensities perpendicular and parallel to the applied field in various bands correlates with the band-type assignments of B. Klemens (1963).

C.A. 1976. 84w12

CS₂

ХС-13596

1976

11 Д384. Индуцированный электрическим полем спектр CS₂. Дипольный момент молекулы в возбужденном состоянии. Dows David A., Jung Hyun Chai. Electric field-induced spectrum of carbon disulfide: excited state dipole moment. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 2, 255—264 (англ.)

инд;
гасеетр.

Индуцированный электрич. полем спектр паров CS₂ в области полос R и S электронной системы $B_2 \rightarrow {}^1\Sigma_g^+$ (3300—3750 Å) исследован с разрешением 0,1—0,3 см⁻¹. В результате анализа полосы $\Sigma 0^s + 2$ (29241,8 см⁻¹) определен электрический дипольный момент молекулы в изогнутом возбужденном состоянии — (0,7 ± 0,1) ед. Дебая. Расчет дипольного момента молекулы CS₂ в состоянии 3A_2 с валентным углом 135° и дли-

ф. 1976 № 11

ной связи C—S, равной 1,64 Å, дает значение 0,83 ед. Дебая с локализацией отрицат. заряда диполя на углеродном атоме. По форме линий индуцированного поля спектра оценена константа $A' = 4,4 \div 4,6 \text{ см}^{-1}$, что согласуется с ранее полученным значением $4,3 \text{ см}^{-1}$. Отношение интенсивностей линий индуцированного поля спектра в параллельно и перпендикулярно полю поляризованном свете подтверждает ранее выполненную идентификацию типов полос. В спектральной области, где расположено состояние 3A_2 молекулы CS_2 , наложение поля не меняет спектра, что свидетельствует о линейной геометрии молекулы в этом возбужденном состоянии. Библ. 9

70215.4565

31603

1976

Ch, Ph, TC

CS₂

*

3-16851

Davis K.A., Overend John.

The rotational dependence of purely vibrational anharmonic resonances. "Spectrochim. acta", 1976, A32, N 9, 1571-1579.

(англ.)

0814 ББК

735 743 8 0 6

ВИНИТИ

*4-13594

1976

CS₂

84: 82081y Rydberg states of carbon dioxide and carbon disulfide. Greening, F. R.; King, G. W. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 59(2), 312-25 (Eng). The electronic absorption spectra of CO₂ and CS₂ were reexamd. Model potential calcs. were used to calc. the energies of excited states in the Rydberg approx. $(np\sigma)$ and $(np\pi)$ Rydberg series were assigned. For both mol. the lowest excited ${}^1\Pi_g$ and ${}^1\Pi_u$ states are identified as Rydberg states. The lowest ${}^1\Sigma_u^+$ state is mainly Rydberg for CO₂, but contains some valence character for CS₂. There is no evidence for transitions to addnl. valence states of these symmetries. LCAO/MO predictions about excited states can be misleading because of near-linear dependencies which arise in multicenter expansions. A consideration of the united atom orbitals for CO₂ and CS₂ predicts that there should be only the no. of low-energy excited states which are found from the spectral anal.

Rydberg.
состоян.(all. CO₂, 14)

C.A. 1976. 84 W12

C.S₂

1976

Чаркин О.П. и др.

Ж. шорт. хим. 1976
21, N 8, 2022-29.

(расчет
~~конт.~~ эл.
струк.)

(см BeF₂) III

60803.7510

96559

1976

Ch, TC, MGU

 CS_2 (ч.п.) x 4573944

Hubin-Franklin M.-J., Katihabwa
J., Collin J.E. Dissociative electron
attachment for the carbonyl sulphide mo-
lecule in the gas phase. Heat of formati-
on of the CS radical. "Int. J. Mass
Spectrom. and Ion Phys.", 1976, 20, N 2-
-3, 285-293 (англ.)

651 654 603 0671 ГИИ ВИНТИ

60318.1821

TC, Ph, Ch

CS₂ (F)

96201

1976

12-11844

Hubin-Franskin M.-J., Loch R., Kati-
habwa J. Dissociative ionization of ca-
rbon disulphide in the gas phase. Heat
of formation of the CS radical.

"Chem. Phys. Lett.", 1976, 37, N 3,

488-493 (англ.)

0582 ЛМК

547 548

5 7 4

ВИНИТИ

CS₂

1976

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

Chem. Phys. Lett., 1976,
41, N1, 123-4.

(unpubl.
preprint.)

(see N12) III

CS₂

(v. mex. p.)

1976²
Lindenberg J. et al.
Quart. Sci. Meth. and
Street. Tribute Per-Clor
Löwdin. New York-London
1976, 93-103

(acc. CB24; III)

CS₂

X45-12446

1976

8 Д846. Эмиссионный спектр газообразного сероуглерода, возбуждаемый N₂ лазером. Эффект тушения магнитным полем. Matsudaki Akiyoshi, Nakagura Saburo. The gas-phase emission spectrum of carbon disulfide excited by an N₂ laser-magnetic quenching effect. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1976, 49, № 2, 359—362 (англ.)

Эмиссионный спектр газообразного CS₂, возбуждаемый азотным лазером, исследован с временным разрешением в области т-р от -90 до +25°С. Спектр содержит 3 системы полос, одна из которых соответствует переходу из состояния ¹A₂. Для всех 3 полос определены времена жизни, в отсутствие столкновений и константы столкновительной дезактивации. Установлено, что флуоресценция из состояния ¹A₂ тушится магн. полем вследствие усиления внутримолекулярных процессов переноса энергии. Указано, что это первое наблюдение магн. тушения излучения из возбужденного синглетного состояния. Библ. 23.

И. Дворников

Ф. 1976. N 8.

CS₂

*4. 12446

1976

chemp
nengraH.

84: 128361v The gas-phase emission spectrum of carbon disulfide excited by a nitrogen laser-magnetic quenching effect. Matsuzaki, Akiyoshi; Nagakura, Saburo (Inst. Solid State Phys., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1976, 49(2), 359-62 (Eng). The time-resolved emission spectrum and its temp. dependence were obsd. with gaseous CS₂ excited by an N₂ laser. The spectrum consisted of 3 band systems, one of them being demonstrated to be emission from the ¹A₂ state. The collision-free lifetimes and the collisional quenching consts. were detd. for the 3 band systems. The emission from the ¹A₂ state was quenched by a magnetic field because of the enhancement of an intramol. energy-transfer process. This is the 1st observation of the magnetic quenching of emission from an excited singlet state.

C.A. 1976 84 N 18

CS₂

1976

15 Б164. Спектр излучения газообразного сероуглерода, возбужденного при помощи N₂ лазера. Эффект магнитного тушения. Matsuzaki Akiyoshi, Nagakura Saburo. The gas-phase emission spectrum of carbon disulfide excited by an N₂ laser-magnetic quenching effect. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1976, 49, № 2, 359—362 (англ.)

спектр
излучен

Измерена временная зависимость спектра излучения CS₂ в газовой фазе, возбужденного при помощи N₂ лазера $\nu \approx 29656$ см⁻¹, в области длин волн от 340 до 580 нм и диапазоне т-р от 25 до -90°. Выполнена идентификация спектра излучения, две полосы, состоящие из узких линий, отнесены к переходам из состояния ¹A₂ и состояния 8V, в то время как широкая полоса отнесена к переходам из состояния ¹B₂. Для семи полос, соотв-щих переходам из состояний ¹A₂, 8U и ¹B₂, измерены времена жизни в отсутствие соударений (от 2,9 до 17,0 мксек) и постоянные скорости тушения вследствие соударений (от $9,0 \cdot 10^{-10}$ до $1,7 \cdot 10^{-10}$ см³/молекулу). Впервые обнаружен и исследован на примере

4-12446

X, 1976, 15.

полосы 379,7 нм, отнесенной к переходу из состояния $(0, 5, 0)^1A_2$ к основному состоянию, эффект тушения излучения в магнитном поле. Установлено, что время жизни в отсутствие соударений при изменении магнитного поля от 0 до 12,6 кгс уменьшается от 4,1 до 2,2 мксек, в то время как постоянная тушения вследствие соударений остается неизменной ($5,6 \cdot 10^{-10}$ см³/молекул) в пределах эксперим. ошибки. Наблюдаемое магнитное тушение флуоресценции из синглетного состояния объясняется усилением внутримолек. безызлучательных процессов. Рассмотрено принципиальное отличие обнаруженного эффекта от известных эффектов магнитного тушения, ранее наблюдавшихся в иоде и двуокиси азота.

С. Н. Мурзин



*4 - 16855

1976

CS₂

12 Б1245. Термодинамические энергии ионизации и реакции перезарядки в бензоле и замещенных бензолах. Meot-Ner M., Field F. H. Thermodynamic ionization energies and charge transfer reactions in benzene and substituted benzenes. «Chem. Phys. Lett.». 1976, 44, № 3, 484—489 (англ.)

На масс-спектрометре с ионизацией электронным ударом при давл. 0,5—1,0 Омм изучены ионизационные равновесия типа $C_5H_5X^+ + C_6H_5Y \rightleftharpoons C_6H_5Y^+ + C_6H_5X$ в смесях замещ. бензолов, содержащихся в конц-ии 0,03—3% в среде CS₂. Время пребывания газовой смеси в ионном источнике равно 0,5 мсек, что соответствует 5000 столкновений иона с нейтр. молекулами, т. е. достижению равновесия. На основании т-рных зависимостей констант равновесия в диапазоне 450—600 К определены термодинамич. энергии ионизации (ТЭИ) 11 замещ. бензолов и CS₂ относительно бензола. Найденные значения разностей ТЭИ этих в-в и бензола сравниваются с известными из лит-ры соотв-щими разностями потенциалов ионизации (ПИ), измеренных ме-

термод.
энергии
ионизации

X. 1977. N12

тодами фотонионизац. масс-спектрометрии и фотоэлектронной спектроскопии. Показано, что разности ТЭИ обычно на 0,5—2,0 ккал/моль выше соотв-щих разностей ПИ, к-рые соответствуют О—О-переходу. Величины разностей ТЭИ оказываются ближе к разностям вертикальных, а не адиабатич. ПИ. Это показывает, что в ионах замещ. бензолов нек-рые колебания возбуждены сильнее аналогичных колебаний в соотв-щих нейтр. молекулах. Др. словами, ионизация замещ. бензолов снижает силовые постоянные нек-рых колебаний в большей степени, чем ионизация молекулы бензола. Изучена кинетика 4 экзотермич. р-ций перезарядки (экзотермичность 2,2—6,2 ккал/моль) при т-рах 400—600 К: $C_6H_6^+ + C_6H_5Cl \rightarrow C_6H_5Cl^+ + C_6H_6$; $C_6H_6^+ + C_6H_5CH_3 \rightarrow C_6H_5CH_3^+ + C_6H_6$; $C_6H_5Cl^+ + C_6H_5Br \rightarrow C_6H_5Br^+ + C_6H_5Cl$; $C_6H_5CN^+ + C_6H_6 \rightarrow C_6H_6^+ + C_6H_5CN$. Константы скорости этих р-ций не зависят от т-ры и равны (1,3—1,6) · 10⁻⁹ см³/молекула·сек, что соответствует частоте соударений с учетом нон-дипольного притяжения.

В. Е. Скурат

612 03. 3710
Ch, Ph, TC, MBU

4 0892

1976

CS_2

X 4-15604

Monahan K.M., Russell R.L., Walker
W.C.
Electronic transitions in CS_2 : a systematic assignment based on solid phase spectra.
"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 6, 2112-2115
(англ.)

0757. ГИИ

714 724

7 4 9

ВИНИТИ

CS₂

1976

CS
COM
COS

Р8006 М. А. и гр.

рук. ген. в ВУМВУ
№ 3685 - 76 ДЕТ.

(расчет
эл. смр.)

(эл. бет) III

CS₂

monoporus

1976

Ramsey D. A.

"Spectrosc. Excited

State" 1976, 47-83, New

York-London (amu)

некмп
некмп



(amu CO₂; III)

70301.8405

TC, Ph, Ch

30526GR

C.S₂ (confused)

1976

* 4-17130

Sandler Stanley I., Narten Alfred H.
X-ray diffraction study of liquid carbon
disulphide. "Mol. Phys.", 1976, 32,
N 6, 1543-1558 (англ.)

784 785

0821 ПМЖВИНИТИ

CS₂

X4-16657

1976

11 B1017. Разрешение по времени и частоте флуоресценции CS₂, возбуждаемой азотным лазером. Silvers Stuart J., McKeever Mark R. Time and frequency resolution of CS₂ fluorescence excited by a nitrogen laser. «Chem. Phys.», 1976, 18, № 3—4, 333—339 (англ.)

спектры
флуорес.

Зарегистрированы возбуждаемые лазером на N₂ спектры флуоресценции (Фл) паров CS₂ при различных давл. (0,001—1 мм) и т-рах (комнатная и —78°). Эти спектры состоят из резких регулярно чередующихся электронно-колебательных полос в области 3400—4100 Å и 2-й области нерегулярных полос, наложенных на континуум, в видимой области спектра. Т-рные зависимости спектра показывают, что полосы обусловлены возбуждением из состояния $v_2''=1$, а континуум — возбуждением из состояния $v_2''=2$. Кинетич. кривые затухания Фл в различных спектральных областях соответствуют 2 экспонентам с временами жизни 2,9 и 17 мсек для полос и континуума соотв. Предположено, что при лазерном облучении заселяются 2 различных вибронных уровня T¹A₂-состояния CS₂, причем эти уровни имеют различные излучательные характеристики. Обсуждается природа переходов в континууме. В. Е. Скурат

X.1977. N/11

CS₂

X4 - 16657

1976

6 Д828. Временное и частотное разрешение флуоресценции CS₂, возбуждаемой азотным лазером. Silvers Stuart J., McKeever Mark R. Time and frequency resolution of CS₂ fluorescence excited by a nitrogen laser. «Chem. Phys.», 1976, 18, № 3—4, 333—339 (англ.)

В спектре флуоресценции паров CS₂, возбуждаемом азотным лазером, обнаружены несколько прогрессий ν_2'' в близкой УФ-области и чувствительная к т-ре нерегулярная структура, наложенная на континуум, в видимой области. Установлено, что полосатая структура спектра обусловлена главным образом переходами с уровня $\nu''=1$, тогда как континуум — переходами с $\nu''=2$. Исследования флуоресценции во времени показали, что кривая распада двухкомпонентна. Короткоживущая флуоресценция (2,9 мксек) связана с полосами, а долгоживущая (17 мксек) — с континуумом. Сделано заключение, что при лазерном возбуждении заселяются 2 вибронных уровня состояния T^1A_2 , имеющие различные радиационные свойства. Обсуждены эти различия и высказаны предположения о возможной природе континуума. Библ. 17.

Структ.
спектра,
заселенной
уровней

ф. 1977
№ 6

CS₂

9 Д1012. Образование CS ($a^3\Pi$) при фотодиссоциации CS₂ в области длин волн меньше 1600 Å. Black G., Sharpless R. L., Slinger T. G. Production of CS ($a^3\Pi$) in the photodissociation of CS₂ below 1600 Å. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 5, 2113—2117 (англ.)

1977

фотодиссоциация

Фотодиссоциация молекул CS₂ с образованием излучающих фрагментов исследована в области длин волн 1050—2100 Å. Показано, что квантовый выход образования атомов S(¹S) мал ($\leq 0,1$) во всем исследованном спектральном интервале. В области длин волн 1250—1400 Å, с высоким квантовым выходом (близким к 1) образуются молекулы CS ($a^3\Pi$). Оценено радиационное время жизни состояния CS ($a^3\Pi$), $\tau = (16 \pm 3)$ мсек. Определены константы скорости тушения CS ($a^3\Pi$) при столкновениях с CS₂, NO, CO, O₂, H₂, CO₂, N₂, Ar и He. Полученные значения сравнены с данными по тушению Co($a^3\Pi$) теми же газами. Сделаны заключения о механизмах тушения. В частности, показана существенная роль диссоциативного тушения CO ($a^3\Pi$) при столкновении с H₂ и CO₂ и переноса энергии с образованием

(41)

CO ($a^3\Pi$)

образование при фотодиссоциации

р 1977 №9

N₂ ($A^3\Sigma_u^+$) при тушении CO ($a^3\Pi$) молекулами N₂.
Библ. 36. В. С. Иванов

✕

45-18225

CS₂

1977

Brion C.E., et al.

J. Electron Spectroscop.

and Relat. Phenom., 1977,

12, 11, 77-93.

показ.
энерг

(cur. CO₂; III)

CS₂

1977

Cederbaum L.S. et al.

протон.
спект.
(γ).

J. Phys. Atom. and Mol. Phys.,
1977, B10, N15, 549-553(англ)

ан. CO₂ - III

70519.1

40771

CS₂

1977

B, Ph, Ch, TC

кар. зам. присл. 45-18367

Dewar Michael J.S., Ford

George P. Ground states of molecules. 37.

MINDO/3 calculations of molecular vibration frequencies. "J. Amer. Chem. Soc.", 1977, 99, N 6, 1685-1691 (англ.)

0882 БМК

839 844

ВИНИТИ

70606.8756
Ch, Ph, TC, MGU

(термолуминес.)
CS₂

1977

X-18-18419

Fournier J., Lalo C., Deson J.,
Vermeil C.
Thermoluminescence following vuv photolysis
of OCS and CS₂ in an argon matrix.

"J.Chem.Phys.", 1977, 66, N 6, 2656-2659

(англ.)

0890 лнк

850 8574 8 1

ВИНИТИ

C. 3a

фото-
ионизация

(4) B

Л. Р. Р. В. В.

1977
18 B125 Д. Фотоионизационная спектроскопия высокого разрешения малых молекул. Gotchev Bontcho. Hochauflösende Photoionisationsresonanzspektroskopie an kleinen Molekülen. Diss., Dokt. Fachbereich Chem. Biol. Geowiss. Techn. Univ. München, 1977. 178 S., ill. (нем.)

Проведено исследование процессов фотоионизации молекул CO_2 , CS_2 , COS , N_2O и H_2CO методами электрон-ионных и электрон-фотонных совпадений с использованием энергоанализаторов и монохроматоров сверхвысокого разрешения и синхротронного излучения в качестве источника ионизирующих фотонов. Разрешена тонкая структура $\tilde{A}$ -состояния CO_2^+ , CS_2^+ и COS^+ , и $\tilde{X}$ -состояния CO_2^+ и N_2O^+ (эффект Реннера — Теллера). Из спектров электрон-ионных совпадений определены относит. вероятности различ. распадов $\text{CO}_2^+(\tilde{C})$, $\text{CS}_2^+(\tilde{C}, \tilde{D})$, $\text{COS}^+(\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C})$ и $\text{H}_2\text{CO}^+(\tilde{B})$. Определены времена жизни по отношению к испусканию колебат. состояний $\text{CO}_2^+\tilde{A}(^2\Pi_u, 000, 100, 200, 300)$, $\text{B}(\tilde{C}^2\Sigma_u^+, 000)$ и $\text{N}_2\text{O}^+\tilde{A}(^2\Sigma^+, 000, 100)$. Для состояния $\tilde{A}(100)\text{N}_2\text{O}^+$ определены времена жизни по отношению к испусканию и к диссоциации.

Е. Николаев

CS₂

1977

Li

12 Д143. Влияние межмолекулярного взаимодействия на антисимметричное валентное колебание молекулы CS₂. Jancsó Gábor, Van Hook Alexander. The effect of intermolecular interaction on the asymmetric stretching vibration of CS₂. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 48, № 3, 481—482 (англ.)

По изменению ¹²C—¹³C — изотопич. сдвига частоты ν_3 молекулы CS₂ при переходе из газообразной в жидкую фазу оценен вклад межмолекулярного взаимодействия в сдвиг частоты при конденсации (13 см⁻¹). Остальная

часть этого сдвига (14 см⁻¹) отнесена к «диэлектрич. поправке» внутреннего поля. М. Р. Алиев

Р. 1977, N 12

CS₂

Оттиски 5588

1977

2 Б190. Спектры комбинационного рассеяния и инфракрасные спектры CO₂ и CS₂ изолированных в матрице. Loewenschuss A., Givan A. Raman and infrared spectra of matrix isolated CO₂ and CS₂. «Spectrosc. Lett.», 1977, 10, № 7, 551—558 (англ.)

Измерены ИК- и КР-спектры CO₂ и CS₂ в криптоновой матрице при t-ре 20° K и разбавлении соотв. 1:500—2500 и 1:500—30 000. КР-спектры возбуждались Ar⁺(5145 Å) и Kr⁺(6471 Å) лазерами, ИК-спектры регистрировались в области выше 200 см⁻¹. В ИК-спектре CO₂ наблюдались полосы 2278,0; 2342,2; 660,2 см⁻¹ отнесенные к $\nu_3(^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2)$, $\nu_3(^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2)$, $\nu_2(^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2)$. В случае $\nu_3(^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2)$ и $\nu_2(^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2)$ наблюдались доп. малоинтенсивные полосы, обусловленные различными местами захвата молекул матрицей (соотв. 2344,0 и 662,6 см⁻¹). В спектре-КР обнаружены две полосы — 1382,0 см⁻¹, $\nu_1(^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2)$ и 1277,9 см⁻¹, $2\nu_2(^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2)$, (резонанс Фер-

(F1) 18

2, 1978, № 2

ми). В ИК-спектре CS_2 получены полосы 1522,3; 1520,5 см^{-1} — $\nu_3(^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2)$, разные места захвата, 1518,8 см^{-1} — $\nu_3(^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S})$, 1474,0 см^{-1} — $\nu_3(^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2)$, 396,5 см^{-1} — $\nu_2(^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2)$. В спектре-КР CS_2 наблюдались полосы 800,8 см^{-1} — $2\nu_2(^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2)$ (резонанс Ферми); 655,5; 646,5 см^{-1} — $\nu_1(^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S})$. Отмечается, что эффект проявления различных мест захвата наблюдается только в ИК-спектрах. Предполагается, что это может быть связано с изменением положения центра молекулы относительно центра ячейки замещения при активных в ИК-спектре колебаниях, в то время как при полносимметричных колебаниях, активных в спектре-КР, центральный атом не участвует в колебательном движении. Подобные эффекты были обнаружены ранее для нек-рых галогенидов цинка и ртути.

Д. М. Ковбг



CS₂

оттиск 5588

1977

1 Д433. Спектры ИК-поглощения и комбинационно-го рассеяния матрично-изолированных CO₂ и CS₂. Lowenschuss A., Givan A. Raman and infrared spectra of matrix isolated CO₂ and CS₂. «Spectrosc. Lett.», 1977, 10, № 7, 551—558 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения молекул CO₂ (I) и CS₂ (II) в криптоновой матрице при t-ре 20° K, а также спектры комб. рас. матрично-изолированных I и II при возбуждении лазерными линиями 647,1 и 514,5 нм. Отмечено изотопич. расщепление линий комб. рас. и ИК-полос I и II, а также расщепление ИК-полос I и II вследствие взаимодействия внедренных молекул с матрицей. Показано, что уменьшение значений частот полос фундаментальных колебаний I и II при переходе от газовой фазы к матрично-изолированным образцам не превышает 1%. Сделан вывод, что величины колебательных частот матрично-изолированных I и II могут быть использованы для определения значений констант силовых полей этих молекул.

И. В. А.

ν_i ; см. н.



Ф, 1978, №1

CS₂

ammuch 5457

1977

(Fe⁻)

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc.,

1977, 99, (17), 5557-70.

CS₂

Meot-Ner (Mautner) M.,
Field F. H.

1977

"J. Chem. Phys.", 1977, 66,
N 10, 4527-4531.

AH⁺

(corr. CO₂) III

CS₂

1977

7Б143. Инфракрасные полосы одновременных переходов в жидком сероуглероде. Marković Dušan M., Stojković Stojan R., Ribnikar Slobodan V. Simultaneous infrared bands in liquid carbon disulphide. «Гласник Хем. друшт. Београд», 1977, 42, № 6—7, 493—498 (сербскохорв.; рез. англ.)

В спектрах ИК-поглощения р-ров серы и белого фосфора в CS₂ обнаружен ряд линий (1980, 1743, 1668 и 1364 см⁻¹ для серы и 1970 см⁻¹ для фосфора), к-рые были отнесены к составным тонам с участием колебаний молекулы серы и фосфора и колебания ν_3 CS₂. Это подтверждается как анализом спектров, так и характером конц-ионной и т-рной зависимости интенсивностей линий. Составные тона проявляются также в спектре поглощения чистого CS₂ (комбинации $\nu_3 + \nu_1$ и $\nu_3 + \nu_2$).

А. В. Бобров

X, № 7, 1978

CS₂

номер 5680

1977

Messing Itzhak et al
"Chem. Phys." 1977, 25, №1,
УФ. номер 55-74 (англ.)

coll. CH₃I - III

CS₂

[omni 5309]

1977

Overend J.

Spectrochim. Acta, 1977,
33A, 311-14.

The relative dipole strengths
of the $00^{\circ}1 \rightarrow 10^{\circ}0$ and $00^{\circ}1 \rightarrow 02^{\circ}0$
laser transitions in CS₂ and Cl₂.

CS₂

Rylov M. A.

1977

кв. мех.

Zh. Fiz. Khim 1977,

расчет
электронн.
структур

51 (3) 770 (Russ)

(см Be F; III)

CS₂

1977

Schaeferberg P.

Z. Chem., 1977, 17, n 10,
388-389.

ракет
равн.
реш.

●
(см. HCl ; III)

CS₂

B9-XIV-9468

1974

14 B261. Колебательно-вращательные полосы ¹²CS₂ и ¹³CS₂ в области 2700—2900 см⁻¹. Walrand Jacques, Blanquet Ghislain, Courtoy Charles P. Bandes de vibration — rotation de ¹²C et ¹³CS₂:

région 2700—2900 cm⁻¹. «Ann. Soc. Sci. Bruxelles», 1977, Sér. I, 91, № 3, 145—178 (франц., рез. англ.)

М.Н.

На дифракц. спектрометре в области частот от 2700 до 2900 см⁻¹ с разрешением около 0,03 см⁻¹ исследована колебательно-вращательная структура 8 полос ¹³CS₂, 3 полос ¹²CS₂ и 1 полосы ¹³C³²S³⁴S. Идентифицировано свыше 750 линий. Для всех полос определены нулевые частоты, вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения. В основном колебательном состоянии ¹³CS₂ вращательная постоянная $B_0 = (10912,25 \pm 0,21) \cdot 10^{-5}$ см⁻¹ и постоянная центробежного искажения $D_0 = (1,160 \pm 0,012) \cdot 10^{-8}$ см⁻¹, что в целом хорошо согласуется с лит. данными. Для ¹³C³²S³⁴S в основном колебательном состоянии $B'' = (10588,5 \pm 1,2) \cdot 10^{-5}$ см⁻¹ и $D'' = (0,96 \pm 0,17) \cdot 10^{-8}$ см⁻¹.

С. Н. Мурзин

2, 1978, N 44

ВФ-ХIV-9468

1977

CS₂

7 Д502. Колебательно-вращательные полосы $^{12}\text{CS}_2$ и $^{13}\text{CS}_2$: область 2700—2900 cm^{-1} . Walrand Jacques, Blanquet Ghislain, Courtoy Charles P. Bandes de vibration—rotation de $^{12}\text{CS}_2$ et $^{13}\text{CS}_2$: région 2700—2900 cm^{-1} . «Ann. Soc. Sci. Bruxelles», 1977, Sér. 1, 91, № 3, 145—178 (франц.; рез. англ.)

С помощью спектрометра Жира с разрешением 0,03—0,05 cm^{-1} получены ИК-спектры поглощения (2700—2900 cm^{-1}) различных изотопных модификаций молекулы CS_2 в газовой фазе при давл. 5—20 мм рт. ст. и t -ре 0, 20 и 70° С. Зарегистрированы и интерпретированы колебательно-вращательные полосы поглощения, соответствующие переходам $20^0_1-00^0_0$, $21^1_1-01^1_0$, $30^0_1-10^0_0$, в молекуле $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$, $20^0_1-00^0_0$, $21^1_1-01^1_0$, $30^0_1-10^0_0$, $22^0_1-02^0_0$, $22^2_1-02^2_0$, $12^0_1-00^0_0$, $13^1_1-01^1_0$, $22^0_1-10^0_0$ в $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $20^0_1-00^0_0$ в $^{13}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$. Приведены таблицы частот зарегистрированных колебательно-вращательных линий (от 30 до 110 для различных переходов) с точностью 10^{-4} — 10^{-3} cm^{-1} . На основании опытных данных рассчитаны величины молекулярных постоянных для всех комбинирующих состояний. Рассчитанные константы воспроизводят эксперим. частоты со

М.Н.

Ф. 1978, № 7

стандартным отклонением 0,0008—0,003 см⁻¹. Библ. 17.
Ю. М. Л.



1977

BP- XIV-9468

CS₂

88: 160904t Vibration-rotation bands of carbon-12 disulfide and carbon-13 disulfide between 2700 and 2900 cm⁻¹. Walrand, Jacques; Blánquet, Ghislain; Courtoy, Charles P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Notre-Dame de la Paix, Namur, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1977, 91(3), 145-78 (Fr). The $2\nu_1 + \nu_3$ band of CS₂ and the $2\nu_1 + \nu_3$ and $\nu_1 + 2\nu_2^0 + \nu_3$ bands of ¹³CS₂ were recorded using a dual-grille spectrometer. The consts. β'' (10⁻⁵ cm⁻¹) and D'' (10⁻⁸ cm⁻¹) are 10590.3 ± 0.9 and 1.15 ± 0.14 , resp., for ¹³C³²S³⁴S.

M.M.

C.A., 1978, PL, N22

1977

CS₂

4 Д217 К. Молекулярная спектроскопия. Wojtkowiak Bruno, Chabanel Martial. Spectrochimie moleculaire. Paris, Techn. et docum., 1977. 310 p., ill. (франц.)

Изложены общие вопросы молекулярной спектроскопии и ее приложения к конкретным системам. Описаны методы расчетов колебаний молекул, определения внутренних и норм. координат и C-матрицы. Даны примеры расчетов колебаний CS₂ и H₂O. Изложены элементы теории групп, ее применение к решению колебательных задач. Квантовая теория колебаний молекул применена к определению правил отбора в спектрах комб. рас. и ИК-поглощения, здесь же рассмотрена поляризация комбинационного и релеевского рассеяния и резонанс Ферми. Определена связь структуры спектра со строением молекул. Описаны спектры углеводородов различного строения, спиртов, фенолов, эфиров, альдегидов и кетонов, а также их производных, содержащих атомы азота, серы, фосфора, кремния и галогены.

М. Тонков

Ласкин
Колебаний

(17) 

ф. 14, 1978

CS₂

1947

Земкина Г. Я. и др.

(4) "Оптика и спектроскопия"
1947, 42, № 6, 1080-1085

Сол. CH₃ I - III

CS_2

1978

Agren H. et al

экстр.
высечение

Phys. scr., 1978, 18, n 6,
499-505.



(ср. SF_6 ; III)

B9 - XIV - 9585

1978

C5₂

7 B251. Инфракрасные спектры высокого разрешения сероуглерода $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Полоса $\nu_1 + 2\nu_2^0 + \nu_3$. Blauquet Ghislain; Walrand Jacques, Courtoy Charles P. Spectres infrarouges à haute résolution du disulfure de carbone $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ la bande $\nu_1 + 2\nu_2^0 + \nu_3$. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1978, Ser. 1, 92, № 3, 205—221 (франц.; рез. англ.)

Исследована с высоким разрешением ($\sim 0,03 \text{ см}^{-1}$) полоса перехода 12^01-00^00 ($2840-2965 \text{ см}^{-1}$) в ИК-спектре поглощения газ. $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Выделены также полосы «горячих» переходов 13^11-01^10 и 22^01-10^00 . Отнесение полос проконтролировано расчетом частот соотв-щих переходов. На основе интерпретации спектра в области полосы 12^01 уточнено отнесение полос переходов 12^01-02^00 и 22^01-02^00 $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. В спектре проявляются также переходы 12^01-00^00 $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$.

А. В. Бобров

X. 1979, N 4

CS₂

commun 6876

1978

89: 137884y Vibration-rotation bands of isotopic carbon disulfide at 4.6 μm . Blanquet, Ghislain; Walrand, Jacques;

encl
Courtoy, Charles P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame de la Paix, Namur, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 72(2), 227-37 (Eng). The 10⁰1-00⁰0 bands of ¹²C³⁴S₂ and ¹³C³⁴S₂ were measured with a resoln. of 0.03 cm⁻¹. The following hot bands assocd. with this transition were also measured and analyzed: 11¹1-01¹0, 20⁰1-10⁰0 for both isotopic forms. For ¹²C³⁴S₂, the Δ - Δ transition 12²1-02²0 was also obsd. In addn., the 10⁰1-00⁰0 bands of the isotopic species ¹²C³²S³⁴S and ¹²C³³S³⁴S were measured.

C.A., 1978, 29, N16

Оттиск 68.76

1978

CS₂

3 Б258. Колебательно-вращательные полосы изотопного сероуглерода в области 4,6 мкм. Blanquet Ghislain, Walrand Jacques, Courtoy Charles P. Vibration—rotation bands of isotopic carbon disulfide at 4,6 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 2, 227—237 (англ.)

М, П

Изучен ИК-спектр высокого разрешения ($0,03 \text{ см}^{-1}$) образца сероуглерода, обогащенного изотопом ^{34}S до 91,9% в области 2077—2186 см^{-1} (полосы $\nu_1 + \nu_3$ и соотв-щие «горячие» переходы). Измерено большое число вращательных линий, отнесенных к переходам $10^0 1 - 00^0 0$; $11^1 1 - 01^1 0$; $20^0 1 - 10^0 0$ и $12^2 1 - 02^2 0$ молекулы $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$; $10^0 1 - 00^0 0$; $11^1 1 - 01^1 0$ и $20^0 1 - 10^0 0$ молеку-

лы $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$; $10^0 1 - 00^0 0 - ^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ и $10^0 1 - 00^0 0 - ^{12}\text{C}^{33}\text{S}^{34}\text{S}$. Определен ряд молек. постоянных, в том числе для основного состояния $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$, $B_0 = (10\,270,28 \pm \pm 0,45) \times 10^{-5}$; $D_0 = (0,95 \pm 0,03) \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$; для $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$, $B_0 = (10\,272,28 \pm 0,66) \times 10^{-5}$, $D_0 = (1,00 \pm 0,08) \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$; для $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$, $B_0 = (10\,589,49 \pm 0,59) \times 10^{-5}$, $D_0 = (0,92 \pm \pm 0,06) \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$.

Л. В. Серебренников

2. 1979, N3

CS₂

оттиск 6876

1978

2 Д412. Колебательно-вращательные полосы изотопов CS₂ в области 4,6 мк. Blanquet Ghislain, Wafrand Jacques, Courtoy Charles P. Vibration-rotation bands of isotopic carbon disulfide at 4.6 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 72, № 2, 227—237 (англ.)

М.Н. Д.

Исследованы ИК-спектры молекул ¹²C³⁴S₂ и ¹³C³⁴S₂ в области 4,6 мк с разрешением 0,03 см⁻¹. Проанализированы полосы 10⁰1—00⁰0, 11¹1—01¹0, 20⁰1—10⁰1. Для ¹²C³⁴S₂ наблюдался Δ — Δ -переход 12²1—02²0. Кроме того, получены спектры переходов 10⁰1—00⁰0 в ¹²C³²S³⁴S и ¹²C³³S³⁴S. Библ. 11.

Р. 1979.2

CS₂

1978

Carney Brady D., et al.

Adv. Chem. Phys. Vol. 34.
New York e.a., 1978, 305-79.

колебаний
- вращений.
спектроск.
исследования.

сст. H₂S - III

CS₂

1978

Dance Donald F, et al.
J. Chem. Soc. Faraday
Trans 1978, Part 2, 74,
N2, 440-4

(Ei)

cm. CS-III

CS₂

1978

1) 7 Б105. Масс-спектрометрическое исследование неорганических газов и паров методом фотоионизации. Drowart J., Smets J., Reynaert J. C., Corpens P. Mass spectrometric study of the photo-ionization of inorganic gases and vapours. «Adv. Mass. Spectrom. Vol. 7A. Proc. 7th Int. Mass Spectrom. Conf., Florence, 1976». London, 1978, 647—650 (англ.)

у, до

Фотоионизация и диссоциативная фотоионизация молекул CS₂ (I), CSe₂ (II), CS (III), GeS (IV) и As₂ (V) исследованы в диапазонах ~~1250—580;~~ ~~1350—580;~~ 1100—580 1270—580; и 1350—580 Å, соотв. Получены кривые эффективности ионизации и потенциалы ионизации (ПИ) основных и возбужденных состояний молекул. Для I в основном состоянии ПИ равны 10,074 ($\tilde{X}^1\Pi_{g3/2}$) и 10,131 ($\tilde{X}^2\Pi_{g1/2}$) и в возбужденных состояниях 14,480 ($\tilde{B}^2\Sigma^+$) и 16,184 ($\tilde{C}^2\Sigma_g^+$) (здесь и далее все значения энергий в эВ). Пороги фрагментации I на S⁺ и CS⁺ получены при 14,80 и 15,75. Фрагментация с образованием пар CS⁺ и S⁻ начинается при

(44) ☒

х. 1980. № 7

13,64. Энергия диссоциации связи (D) в I получена равной 7,39. Для П значения ПИ равны 9,26 ($X^2\Pi_{3/2}$) и 9,52 ($\tilde{X}^2\Pi_{1/2}$). Пороги образования осколочных ионов Se^+ , CSe^+ и Se_2^+ равны соотв. 13,38; 14,37 и 15,21. Значения $D(Se-CSe)$ и $(C-Se_2)$ вычислены равными 3,69 и 6,39 соотв. Значения вертикальных ПИ для IV получены равными 10,18 ($^2\Pi$) и 10,35 ($^2\Sigma^+$), величина адиабатического ПИ оценена в 9,98. Порог образования Ge^+ равен 13,51; значение $D(Ge-S) \leq 5,73$. Верхняя граница адиабатического ПИ для V лежит при 9,34, пороги появления P_3^+ и P_2^+ ионов при 12,54 и 12,85, соответственно; $D_0(P_2-P_2) = 2,38$. М. Туркина

1978

89: 80506v Mass spectrometric study of the photo-ionization of inorganic gases and vapors. Drowart, J.; Smets, J.; Reynaert, J. C.; Coppens, P. (Lab. Fys. Chem., Vrije Univ. Brussel, Brussels, Belg.). *Adv. Mass Spectrom.* 1978, 7A, 647-50 (Eng). The ionization potentials for CS₂, CS, S₂, CSe, GeS, P₄, and P₃, and the dissociation energies (D_0°) of CS, CSe₂, GeS, and P₄, and the threshold energies for the formation of various fragment ions from CS₂, CSe₂, GeS, and P₄ were obtained from mass-spectrometric studies of the various photoionization and photolysis processes.

CS₂
CS
S₂ GeS
CSe₂, P₃, P₄
u gp P₂
(I, D₀)
(H₂)

C.A. 1978, 29, N10

CS₂

оттиск 7570

1978

4 Д776. Флуоресценция молекул CS₂ возбужденных в третье синглетное состояние. Haga Kiyoaki, Phillips David. Fluorescence of CS₂ excited to the third excited singlet state. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, 74, № 8, 1441—1445 (англ.)

В области 220—360 нм получен спектр флуоресценции газообразных молекул CS₂ при комнатной т-ре. Спектр возбуждался излучением дейтериевого источника ($\lambda = 200—220$ нм). Давление CS₂ составляло 18,6 мм рт. ст. Отсутствие структуры широкой полосы флуоресценции с максимумом ~ 270 нм приписано резкому изменению формы молекулы при возбуждении (из линейной она становится изогнутой). Определен квантовый выход флуоресценции при возбуждении излучением 215,7 нм: $(9+2) \cdot 10^{-4}$. Показано, что при давл. CS₂ ~ 20 мм рт. ст. вероятность столкновительной дезактивации возбужденных частиц мала. Кроме того, квантовый выход флуоресценции падает с ростом энергии возбуждения, что свидетельствует о влиянии фотодиссоциации на исследованный процесс. Библ. 20.

спектр
флуоресц.

фр. 1979, N4

1948

CS₂
OCS
SO₂

Зв. удар

(+2) ⊗

6 Д319. Возбуждение электронным ударом низлежащих электронных состояний в CS₂, OCS и SO₂. Flicker Wayne M., Mosher-Oren A., Kupfermann Aron. Electron-impact excitation of low-lying electronic states in CS₂, OCS, and SO₂. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 9, 3910—3916 (англ.)

При углах рассеяния 40°, 50° и 60° измерены спектры неупругих потерь энергии электронов с энергией 25, 40 и 70 эв, сталкивающихся с молекулами CS₂, и электронов с энергией 30 и 55 эв, сталкивающихся с OCS и SO₂. Для переходов между синглетными и триплетными состояниями в спектре неупругих потерь энергии обнаружены пики при энергии перехода 3,36 эв для CS₂, 4,94 эв для OCS и 3,40 эв для SO₂ соответственно. Показано, что особенность в спектре неупругих потерь при энергии 3,65 эв для столкновений электронов с молекулой CS₂ имеет также синглет-триплет-

ф. 1949, N 6

ный характер. Были исследованы также разрешенные электронные переходы в молекуле SO_2 . Однако авторам не удалось обнаружить переходов в 1^3A_2 - и 1^3B_2 -состояния молекулы SO_2 , которые были обнаружены при изучении фотопоглощения SO_2 в твердой фазе и должны бы наблюдаться вблизи хорошо известного $\bar{a}^3B_1$ -состояния.

В. С.



1978

CS_2
 OCS (ne)
 CO_2 (ne)
 N_2O (ne)
 (vi)

89: 120020r Study of vibrational spectra of simple molecules in the liquid phase. I. Fundamental bands of carbon disulfide, carbon oxide sulfide, carbon dioxide, and nitrous oxide. Iogansen, A. V.; Rassadin, B. V.; Romantsova, G. I.; Grushina, N. M. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1978, 44(6), 1104-12 (Russ). The frequencies and widths of the fundamental IR bands ν_3 of CS_2 , OCS , CO_2 , and N_2O , and also the IR ν_2 , Raman ν_1 band, and some isotopic bands of CS_2 were measured in 33 different liqs. The pattern of shifts and broadening of vibrational bands in the solns. is discussed, and the resonance character of the anomalous broadening of the strong IR band ν_3 of pure CS_2 is demonstrated.

A. Fucs

(+3)



C.A., 1978, 89, N44

ommueu 6816

1978

CS₂

CS₂⁺

89: 188501g Rydberg series of carbon disulfide converging to $\tilde{A}^2\Pi_u$ states of carbon disulfide(+). Larzilliere, M.; Damany, N. (CNRS, Saint-Etienne, Fr.). *Can. J. Phys.* 1978, 56(9), 1150-6 (Eng). The absorption spectrum of CS₂ was photographed at high resolu. at 95-112 nm. Four series consisting of 6 vibrational series converging to $\tilde{A}^2\Pi_{3/2}$ and $\tilde{A}^2\Pi_{1/2}$ states of CS₂⁺ were investigated. Quantum defects of these, and of other known series, are discussed.

check

normalcy

(+1)



C.A. 1978, 82, Vol 2

1978

CS₂спектр
флуоресц.

✓ 9 Д826. Исследование дискретного и непрерывного спектров флуоресценции молекул CS₂ методом разрешенной во времени лазерной спектроскопии. Silvers S. J., McKeever M. R., Chawla G. K. Time and frequency resolved laser studies on CS₂ discrete and continuum fluorescence. «Adv. Laser Chem. Proc. Conf., Pasadena, 1978». Berlin e. a., 1978, 449—454 (англ.)

. В области 335—500 нм получены спектры флуоресценции газообразных молекул CS₂ при т-рах 293 и 195° К. Спектры возбуждались излучением N₂-лазера (337,1 нм). Присутствие в спектрах дискретной и непрерывной компонент отнесено к переходам в системе $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow T^1A_2$, $v''=1$ и 2 соответственно. Получена необычно большая для синглетных состояний величина g -фактора, характеризующая эффект Ханле в CS₂, что указывает на синглетное взаимодействие состояния T с другими электронными состояниями. Отмечено, что

Ф. 1979. № 9

происхождение непрерывной составляющей не может быть обусловлено только прямыми переходами в диссоциативный континуум, а, по-видимому, связано с процессами внутримолекулярной релаксации в CS_2 . Исследование кинетики затухания флуоресценции позволило установить ее двухкомпонентный характер: $\tau_1 = 17$ мксек (коррелирует с континуумом) и $\tau_2 = 3,4$ мксек (коррелирует с дискретной составляющей).

М. Т.

C52

jaer
fabrik
Korrespondenz

~~nummer~~ 6773

1978.

Schaeferfenberg P.

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

CS₂

оттиск 6382

1978

12 Д240. Корреляционная функция дипольного момента для полосы ν_3 молекулы CS₂. Zerd a T. W. Dipole moment correlation function of ν_3 band of CS₂. «Acta phys. pol.», 1978, A54, № 1, 47—53 (англ.)

С учетом колебательно-вращательного взаимодействия и вклада «горячих» и изотопич. полос вычислена автокорреляционная ф-ция дипольного момента $G(t)$ для ИК-полосы ν_3 молекулы CS₂. Эта же ф-ция определена по эксперим. контуру полосы ν_3 CS₂ в газовой фазе. Получено удовлетворительное согласие между теоретич. и эксперим. значениями $G(t)$.

М. Р. Алиев

Корреляционная
функция
дипольного
момента

ар. 1978, N12

CS₂

1979

Ashfold et al. N.R., et al.

обзор:
применения
спектроscopy

Top. Curr. Chem. 1979,
86, 1-90.

см. H₂O - III

CS₂

1940

11 Д1090. Масс-спектрометрическое исследование фотоионизации CS₂ в интервале длин волн 125—60 нм. Correns Paul, Reynaert Jean Claude, Drowart Jean. Mass spectrometric study of the photoionization of carbon disulphide in the wavelength interval 125-60 nm. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 2, 292—301 (англ.)

(Do)

Кривые эффективности фотоионизации молекул CS₂ с образованием молекулярных и осколочных ионов (CS₂⁺, CS⁺, S⁺, S₂⁺) получены в области 125—60 нм с разрешением 0,1—0,2 нм. Обсуждена структура, наблюдаемая на кривых эффективности фотоионизации. По измеренным потенциалам появления осколочных ионов определены: энергии диссоциации $D^0(\text{S-CS, OK}) = (432 \pm 2,0)$ кДж/моль и $D^0(\text{CS, OK}) = (712 \pm 2,3)$ кДж/моль, энтальпия образования CS, $\Delta H_f^0(\text{CS, OK}) = (273,9 \pm 2,2)$ кДж/моль и потенциал ионизации S₂, $I_p(\text{S}_2) = (9,38 \pm 0,03)$ эв. Полученные значения сопоставлены с имеющимися в литературе. Библ. 14.

42 CS(ΔH; Do)

14

В. С. Иванов

Ф. 1949/11

CS₂

1949

11 Д1090. Масс-спектрометрическое исследование фотоионизации CS₂ в интервале длин волн 125—60 нм. Correns Paul, Reynaert Jean Claude, Drowart Jean. Mass spectrometric study of the photoionization of carbon disulphide in the wavelength interval 125-60 nm. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, Part 2, 75, № 2, 292—301 (англ.)

Кривые эффективности фотоионизации молекул CS₂ с образованием молекулярных и осколочных ионов (CS₂⁺, CS⁺, S⁺, S₂⁺) получены в области 125—60 нм с разрешением 0,1—0,2 нм. Обсуждена структура, наблюдаемая на кривых эффективности фотоионизации. По измеренным потенциалам появления осколочных ионов определены: энергии диссоциации $D^0(\text{S—CS, OK}) = (432 \pm 2,0)$ кдж/моль и $D^0(\text{CS, OK}) = (712 \pm 2,3)$ кдж/моль, энтальпия образования CS, $\Delta H_f^0(\text{CS, OK}) = (273,9 \pm 2,2)$ кдж/моль и потенциал ионизации S₂, $I_p(\text{S}_2) = (9,38 \pm 0,03)$ эв. Полученные значения сопоставлены с имеющимися в литературе. Библ. 14.

В. С. Иванов

фото-
ионизация

Do

□

Ф. 1949/11

CS₂
(ж)

21

х. 1980,
N 11

11 Б205. Характеристики жидкого CS₂ по данным разрешенных спектров рассеяния света. Cox T. I., Battaglia M. R., Madden P. A. Properties of liquid CS₂ from the allowed light scattering spectra. «Mol. Phys.», 1979, 38, № 5, 1539—1554 (англ.)

Исследована т-рая ($T=163-310$ K) зависимость интенсивности и формы контуров деполяризованной компоненты линии Релея ($\lambda=5145$ Å) и полосы ν_1 спектра КР жидк. CS₂. Оценены характерные времена переориентаций молекул. Полученные величины хорошо согласуются с данными исследования спектров ЯМР и результатами теор. оценок времен релаксации в рамках гидродинамич. модели вращательной диффузии. Показано, что во всем изученном диапазоне т-р выполняется соотношение Хэббарда. По величине отношения интенсивностей деполяризованных компонент в релеевском спектре и спектре КР определено значение параметра, определяющего корреляцию ориентаций молекул. Оказалось, что корреляция угловых скоростей молекул в CS₂ мала. Характерное время дефазировки колебаний при этом не зависит от т-ры. Это связано со вкладом индуцированного столкновениями рассеяния, зависящего от флуктуаций плотности. В этом случае при малых длинах волн может наблюдаться отмеченное выше отклонение от гидродинамич. теории. А. В. Бобров

1979

Фшц 413

Диттиса 8552

1979

CS₂
COS

2 Б140. Диссоциативная фотоионизация сернистого углерода и сернистого карбонила. El and J. H. D., Berkowitz J. Dissociative photoionization of carbon disulphide and carbonyl sulphide. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 11, p. 5151—1556 (англ.)

Измерены фотоионизационные масс-спектры высокого разрешения (0.14 Å) сернистого углерода (CS₂) и сернистого карбонила (COS). Получены масс-спектры ионов

диссоциатив.
фотоионизация,



x1980.N2

CS_2^+ , CS^+ , S^+ , S_2^+ и COS^+ , CS^+ , CO^+ для CS_2 и COS , соотв., в диапазоне длин волн 650—950 Å. Показано, что ионы S^+/CS_2 , S^+/COS и CS^+/CS_2 появляются при энергиях фотовозбуждения, близких к термодим. энергии образования соотв-щих ионов. Обнаружено, что ион S_2^+/CS_2 при облучении с длиной волны больше ~735 Å образуется в результате бимолек. р-ции с участием возбужденного состояния CS_2 (B). Идентифицировано пять новых ридберговских серий для COS . Проведено эмпирич. исследование формы линии спектров с помощью ф-лы Фано и показано, что она различна для разных каналов фотодиссоциации. Проведено сопоставление с лит. данными.

О. А. Басченко

CS₂

1979

Ebata Takayuki; et al.

"Bull. Chem. Soc. Jap." 1979,
52, N11, 3226-8

соедин.
раств.
скалов
фторидов.
фторидов.

сер. CS - III

CS₂

(number 9706)

1979

Goud, S. Lacha, et al

Proc. Indian Acad. Sci.,
Sect. A 1979, 88A (Pt. 1, No 6),
453-5

curr. no. 1.
Ji

9706-111

curr. CD₂ - 111

1979

CS₂
 22 Б263. Разностная полоса $\nu_1-\nu_2$ $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$. Jol-
 ma K., Kauppinen J., Anttila R. The difference
 band $\nu_1-\nu_2$ of $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$. «J. Chem. Phys.», 1979, 70,
 № 4, 2033—2034 (англ.)

С высоким разрешением ($\sim 0,010 \text{ см}^{-1}$) измерена
 вращательная структура полосы $\nu_1-\nu_2$ в ИК-спектре
 поглощения молекулы сероуглерода в области 260 см^{-1}
 ($l=3 \text{ м}$, $p=8,5 \text{ мм}$). Приведены положения и отнесения
 линий P, Q и R-ветвей вращательной структуры. Ана-
 лиз структуры спектра с целью получения молек. по-
 стоянных выполнен отдельно для Q-ветви и ветвей P
 и R. Получены след. значения молек. постоянных
 $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ (в см^{-1}): P и R-ветви — $\nu_0=261,9014$, $B''=$
 $=B_{01c} l_0=0,1093015$, $B'=B_{10} O_0=0,1089716$, $B'-B''=$
 $=-3,2995 \times 10^{-4}$, $D''=D_{01c} l_0=1,188 \times 10^{-8}$, $D'-D''=$
 $=-17 \times 10^{-12}$; Q-ветвь $\nu_0=261,9012$ — $B'-B''=-4,0689 \times$
 $\times 10^{-4}$, $D'-D''=31 \times 10^{-12}$; константа l-удвоения
 $g_{01} l_0=7,694$. В. М. Ковба

Х. 1979, № 22

CS₂

1979

11 Д522. Разностная полоса $\nu_1-\nu_2$ ¹²C³²S₂. Jol-
ma K., Kauppinen J., Anttila R. The difference
band $\nu_1-\nu_2$ of ¹²C³²S₂. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 4,
2033—2034 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения паров сероугле-
рода в области 240—280 см⁻¹ при давл. 8,5 мм рт. ст.
с разрешением 0,01 см⁻¹. Наблюдаемые линии отнесены
к колебательно-вращательным переходам в разностной
полосе $\nu_1-\nu_2$. Разрешено значительное число линий
ветви Q. Приведены частоты линий для ветвей P и R
с J от 5 до 69 и Q от 10 до 86. Определены колеба-
тельная частота и вращательные постоянные B и D в
начальном и конечном состоянии, а также константа
l-удвоения для состояния 01¹0. Отмечается расхожде-
ние с литературными данными. Библ. 6. М. Тонков.

спектр

ИК-поглощ.

Ф.1579, N11

1979

CS₂

90: 177469u The difference band $\nu_1 - \nu_2$ of carbon-12 disulfide (sulfur-32). Jolma, K.; Kauppinen, J.; Anttila, R. (Dep. Phys., Univ. Oulu, Oulu, Finland). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(4), 2033-4 (Eng). The difference band $\nu_1 - \nu_2$ of ¹²C³²S₂ around 260 cm⁻¹ was recorded at a resolu. of 0.010 cm⁻¹. The Q(J) lines are well resolved from J = 10 onward. The lines from the P and R branches were fitted to a 4th order polynomial of m and those from the Q branch to a 2nd order polynomial of J(J + 1). Mol. consts. assocd. with the difference band are given.

(ν₁ - ν₂)

C.A. 1979, 90, N22

оттиски 8158

1073

CS₂

24 Б139. Штарковская модуляция в системе $\tilde{a}^3A_2-X^1\Sigma_g^+$ молекулы CS₂. Larzillière M. Stark modulation in the $\tilde{a}^3A_2-X^1\Sigma_g^+$ system of CS₂. «Chem. Phys.», 1979, 40, № 3, 337—343 (англ.)

штарковская
модуляция
в системе

Экспериментально изучены спектры со штарковской модуляцией в области 3400—3800 Å, отвечающие системе переходов $\tilde{a}^3A_2-X^1\Sigma_g^+$ молекулы ¹²C³²S₂. Наиболее существенный из обнаруженных эффектов обусловлен квантовым вырождением пар вращательных уровней типа J, J и (J—1)₁, (J—1)₀ с нечетными значениями J в коле-

бательных состояниях 040; 140; 050; 060; 070 и C— верхнего электронного состояния. Определен дипольный момент колебательных состояний; обнаружена его сильная зависимость от колебательных состояний. Высказано предположение, что колебательные состояния 080 и 090 возмущены неидентифицированным П-уровнем.

Б. И. Жилинский

2. 1979, 124

1978

 CS_2

(2 di)

Приведены результаты исследования влияния электр. поля напряженностью 17 кВ/см, модулированного с частотой 400 гц, на спектр поглощения газовой смеси $\text{CS}_2 + \text{SF}_6$ в области 340—380 нм. Установлено, что влиянию поля подвержены почти вырожденные пары вращательных уровней типа $J_{0,J}$ и $J-1_{J,J-1}$ колебательных состояний 040; 140; 050; 060; 070 и 080 молекулы $\text{CS}_2(a^3A_2)$. Определены значения дипольного момента молекулы $\text{CS}_2(a^3A_2)$, которые существенно отличаются для различных колебательных уровней этого состояния.

М. Т.

CP. 1549, N12

CS₂

1979

Murray P., et al.

geom. &
energies

Int. J. Mass Spectrom
and Ion Phys., 1979,
30 (2), 165 - 174.

(see NO; III)

CS₂

1979

сценар
гипотезы

93: 83979v Emission spectra of carbon disulfide excited to second excited singlet state (1B_2). Matsuzaki, Akiyoshi; Nakamura, Ryoji; Ito, Tomizo (Inst. Space Aeronaut. Sci., Tokyo Univ., Tokyo, Japan). *Koen Yoshishu - Bunshi Kozo Sogo Toronkai* 1979, 72-3 (Japan). Chem. Soc. Japan: Tokyo, Japan. Anal. of the fluorescence spectrum of CS₂ excited to its 2nd excited singlet state (1B_2) using the 325.0-nm line of a He-Cd laser revealed a sharp band assignable to the $^1B_2 \rightarrow ^1\Sigma_g^+$ transition overlapped with the normally obsd. broad band.

CA 1980 23 ~ 8

CS₂

[ommuca 8737]

1979

Ohwada Ken.

Chem. Phys. Lett., 1979,
66, N1, 149-53.

сш. носш.
фшршш.

сш. CO₂ - III

CS₂

SO₂

NO₂

S₂

спектр
испускания

1979

12 Б1320. Измерения испускания света в CS₂, SO₂ и NO₂, нагретых в ударной волне. Saito Ko, Higashihara Tetsuo, Nakamura Yasuro, Murakami Ichiro. Measurements of light emission from Shock-Heated CS₂, SO₂, and NO₂. «J. Sci. Hiroshima Univ.», (1979, A43, № 2, 119—133 (англ.)

Исследована зависимость интенсивности испускания I от T -ры в видимой и УФ-областях в CS₂ (I), SO₂ (II), NO₂ (III), нагретых до T -р 2500—5000, 3000—8000 и ~~1900—4500~~ °K соотв. в ударной волне. При нагревании смесей 1,7—10% I в Ar наблюдалась линейная зависимость $\lg I$ от $1/T$ (λ 400—700, 330 и 300 нм) при T -ре до 3500°K (эффективная энергия активации $E_{эф}$ составляла 57—65 ккал/моль при λ 400—700 нм и 50 ккал/моль при 330 нм), при более высоких T -рах наблюдалось отклонение от линейности. В смесях 5% II в Ar (λ 350 и 434 нм) линейная зависимость $\lg I$ от $1/T$ имела место до 4000°K ($E_{эф}$ 82 и 70 ккал/моль при 350 и 434 нм соотв.), с последующим отклонением от ней-

(+3) X

Р. 1980 N12

ности при более высоких т-рах. В смесях 5% III в Ag арреннусовская зависимость имела место до 2400°K ($E_{\text{эф}}=40$ ккал/моль при 600 нм). При более высоких т-рах наблюдалось резкое отклонение от линейности. Показано, что испускание связано с состояниями a^3A_2 , A^1B_1 и A^2B_1 для молекул I, II и III соотв. При более высоких т-рах на испускание влияет диссоциация возбужденных молекул. На примере смеси 2% I в Ag изучали испускание вблизи предела диссоциации. Показано, что т-рные зависимости при λ 300 и 330 нм и при λ 400 нм отличаются. При высоких т-рах не наблюдается отклонения от линейности зависимости $\lg I$ от $1/T$. При 330 нм $E_{\text{эф}}$ меняется при 3000°K от 50 до 74 ккал/моль. При 300 нм $E_{\text{эф}}$ остается постоянной во всем интервале т-р, составляя 74 ккал/моль. Считают, что испускание света в I при 330 и 300 нм связано с переходом $B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ в молекуле S_2 .

А. Шведчиков

XIV-9097

1979

CS₂(CS₂)₂фото-
ионизация

(+1) []

a. 1980. NS

3 Б1005. Фотоионизация мономеров и димеров CS₂ в сверхзвуковом молекулярном пучке. Trott Wayne M., Blais Norman C., Walters Edward A. Photoionization of carbon disulfide monomers and dimers in a supersonic molecular beam. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 4, 1692—1697 (англ.)

Аппаратура, включающая сверхзвуковой молек. пучек, монохроматор, источник вакуумного УФ- и масс-спектрометр, использовалась для определения эффективности фотоионизация CS₂ и (CS₂)₂ в диапазоне длин волн от 1006 до 1238 Å и 1007—1292 Å соотв. Пороговые энергии ионизации составляют 10,070 эВ для CS₂ и 9,63 эВ для (CS₂)₂. Ионизация CS₂ осуществляется удалением электрона с несвязывающей орбитали π_g одного из атомов серы. Структура, обнаруженная на кривой эффективности ионизации соотв-щая длинам волн 1100—1125 и 1010—1060 Å, хорошо коррелирует с сильными ридберговскими сериями III и IV в вакуумном абсорбционном спектре CS₂. Обсуждаются механизмы образования этих серий. Структура на кривой эффектив-

ности фотоионизации $(CS_2)_2$ выражена менее отчетливо. В области энергий 0—1 эВ структура приписывается возбуждению различных типов колебаний димера. Остальная структура может быть приписана процессам автоионизации, но она сильно отличается от соотв-щей картины для CS_2 . Наблюдаемые различия имеют два объяснения. Первое сводится к заключению, что первоначальный переход из основного состояния в возбужденные ридберговские состояния для димера существенно отличаются от подобных переходов для мономера и представляют собой последовательную пошаговую автоионизацию с ридберговского уровня. Альтернативное объяснение рассматривает форму ридберговских орбиталей в предположении малого возмущения этих орбиталей при образовании димера, т. е. димер имеет почти линейную или линейную форму.

Л. Ю. Русин

п а
е А

CS_2^+

XIV-9047

1979

3 Д169. Фотоионизация мономеров и димеров сероуглерода в сверхзвуковых молекулярных пучках. Photoionization of carbon disulfide monomers and dimers in a supersonic molecular beam. Trott Wayne M., Bias Norman C., Walters Edward A. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 4, 1692—1697 (англ.)

Методом отбора проб с помощью молекулярного пучка измерены кривые фотоионизационной эффективности для CS_2^+ и $(CS_2^+)_2$. Исследование мономеров проведено для длин волн 1005—1240 Å с оптич. разрешением 1,5 Å (энергетич. разрешение 12 мэв при 1200 Å), а димеры изучены в диапазоне 1000—1295 Å с энергетич. разрешением 30 мэв. Установлено, что величина потенциала ионизации CS_2 (основное состояние $^2\pi_{3/2}$) равна 10.070 ± 0.006 эв. Обнаружена тонкая структура на кривой выхода фотоионов CS_2^+ в виде небольшого числа

(Y)

□

⊕ $(CS_2)_2$ (до)



Ф. 1980. IV 3

ступенек в районе порога, которая связывается с переходами в $2\pi_{1/2}$ состояние иона, а также на несколько низколежащих колебательных состояний иона. На основе полученных данных найдено, что нижний предел энергии связи димера равен 11,3 ккал/моль. Обнаружено близкое соответствие автономных ионных структур для CS_2^+ и $(\text{CS}_2^+)_2$ в области длин волн 1000—1060 Å, а в диапазоне 1100—1125 Å эти структуры сильно различаются. Это различие объясняется на основе геометрии димера $(\text{CS}_2)_2$.

А. П. Калинин

CS₂

номер 7744

1979

Раман-
-спектр,
мерц. м.м.
взвеш.

Teixeira-Dias J. J. C.,
et al.

Spectrochim. acta
1979, A35, 127-130

Октябрь 7701

1979

C³⁴S₂

9 Д499. Инфракрасные спектры высокого разрешения изотопических разновидностей дисульфида углерода: полоса $2\nu_1 + \nu_3$. Walrand Jacques, Blanquet Chislain, Courtoy Charles P. High resolution infrared spectra of isotopic carbon disulfide: the $2\nu_1 +$

$+\nu_3$ band. «J. Mol. Spectrosc.»; 1979, 74, № 1, 165—174 (англ.)

С разрешением $0,03 \text{ см}^{-1}$ исследованы ИК-спектры поглощения молекул C^{34}S_2 и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ вблизи 2800 см^{-1} . Идентифицирована вращательная структура полос колебательных переходов $20^\circ 1 - 00^\circ 0$, $21^1 1 - 01^1 0$, $30^\circ 1 - 10^\circ 0$ молекул C^{34}S_2 и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$, полосы $22^2 1 - 02^2 0$ молекулы C^{34}S_2 и полосы $20^\circ 1 - 00^\circ 0$ молекулы $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$. Определены значения частот центров этих полос и вращательной и центробежной постоянных. М. Р. Алиев

М. М.

Ф. 1979/19

C.S.₂

Omniuch 7701

1979

90: 112390s High resolution infrared spectr. of isotopic carbon disulfide: the $\nu_1 + \nu_3$ band. Walrand, Jacques; Blanquet, Ghislain; Courtoy, Charles P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame Paix, Namur, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 74(1), 165-74 (Eng). The 2001-0000 bands of $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ were measured with a resolu. of 0.03 cm⁻¹. The following "hot" bands assocd. with this transition were also measured and analyzed: 2111-0110, 361-1000 for both the

isotopic forms. For $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$, the $\Delta-\Delta$ transition 2221-0220 was also recorded. In addn.; the 2001-0000 bands of the isotopic species $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ were measured.

Y.K. Chueif

C.A. 1979, 90, N14

CS₂

16 Б258. Инфракрасные спектры высокого разрешения изотопного сероуглерода: полоса $2\nu_1 + \nu_2$. Wal-
rand Jacques, Blanquet Ghislain, Cour-
toy Charles P. High resolution infrared spectra of
isotopic carbon disulfide: The $2\nu_1 + \nu_3$ band. «J. Mol.
Spectrosc.», 1979, 74, № 1, 165—174 (англ.)

С разрешением $0,03 \text{ см}^{-1}$ измерены спектры $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ в
области полосы $2\nu_1 + \nu_2$ ($2700\text{—}2825 \text{ см}^{-1}$). Наблюдены
также «горячие» полосы и полосы изотопных модифи-
каций: $21^11\text{—}01^10$ и $30^01\text{—}10^00$ для $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$,
 $22^21\text{—}02^20$ ($\Delta\text{—}\Delta$ -переход) для $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ $20^01\text{—}00^00$ для
 $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$. Проанализирована вращательная структура
полос и определены молек. постоянные для изотопных
модификаций CS_2 в верхних и нижних состояниях. По-
лученные данные для перехода $20^01\text{—}00^00$, а также
лит. значения для перехода $20^01\text{—}10^00$ использованы
для расчета вращательных постоянных в состоянии
 10^00 для $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$: $\nu_0 = 639,1293 \text{ см}^{-1}$, $B = (10256,07 \pm$
 $\pm 0,89) \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, $D = (0,95 \pm 0,10) \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$ и для
 $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$: $\nu_0 = 638,6146 \text{ см}^{-1}$, $B = (10254 \pm 0,89) \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$,
 $D = (1,01 \pm 0,12) \times 10^{-8} \text{ см}^{-1}$. С. Б. Осин

Л. 1979, № 16

CS₂

XIV-9128

1979

(2i)

✓ 82: 171815y High-resolution infrared spectra of carbon-12 disulfide (sulfur-34) and carbon-13 disulfide (sulfur-34). The $2\nu_2^0 + \nu_3$ band. Walrand, Jacques; Blanquet, Ghislain; Courtoy, Charles P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame de la Paix, B-5000 Namur, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1979 (Pub. 1980). 93(3), 211-25 (Fr). The $2\nu_2^0 + \nu_3$ band of $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ and $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ was obsd. with a resolu. of $\approx 0.04 \text{ cm}^{-1}$. The following hot bands were also recorded for both mols.: 03¹¹-01¹⁰ and 12⁰¹-10⁰⁰.

CA 1980 92 N20

CS₂

10 Б239. Инфракрасные спектры высокого раз-
решения полосы $2\nu_2^0 + \nu_3$ сероуглерода $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$.
Walrand Jacques, Blanquet Ghislain,
Courtoy Charles P. Spectres infrarouges à haute
résolution du disulfure de carbone $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ et $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ la
bande $2\nu_2^0 + \nu_3$. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1979, Ser. I;
93, № 3, 211—225 (франц.)

И. К. Скляр

На диффракц. спектрометре в области частот от
2340 до 2190 см^{-1} с разрешением около 0,04 см^{-1} из-
мерены ИК-спектры $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ (I); и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ (II). Иденти-
фицировано свыше 450 линий для колебательных
переходов 02^01-00^00 , 03^11-01^10 , 12^01-10^00 образцов
I и II. Из анализа спектров для I и II соотв.
определены центры полос 02^01-00^00 $\nu_0=2313,0756(22)$
и $2238,0141(14)$, 03^11-01^10 $\nu_0=2315,2077(18)$ и
 $2240,7921(19)$, 12^01-10^00 $\nu_0=2293,3225(22)$ и
 $2218,3573(18)$. Вычислены вращательные постоянные
и постоянные центробежного искажения для различных
переходов. Величины частот переходов, вычисленные
с учетом изотопич. замещения, хорошо согласуются с
эксперим. значениями. С. Н. Мурзин

Х. 1980. № 10

ХИВ-9728

CS₂

1979

3 Б63. Расчеты методом ССП производных квадрупольного момента и поляризуемости для симметричного валентного колебания CS₂. Williams J. H., Amos R. D. SCF calculations of the quadrupole moment and polarizability derivatives in the symmetric stretching mode of CS₂. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 66, № 2, 370—372 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в большом гауссовом базисе с поляризац. функциями на всех атомах рассчитаны тензоры квадрупольного момента и электронной поляризуемости молекулы CS₂ и их производные для полносимм. вал. кол. Для расчета использована конечная теория возмущений. Производные по нормальному колебанию вычислены путем численного

дифференцирования. Полученные результаты хорошо согласуются с данными расчетов мультikonфигурац. методом и экспериментом.

К. Я. Бурштейн

126. мех.
расчет,
vi.

2. 1980. N3

1978

CS₂

2 Д157. Вычисление производных квадрупольного момента и поляризуемости по симметричной валентной координате для молекулы CS₂ методом ССП. SCF calculations of the quadrupole moment and polarizability derivatives in the symmetric stretching mode of CS₂. Williams J. H., Amos R. D. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 66, № 2, 370—372 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО с использованием ограниченного базиса гауссовых орбиталей выполнен расчет первых производных квадрупольного момента и поляризуемости молекулы CS₂ по симметричной валентной координате. Результаты расчета согласуются с эксперим. данными, полученными по ИК-спектру, приведенному давлением, и по спектру комбинационного рассеяния.

М. Р. Алиев

расчет
производн.
квадрупольного
момента

Р.1980.12

CS_2
 CSe_2

фото-
диссоц.

(+1) Φ

X. 1981 N 7

Отпуск 10383 1980

7 Б1377. Распределение энергии в фотодиссоциации CS_2 и CSe_2 вакуумным ультрафиолетовым излучением. ~~Ashford~~ Michael N. R., Quinton Alan M., Simons John P. Energy disposal in the vacuum ultraviolet photodissociation of CS_2 and CSe_2 . «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 8, 905—914 (англ.)

При высоком разрешении (до 0,04 и 0,025 нм соотв. для CS_2 и CSe_2) зарегистрированы спектры флуоресценции (Фл) осколочных продуктов CS ($A^1\Pi$) и CSe ($A^1\Pi$), возникающих при фотодиссоциации соотв. CS_2

адн.
Э'

и CSe_2 монохроматич. светом 147; 130,4; 129,5; 123,6; 121,6 нм. Измерения производили при Фл в практически бесстолкновительных условиях, так что наблюдаемые спектры Фл соответствуют колебательным и вращательным распределениям первично образованных фрагментов. Основная часть полосы Фл CS соответствует колебательным переходам $\Delta v = \pm 2, \pm 1, 0$ в системе $A \rightarrow X$, причем распределение заселенностей колебательных уровней CS ($C^1\Pi$) не может быть аппроксимировано функцией Пуассона, как считалось ранее. Вращательные распределения в (0,0)-полосе системы CS ($A \rightarrow X$) аппроксимируются одной или несколькими функциями Больцмана с различными T -рами. С уменьшением длины волны фотолизующего света от 130,4 до 121,6 нм [избыточная энергия процесса фотодиссоциации $\text{CS}_2 + h\nu \rightarrow \text{CS}(A^1\Pi) + \text{S}(3^3P_j)$ при этом возрастает от 1900 до 7430 см^{-1}], доля f_v избыточной энергии, переходящей в энергию колебательного возбуждения $\text{CS}(A^1\Pi)$, увеличивается от 15 до 30%; для CSe_2 при 149,4 и 147,0 нм $f_v = 29$ и 24% соотв. Обсуждаются возможности теор. интерпретации полученных вращательных и колебательных распределений фотофрагментов.

В. Е. Скурат

CS₂

[common 9697]

1980

Bartell L.S

2995
anhydrous
KNO₃

J. Mol. Struct., 1980,
63, 259-71

1980

CS₂

10 Д320. Спектр магнитного кругового дихроизма сероуглерода. The magnetic circular dichroism spectrum of carbon disulfide. Barth Günter, Linder Robert E., Bunnenberg Edward, Djerassi Carl, Seamans Lloyd, Moscovitz Albert. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 3, 1423—1427 (англ.)

Получен и проанализирован спектр магнитного кругового дихроизма паров сероуглерода в области 300—380 нм. Показано, что спиновая компонента B_2 состояния 3A_2 лежит выше компонент A_1 и B_1 и что две последние разделены на 26 см^{-1} . Библ. 16. О. В. С.



спектр
J.

Ф 1980 № 10

CS₂

1980

18 Б271. Спектр магнитного кругового дихроизма дисульфида углерода. Barth Günter, Linder Robert E., Bunnenberg Edward, Djerassi Car, Seamans Lloyd, Moscowitz Albert. The magnetic circular dichroism spectrum of carbon disulfide. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 3, 1423—1427 (англ.)

Экспериментально изучен спектр магнитного кругового дихроизма газ. дисульфида углерода в области 300—

M, N,

380 нм с разрешением 0,1 нм. Спектр состоит из большого числа перекрывающихся полос. Идентифицированы системы синглетных и триплетных полос. Триплетные полосы представляют собой суперпозицию линий, соотв-щих вращательным *P*- и *R*-ветвям, причем форма линии определяется магнитс. оптич. членом *A*, к-рый для *P*-ветви отрицателен, а для *R*-ветви положителен.

Б. И. Жилинский

2 1980 № 18

CS₂J₃; ч.п.

2.1981. N 11

11 Б257. Полоса ν_3 сероуглерода $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$.
 Blanquet C., Walrand J., Courtoy C. P. La
 bande ν_3 du disulfure de carbone $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ et $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$. «Ann.
 soc. sci. Bruxelles», 1980 (1981), ser. 1, 94, № 2—3,
 129—139 (франц.; рез. англ.)

С разрешением $0,05 \text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры молекул $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ и $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ в области основных полос ν_3 . Проведен анализ вращательной структуры переходов 00^01-00^00 и 01^11-01^10 обеих изотопных молекул и получены след. молек. постоянные для $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ (см^{-1}): $\nu_0 = 1528,3748 \pm 0,0024$, $B'' = (10271,17 \pm 0,19) \times 10^{-5}$, $\Delta B = (-67,188 \pm 0,032) \times 10^{-5}$, $D'' = (0,99 \pm 0,017) \times 10^{-8}$, $\Delta D = (-0,018 \pm 0,003) \times 10^{-8}$ для перехода 00^01-00^00 , $\nu_0 = 1521,9618 \pm 0,058$, $B'' = (10294,02 \pm 0,36) \times 10^{-5}$, $\Delta B = (-67,001 \pm 0,085) \times 10^{-5}$, $D'' = (1,00 \pm 0,03) \times 10^{-8}$, $\Delta D = (-0,017 \pm 0,009) \times 10^{-8}$ для перехода 01^11-01^10 , и для $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ (см^{-1}): $\nu_0 = 1478,0943 \pm 0,0019$, $B'' = (10272,07 \pm 0,25) \times 10^{-5}$, $\Delta B = (-64,485 \pm 0,027) \times 10^{-5}$, $D'' = (1,01 \pm 0,02) \times 10^{-8}$, $\Delta D = (-0,002 \pm 0,003) \times 10^{-8}$ для перехода 00^01-00^00 и $\nu_0 = 1472,1190 \pm 0,032$, $B'' = (10293,55 \pm 0,40) \times 10^{-5}$, $\Delta B = (-64,288 \pm 0,052) \times 10^{-5}$, $D'' = (1,05 \pm 0,004) \times 10^{-8}$, $\Delta D = (0,002 \pm 0,004) \times 10^{-8}$ для перехода 01^11-01^10 .

С. Б. Осин

1980

CS₂

(2i)

94: 147836b The ν band of carbon disulfide $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ and $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Blanquet, Ghislain; Walrand, Jacques; Courtoy, Charles P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame Paix, B-5000 Namur, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1980, 94(2-3), 129-39 (Fr). The ν_3 fundamental of CS₂ in the gas-phase IR spectrum was measured with a resolu. of 0.05 cm⁻¹. The transitions 00⁰1-00⁰0 and 01¹-01¹0 of $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ and $^{13}\text{C}^{34}\text{S}_2$ were assigned and analyzed and the vibrational frequencies and rotational const. detd.

C.A. 1981. 94N18

1980

CS₂N₂O

3 Б156. Ветвление в электронной автоионизации CS₂ и N₂O. Eland J. H. D. Branching in electronic autoionization of CS₂ and N₂O. «Mol. Phys.», 1980, 40, № 4, 917—931 (англ.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии с варьированием длины волны (λ) возбуждающего излучения исследована автоионизация молекул CS₂ и N₂O. Для возбуждения использовали монохроматизированное излучение от гелиевого импульсного разрядного источника (континуум Гопфильда). В ФЭС сероуглерода наблюдались полосы, отнесенные к иону CS₂⁺ в состояниях $\tilde{B}$, $\tilde{Z}$, $\tilde{A}$, $\tilde{X}$. Приведены относит. коэф. ветвления (КВ) для состояний $\tilde{A}/\tilde{X}$ CS₂⁺ при фотоионизации в области ридберговской серии сходящейся к состоянию $\tilde{B}$, КВ для состояний $\tilde{A}/\tilde{X}$, $\tilde{B}/\tilde{X}$ и $\tilde{Z}/\tilde{X}$ — область ридберговской серии, сходящейся к состоянию $\tilde{C}$ и КВ для состоя-

фотоиониз.

Л. П.

①

X. 1981 КЗ

ний A/X , B/X , $C/\bar{X}$, $Z/\bar{X}$ в более коротковолновой области. Аналогичного рода данные получены для молекулы N_2O . Рассмотрены наиболее вероятные процессы ветвления при электронной автоионизации N_2O (остов N_2O^+ , $\bar{C}^2\Sigma^+$, ридберговские электроны $d\pi$, $d\sigma$, $p\pi$, $p\sigma$, $s\sigma$) и CS_2 (остов CS_2^+ , $B^2\Sigma_u^+$ ридберговские электроны $d\pi_g$, $d\sigma_g$, $s\sigma_g$; остов $CS_2+C^2\Sigma_g^+$ ридберговские электроны $s\sigma\sigma_g/d\pi_g$, $p\pi_u$, $p\sigma_u$). В ряде случаев наблюдали узко специфич. ветвление в электронной автоионизации. Существования флуоресцентной автоионизации не обнаружено. Полученные данные по CS_2 сопоставляются с результатами исследований фотоионизации молекул CO_2 , COS и CSe_2 .

В. М. Ковба

1980

CS₂N₂Oфотоэ. л.
спектр

⊕ □

ф. 1980 к 11

11 Д259. Фотоэлектронная спектроскопия с фиксированной энергией фотоэлектронов. Fixed energy photoelectron spectroscopy. Eland John H. D. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 4, 2878—2880 (англ.)

Описана разновидность метода фотоэлектронной спектроскопии, в котором сканируется длина волны ионизирующего излучения, а детектируются фотоэлектроны с фиксированной ненулевой кинетич. энергией. Отмечены преимущества предложенного метода — постоянство энергетич. разрешения и пропускания анализатора в широком спектральном диапазоне, возможность подавле-

ния как колебательной автоионизации, так и электронной автоионизации. Преимущества метода продемонстрированы на примере исследования CS₂ и N₂O.

Ю. В. Чижев

~~индекс~~ 9552

1980

CS₂

7 Д344. О фотоэлектронном спектре молекулы CS₂.
On the photoelectron spectrum of CS₂. Hubin-Fran-
skin M.-J., Delwiche J., Natalis P., Capra-
ce G., Roy D. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phe-
nom.», 1980, 18, № 4, 295-308 (англ.)

С энергетич. разрешением, не превышающим 17 мэВ
получены HeI (58,4 нм)-, NeI (73,58/74,37 нм)-, и AgI
(104,8/106,7 нм)-фотоэлектронные спектры газообразных
молекул CS₂. Установлено, что образование молекуляр-
ного иона в состояниях $\tilde{X}^2\Pi_g$ и $\tilde{B}^2\Sigma_w^+$ сопровождается
возбуждением колебательной моды ν_2 . Получены уточ-
ненные значения постоянной спин-орбитального расщеп-
ления для состояния $\tilde{A}^2\Pi_w$: 186 см⁻¹ и порога обра-
зования иона CS₂⁺ в состоянии $\tilde{A}^2\Pi_{u3/2}$ — 12,689 эВ.
Отмечено, что принятое ранее значение этого потенци-
ала ионизации было занижено (соответствовало «го-
рячей» полосе). Библ. 25.
М. Тимошенко

фотоэл.
спектр

ВЭ-ХИ-9630

9. 1980. №

CS₂

~~000000~~ 9532

1980

gornost.
chernip

92:155585t On the photoelectron spectrum of carbon disulfide. Hubin-Franskin, M. J.; Delwiche, J.; Natalis, P.; Caprace, G.; Roy, D. (Inst. Chim., Univ. Liege, B-4000 Liege, Belg.). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1980, 18(4), 295-308 (Eng.). High-resoln. photoelectron spectra of CS₂ were obtained by photoionization with the He I (58.4 nm), Ne I (73.58-74.37 nm) and Ar I (104.8-106.7 nm) resonance lines. The resoln. of ~17 meV was further improved by deconvolution of the exptl. data. The formation of the $X^2\Pi_g$ and $B^2\Sigma_u^+$ states is accompanied by a weak ν_2 excitation. The spin-orbit splitting of the $A^2\Pi_u$ state is completely resolved, and a value of 186 cm⁻¹ is reported. The value of 12.689 eV was confirmed for the ionization threshold of the $A^2\Pi_{u,3/2}$ state, and the small peak obsd. at lower energy is due to a hot band.

0296-111-9630
B91-111-0681

C.A.1980.22 N18

CS₂

фотоэлектронный
спектр

№ 1980 N14

14 Б117. О фотоэлектронном спектре CS₂. Hubin-Franskin M.-J., Delwiche J., Natalis P., Caprace G., Roy D. On the photoelectron spectrum of CS₂. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1980, 18, № 4, 295—308 (англ.)

С высоким разрешением (~ 17 мэВ) измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) CS₂, возбуждаемые излучением He-I, Ne-I и Ar-I. При обработке эксперим. данных использовалась процедура разложения эксперим. контура, основанная на использовании одного из вариантов метода отношения, что позволило улучшить разрешение. В ФЭС наблюдались переходы CS₂($\bar{X}$) $\rightarrow$ CS₂⁺($\bar{X}^2\Pi_g$, $\bar{A}^2\Pi_u$, $\bar{B}^2\Sigma_u^+$, $\bar{C}^2\Sigma_g^+$) с разрешенной колебательной структурой (в основном прогрессии по ν'_1 и (или) $2\nu'_2$, находящихся в состоянии резонанса Ферми). Наиболее развитая структура наблюдалась в случае перехода CS₂($\bar{X}$) $\rightarrow$ CS₂⁺($\bar{X}$): состояние $^2\Pi_{g3/2}$ — энергия ионизации (ЭИ) = 10,074 эВ, $\nu'_1 = 676$, $\nu'_2 = 306$, $\nu'_3 = 1161$ (ν'_i в см⁻¹); $^2\Pi_{g1/2}$ — ЭИ = 10,129 эВ, $\nu'_1 = 676$, $\nu'_2 = 323$, $\nu'_3 = 1137$; величина

1980

9806-114-9630

спин-орбитального расщепления 444 см^{-1} . В случае перехода $\text{CS}_2(\tilde{X}) \rightarrow \text{CS}_2^+(\tilde{A})$ наблюдались только прогрессии по ν_1 ($2\nu_2$): $^2\Pi_{u3/2} - \text{ЭИ} = 12,689 \text{ эВ}$, $\nu'_1 = 582$, $^2\Pi_{u1/2} - \nu'_1 = 586$, спин-орбитальное расщепление 186 см^{-1} . В переходах $\text{CS}_2(\tilde{X}) \rightarrow \text{CS}_2^+(\tilde{B})$ и $\text{CS}_2(\tilde{X}) \rightarrow \text{CS}_2^+(\tilde{C})$ выделены прогрессии по ν'_1 , ν'_2 и ν'_1 , ν'_3 соотв.: $\tilde{B} - \text{ЭИ} = 14,474 \text{ эВ}$, $\nu'_1 = 605$, $\nu'_2 = 363$, $\tilde{C} - \text{ЭИ} = 16,183 \text{ эВ}$, $\nu'_1 = 671$, $\nu'_3 = 1686$. Найденные значения ЭИ и ν'_i сопоставлены с данными, полученными ранее из спектров фотоионизации, оптич. спектров и методом электронного удара. В ФЭС, возбуждаемых излучением He-I и Ne-I, наблюдались две сателлитные полосы, интерпретированные как переходы $\text{CS}_2\tilde{X} \rightarrow \text{CS}_2^+(^2\Pi_u)$ со значениями ЭИ $13,854$ и $\sim 16,7 \text{ эВ}$. В обеих полосах обнаружена колебательная структура, хорошо разрешенная в первой полосе (ν_1 ($2\nu_2$) = 566) и значительно хуже разрешенная во 2-й полосе (колебательный интервал 411 см^{-1}).

В. М. Ковба

CS₂

1980

Grimm F.A., et al

поп. 1000.
спектр.

J. Chem. Phys., 1980, 72,
N 5, 3041-48.

● (see N 2) III

CS₂

Lammi 9552 | 1980

Herbin-Franzkin M.J.
et al.

Urethane,
Pugger.
Museum

Int. J. Mass. Spectrom.
Ion. Phys., 1980, 33,
311-314.

CS₂

ommuca 10401

1980

93: 57362u High-resolution infrared spectrum of carbon disulfide in the region of the bending fundamental ν_2 . Jolma, K.; Kauppinen, J. (Dep. Phys., Univ. Oulu, SF-90570 Oulu, 57 Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 82(1), 214-19 (Eng). The IR spectrum of CS₂ was measured in the region of the bending fundamental ν_2 band with high resolu. and accuracy. The main purpose of the work was to produce calibration lines around 400 cm⁻¹, but, in addn., the anal. of the bands obsd. led to the detn. of several mol. consts. comparable to other investigations at higher wavenos. In addn. to the fundamental ν_2 , several other bands are discernible.

2a

CA 1980 93 x 6

CS₂

[Ommux 16282] / 1980

opomux

Venkitachalam T.V.,
Krishnamachari S.L.N.B.,

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

CS₂

1980.

Wilden D. G, et al
Chem. Phys, 1980, 53,
77.

A study of spin and symmetry
forbidden transition in CS₂ by
high resolution ● energy-loss
spectroscopy.

CS₂

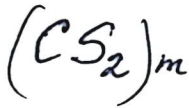
Lommuca 11341 1981

Kaappinen J. Jolmak.

U. N.

J.

J. Mol. Spectrosc.,
1981, 85, 314-321.



$$m \leq 5$$

фотоиониз

X. 1981 N 9

9 Б823. Изучение фотоионизации сероуглерода, его димеров и кластеров в молекулярных пучках. Опо Y., Linn S. H., Prest H. F., Gress M. E., Ng C. Y. Molecular beam photoionization study of carbon disulfide, carbon disulfide dimer and clusters. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2523—2533 (англ.)

Описан новый фотоионизац. масс-спектрометр с мол. пучком и приведены результаты исследования фотоионизации дисульфида углерода, димеров дисульфида углерода и кластеров $(CS_2)_m$ ($m \leq 5$). Данная аппаратура по сравнению с прототипами имеет в десять раз большее спектральное разрешение и на три порядка бóльшую чувствительность. Установка включает в себя разрядный источник света, детектор вакуумного ультрафиолетового излучения, монохроматор, источник примесного сверхзвукового пучка CS_2 в Ar, квадрупольный масс-спектрометр. В автоматизированной системе управления установки использован микропроцессор М6800. Предусмотрена связь с региональным вычислительным центром. Результаты измерений представлены в виде спектров эффективности фотоионизации (ЭФИ) в диапазоне 1210—1232 А (вблизи порога) и 1075—1130 А с разрешением 0,14 А для CS_2^+ и спектров ЭФИ обра-

зования ионов $(\text{CS}_2)_3^+$, $(\text{CS}_2)_4^+$, $(\text{CS}_2)_5^+$ в диапазоне 970—1400 Å. Для CS_2^+ разрешены девять автоионизац. максимумов, соотв-щих серии Ридберга ($n=16\div 24$). Отмечается, что величина первого потенциала ионизации (ПИ) для CS_2 , приведенная в работе («J. Chem. Phys.», 1960, 32, 1205) является слишком высокой. ПИ для состояний $X^2\Pi_{3/2}$ и $^2\Pi_{1/2}^2$ составляют $10,0685 \pm 0,0020$ и $10,1230 \pm 0,0020$ эВ соотв., что находится в хорошем согласии с лит. данными по фотоэлектронной спектроскопии. ПИ для $(\text{CS}_2)_3^+$ и $(\text{CS}_2)_5^+$ составляют $9,22 \pm 0,02$, $9,1 \pm 0,02$ и $9,04 \pm 0,02$ эВ соотв. Энергия связи $\text{CS}_2^+ \cdot \text{CS}_2$ составляет $17,5 \div 1$ ккал/моль. Отмечается, что применение молекулярно-пучкового метода для понижения вращательной т-ры исследуемых газов в сочетании с фотоионизацией при высоком разрешении обеспечивает прямое и точное определение ПИ.

В. М. Акимов

CS₂

1980

Potts A.W., et al
J. Phys. B 1980, 13(13)
2545-56

M.N.

coll. CO₂ - 14

CS₂

Виттиса 10049

1980

3 Б174. Регистрация 3A_2 состояния CS₂ при многофотонной ионизации. Rianda Ronald, Moll David J., Kuppermann Aron. Detection of the 3A_2 state of CS₂ by multiphoton ionization. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 73, № 3, 469—472 (англ.)

многофотон.
спектроскоп.

Обсуждается применение многофотонной спектроскопии для изучения сильно запрещенных синглет-триплетных переходов. В случае CS₂ для перехода в 3A_2 состояние сила осциллятора $f < 5 \times 10^{-7}$ в изучаемой области (370 нм) спектра. Эксперименты проводили с помощью лазера на красителе DL-200 с накачкой азотным UV-400 лазером. Мощность варьировали от 30 до 5 кВт при 20 Гц. Наблюдаемый резонансно-усиленный спектр многофотонной ионизации CS₂ в области 360—375 нм сравнивается с оптич. спектром, описанным в литературе. Обсуждаются преимущества метода.

Л. В. Серебренников

X. 1981 N 3

CS₂

139-XIV-9565

1980

18 Б272. Теоретический анализ спектра магнитного кругового дихроизма дисульфида углерода. Seaman S Lloyd, Moscovitz Alber, Linder Robert E., Barth Günter, Bunnenberg Edward, Djerrassi Carl. Theoretical analysis of the magnetic circular dichroism spectrum of carbon disulfide. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 3, 1428—1434 (англ.)

Проведен теор. анализ экспериментально полученного (см. пред. реферат) спектра кругового магнитного дихроизма дисульфида углерода. Обработка данных проведена совместно с ранее изученными спектрами магнитного вращения и спектрами поглощения в той же области (300—380 нм). Показано, что наблюдаемая R-система соответствует переходам на спиновую компоненту типа B_2 сильно расщепленного триплетного состояния 3A_2 . Две др. спиновые компоненты A_1 и B_1 невырождены и лежат ниже B_2 на 10 и 36 см^{-1} , однако относит. порядок следования этих двух уровней не установлен.

Б. И. Жилинский

(М.И.)

x 1980 n 18

CS₂

BP-XIV-9565

1980

спектр
Li

10 Д319. Теоретический анализ спектра магнитного кругового дихроизма сероуглерода. Theoretical analysis of the magnetic circular dichroism spectrum of carbon disulfide. Seamans Lloyd, Moscowitz Albert., Linder Robert E., Barth Günter, Bunnenberg Edward, Djerassi Carl. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 3, 1428—1434 (англ.)

С привлечением данных спектроскопии магнитного кругового дихроизма проанализировано мультиплетное расщепление состояния 3A_2 сероуглерода. Показано, что компоненты A_1 и B_1 являются невырожденными и лежат ниже компонента B_2 . Библ. 27. О. В. С.

99 1980 N10

1980

94:73891s On the equality of vibrational infrared and Raman frequencies. An experimental examinations. Stojkovic, Stojan R.; Ribnikar, Slobodan V. (Fac. Sci., Belgrade Univ., YU-11001 Belgrade, Yugoslavia). *Glas. Hem. Drus. Beograd* 1980, 45(10), 417-23 (Eng). Frequencies of band max. of 14 vibrational bands of liq. CS_2 , C_6H_6 , CH_2Cl_2 , CHCl_3 , and CCl_4 were remeasured in both IR and Raman spectra. In 9 cases, the band max. coincide within the exptl. errors. In 3 cases, the recorded differences are only apparent and occur because of differing band widths in the 2 types of spectra. In only 2 cases were real differences established. These are the CCl_4 bands of ν_3 and $2\nu_3$. In the 1st case no convincing explanation was found for the 3 cm^{-1} higher Raman frequency. The overtone $2\nu_3$ shows a 13-cm^{-1} lower frequency in the Raman and can be accounted for by the splitting of the upper level and different selection rules for IR and Raman transitions. Such differences can be expected in many cases where higher vibrational levels of degenerate vibrations are involved.

U.K. Paway
Chertop, Ji

(44) ☒

P.A. 1981.44 N10

1980

CS₂

2 Д483. Инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы CS₂ в области частот деформационного колебания ν_2 . High-resolution infrared spectrum of CS₂ in the region of the bending fundamental ν_2 . Tolma K., Kauppinen J. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 82, № 1, 214—219 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением 0,01 см⁻¹ измерен ИК-спектр поглощения молекулы CS₂ в области 375—425 см⁻¹. Идентифицирована вращательная структура полосы ν_2 молекул ¹²C³²S₂, ¹³C³²S₂ и ³²S¹²C³⁴S в естественном содержании CS₂, а также ряда «горячих» полос, расположенных вблизи ν_2 . Определены значения вращательной и центробежной постоянных и постоянной l-удвоения.

М. Р. Алиев

М. П.

ар. 1981. №2

1980

CS₂

6 Б235. Инфракрасный спектр высокого разрешения CS₂ в области полосы деформационного колебания ν_2 .
Tohma K., Kauppinen I. High-resolution infrared spectrum of CS₂ in the region of the bending fundamental ν_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 82, № 1, 214—219 (англ.)

Ч.Н.

На фурье-спектрометре в области частот 360—440 см⁻¹ с разрешением 0,010 см⁻¹ измерены ИК-спектры поглощения изотопич. образцов, ¹²C³²S₂ (I), ³²S¹²C²⁴S (II) и ¹³C³²S₂ (III), при их естественном содержании. Большая часть линий отнесена к основной полосе ν_2 01¹⁰—00⁰⁰, часть — к шести горячим полосам I и одной горячей полосе II. Выполнен колебательно-вращательный анализ полос с использованием полиномиального разложения четвертой степени для частот линий при учете удвоения -типа. Для всех полос определены молек. постоянные. Частоты ν_0 основной полосы 01¹⁰—00⁰⁰ I, найденные из данных о частотах P- и R-ветвях с одной стороны и Q-ветви с другой соотв. равны: $\nu_0=395,9875(2)$ и $395,9881(9)$ см⁻¹.
С. Н. Мурзин

2. 1981. N 6

CS₂

1980

спектр К.Р.

J_i

X.1981 N1

1 Б156. Спектр комбинационного рассеяния второго порядка сероуглерода в конденсированной фазе. Uma-
pathy S., Kesava s a m y K., Krishnamurt-
hy N. Second order Raman spectrum of carbon disul-
phide in the condensed phase. «J. Raman Spectrosc.»,
1980, 9, № 3, 144—149 (англ.)

Группой симметрии крист. CS₂ при $T < 162$ К является пространственная группа D_{2h}^{18} с двумя молекулами в примитивной ячейке. Внутренние колебания изолированной молекул CS₂ расщепляются в спектре КР кристалла благодаря статич. и динамич. эффектам крист. поля. Спектр КР CS₂ при 79 К и 18 К наряду с линиями ν_1 , ν_2 , ν_3 и $2\nu_1$ сопровождается широким спектром 2-го порядка. Интерпретация спектра 2-го порядка проведена на основе динамики крист. решетки, развитой Борном. Рассчитан фононный спектр CS₂ для всех дозволённых точек зоны Бриллюэна, используя приближение жесткой молекулы. Резюме

CS₂

1980

Ommick 9555

(cucurp)

92: 188701f Excitation spectrum of the near-ultraviolet bands of carbon disulfide. Vasudev, R.; Brand, J. C. D. (Dep. Chem., Univ. Western Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). Can. J. Chem. 1980, 58(5), 454-7 (Eng). An excitation spectrum of the triplet-singlet band system of CS₂ vapor was measured in the range 365-378 nm using a tunable laser source. Overall intensity is relatively insensitive to pressure in the range (150 mtorr-340 torr) tested in these observations. The results indicate that collisions with ground state mols. of CS₂ are efficient in promoting intersystem crossing to the ground state, and that the spontaneous emission obsd. is primarily resonance emission from the state populated by the radiation.

II

C. A. 1980: 92 N 22

Оттиски 9535

1980

CS₂

спектр
возбужд.

9 Д757. Спектр возбуждения CS₂ в близкой УФ-области. Excitation spectrum of the near-ultraviolet bands of CS₂. Vasudev R., Brand J. C. D. «Can. J. Chem.», 1980, 58, № 5, 454—457 (англ.; рез. франц.)

С использованием перестраиваемого лазера на красителе исследован спектр возбуждения (365—378 нм) триплет-синглетной полосы $\bar{a}-\tilde{X}$ молекулы CS₂. Обнаружено, что интегр. интенсивность люминесценции не чувствительна к давлению в диапазоне 0,15—340 мм рт. ст. Сделано заключение, что в результате столкновений CS₂($\bar{a}$) с CS₂($\tilde{X}$) происходит быстрая интеркомбинационная конверсия в основное состояние, а также, что наблюдаемое в эксперименте излучение является резонансным излучением из состояний, заселяемых непосредственно при лазерном возбуждении.

В. С. Иванов

Ф 1980 N 9

CS₂

оттиск 9555

1980

спектр
возбужд.

19 Б179. Спектр возбуждения полос CS₂ в ближней ультрафиолетовой области. Vasudev R., Brand J. C. D. Excitation spectrum of the near-ultraviolet bands of CS₂. «Can. J. Chem.», 1980, 58, № 5, 454—457 (англ.; рез. франц.)

С помощью импульсного перестраиваемого лазера (365—378 нм) измерен спектр возбуждения триплет-синглетной системы полос $\bar{a} - x$ CS₂ ($p=0,15-340$ мм) с развитой колебательной структурой (v_1', v_2').

X. 1980 N 19

Приведены положение ~ 60 полос, их относит. интенсивности (с поправкой на изменение мощности лазера с длиной волны) и их предв. отнесение. Полученные результаты указывают на существование сильной конкуренции между быстрым самотушением молекул CS_2^* при столкновениях и процессом излучения. В. М. Ковба

CS₂

Оттиск 10690 1980

5 Д441. Исследование запрещенных по спину и по симметрии переходов в CS₂ методом спектроскопии энергетических потерь с высоким разрешением. A study of spin and symmetry forbidden transitions in CS₂ by high resolution energy-loss spectroscopy. Wilder David G., Comer John. «Chem. Phys.», 1980, 53, № 1—2, 77—84 (англ.)

Спектры энергетич. потерь электронов в CS₂ исследованы в области 6—17 эв с аппаратным разрешением $\approx 0,02—0,03$ эв. Получены зависимости интенсивности полос от угла рассеяния и энергии удара, которые использованы для выделения и идентификации электрон-

ных переходов, запрещенных правилами отбора для симметрии и спина. Впервые обнаружены ридберговские ns-серии электрических ~~квадрупольных~~ переходов, сходящиеся к первому потенциалу ионизации (ПИ), три ридберговских серии, сходящиеся к третьему ПИ, а также два триплетных состояния валентного типа с энергией возбуждения 6,9—7,4 и 12,4—12,7 эв. Библ. 29.

А. В. Н.

спектр
энергетич.
потерь
электронов

ф. 1981 N 5

Отмечено 10690 1980

CS₂

8 Б116. Изучение методом спектроскопии потерь энергии электронов высокого разрешения переходов в CS₂, запрещенных дипольными правилами отбора по спину и симметрии. Wilden D. G., Comer J. A study of spin and symmetry forbidden transitions in CS₂ by high resolution energy-loss spectroscopy. «Chem. Phys.», 1980, 53, № 1—2, 77—84 (англ.)

J, E_i

/ С высоким разрешением (22—30) мэВ измерены спектры потерь энергии электронов (СПЭЭ) для CS₂ в области 16—17 эВ. Спектры получены при использовании режима фиксированной энергии регистрируемых электронов E_p ($E_p = 10, 20$ и 100 эВ), при этом сканирование проводилось путем изменения энергии перв. пучка. Угол рассеяния электронов на молекулах (θ) варьировался в пределах от 0 до 60° . Анализ зависимостей интенсивностей пиков в полученных СПЭЭ от E_p и θ позволил идентифицировать и провести отнесение ряда переходов, запрещенных дипольными правилами отбора по спину и симметрии. Впервые обнаружена последовательность электронных квадрупольных переходов, отнесенных к ns ридберговской серии (РС), сходящейся к 1-му потенциалу ионизации (ПИ) CS₂ (10,08 эВ). В области потерь энергии 10—15 эВ также впервые

X. 1981 N 8

найжены три РС, сходящиеся к 3-му ПИ CS_2 (14,47 эВ). В области 4-го ПИ (16,19 эВ) исследований молекулы отмечены изменения формы пиков двух РС, ранее изученных оптич. методами, при варьировании E_p . Кроме того, в полученных СПЭЭ обнаружен целый ряд отдельных особенностей, соотв-щих переходам типа синглет—триплет и между состояниями одинаковой четности, и определены их энергии возбуждения. В частности, предположено, что полосы в областях 6,9—7,4 и 12,4—12,7 эВ обусловлены возбуждением неизвестных ранее валентных триплетных состояний CS_2 . Для оптически разрешенных переходов данные, полученные на основе измеренных СПЭЭ, подтверждают справедливость (в большинстве случаев) интерпретаций РС, предложенных ранее др. авторами исходя лишь из оптич. спектра поглощения для молекулы CS_2 . Однако найдено, что особенности в области 7—7,6 эВ и одна из РС, сходящаяся к ПИ 14,47 эВ в действительности обусловлены дипольными переходами, хотя в оптич. спектрах в 1-м случае интенсивность пиков мала, а во 2-м случае рассчитанное для серни значение квантового дефекта 1,6 соответствует, как показано, переходам $\sigma_u \rightarrow nd$, а не $\sigma_u \rightarrow np$, как предполагалось.

О. А. Басченко

CS₂

36510

фото-
диссоц.

OM

12 Д198. Распределение энергии осколков, образуемых при фотодиссоциации CS₂ при 193 нм. Energy distribution of the fragments produced by photodissociation of CS₂ at 193 nm. Yang S. C., Freedman A., Kawasaki M., Bersohn R. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 7, 4058—4062 (англ.)

Времяпролетным методом исследованы распределения поступательной $P(E_T)$ и вращательно-колебательной P_{vib} энергии осколков CS и S, образуемых при фотодиссоциации молекулярного пучка CS₂ импульсным лазерным излучением с $\lambda=193$ нм. Регистрация осколков производилась с помощью квадрупольного масс-спектрометра в направлении, перпендикулярном к молекулярному и световому пучкам. Полученное распределение $P(E_T)$ при $E_T \leq 20$ ккал/моль относится в основном к процессу образования синглетного $S(^1D)$ -состояния с $0 \leq v \leq 5$, а при $20 \leq E_T \leq 40$ ккал/моль — к образованию триплетного $S(^3P)$ состояния с $4 \leq v \leq 13$. Осколки CS вращательно возбуждены со средней энергией $\sim 3,5$ ккал/моль. При $v \leq 6$ отношения интенсивностей образования атомов S в триплетном и синглетном состояниях составляет $(0,2 \pm 0,1)/(0,8 \pm 0,1) = 0,25 \pm 0,14$.

И. Флакс

1980

Ф. 1980
N 12

CS₂

Дм. 36510

1980

3 Б1293. Энергетическое распределение осколков, возникающих при фотодиссоциации CS₂ светом 193 нм. Yang S. C., Freedman A., Kawasaki M., Bergsohn R. Energy distribution of the fragments produced by photodissociation of CS₂ at 193 nm. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 7, 4058—4062 (англ.)

Времяпролетным методом с регистрацией квадрупольным масс-спектрометром измеряли распределения по поступательным энергиям радикалов CS-продуктов фотодиссоциации CS₂ в молек. пучке светом 193 нм импульсного лазера на эксимерах ArF*. Методом лазерной флуоресценции измеряли распределение CS по вращательно-колебательным энергетич. состояниям при фотоллизе CS₂ при давл. 10 мкм лазером на ArF*. Верхнее возбужденное состояние S₃ является преддиссоциативным, продукты фотодиссоциации — CS(X¹Σ) и S(¹D). Кроме того, имеется триплетное состояние CS₂, диссо-

фото-
диссоциация

х. 1981/13

цирующее на $CS(X^1\Sigma)$ и $S(^3P)$. Фрагменты CS вращательно возбуждены, причем средняя энергия возбуждения составляет $\sim 3,5$ ккал/моль. В обоих случаях диссоциации CS_2 (с образованием S в состояниях 1D и 3P) обнаружена сильная инверсия заселенности колебательных уровней. Обнаружены колебательно-возбужденные фрагменты CS с $v \leq 7$. В процессах диссоциации, дающих фрагменты CS с $v \leq 6$, $80 \pm 10\%$ атомов S возникает в состоянии 1D и $20 \pm 10\%$ атомов — в состоянии 3P .

В. Е. Скурат

CS₂

XIV-9126

1980

93:101770b Bond dissociation energies in the carbon disulfide molecule from mass spectrometric electron impact studies. Zmbov, Kiro F.; Miletic, Miodrag; Veljkovic, Miodir (Lab. Phys. Chem., Boris Kidric Inst. Nucl. Sci., YU-11001 Belgrade, Yugoslavia). *Glas. Hem. Drus. Beograd* 1980, 45(3), 23-8 (Eng). The dissociative ionization of CS₂ under electron impact was studied by a mass spectrometer. The appearance potentials of CS⁺ and S⁺ fragment ions were measured and interpreted in terms of possible fragmentation mechanisms. The results were used to detn. the (SC-S) and (C-S) bond dissochn. energies.

(90°)

C.A. 1980, 93, 10



⊗ (+) CS⁺ (AP)

CS₂

XIV-9126

1980

D) 19 Б113. Определение энергии разрыва связей в молекуле CS₂ масс-спектрометрическим методом электронного удара. Zmbov Kiro F., Miletić Miodrag, Veljković Miodir. Bond dissociation energies in the CS₂ molecule from mass spectrometric electron impact studies. «Глас. Хем. друшт. Београд», 1980, 45, № 3, 23—28 (англ.; рез. сербскохорв.)

Измерены кривые эффективности ионизации (КЭИ) электронным ударом молекул CS₂ с образованием S⁺, CS⁺ и CS₂⁺. Ионизирующие электроны монохроматизировались трохондальным монохроматором и имели разброс по энергиям 0,06 эВ. Из КЭИ определены Пт появления ионов (эВ) CS₂⁺ 10,05±0,08, CS⁺ 14,10 и S⁺ 14,80. Интерпретированы изломы на КЭИ, соотв-щие порогам процессов образования возбужденных продуктов. На основании полученных Пт появления найдено, что энергия разрыва связи SC—S равна 428,4±7,7 кДж и C—S 715,1±7,7 кДж.

Е. Николаев

Эл. удар,
ЭИ. разрыва
связи.

X. 1980 N 19

CS₂

Оттиск 12988

1981

9 Б183. УФ-исследования возбуждения CS₂ элект-
ронным ударом. Ajello J. M., Srivastava S. K.
UV studies of electron impact excitation of CS₂. «J.
Chem. Phys.», 1981, 75, № 9, 4454—4463 (англ.)

В области 110—510 нм измерены спектры испускания
при возбуждении молекулы CS₂ электронным ударом
с энергией до 125 эВ. В области 110—210 нм наблю-
дали ряд атомных мультиплетов. Рассчитаны факторы
Франка-Кондона и относит. интенсивности полос $v =$
 $= 0-4-v'' = 0-5$ ($\Delta v = 0, \pm 1, \pm 2$) система A¹Π—
X¹Σ+CS. В. М. Ковба

спектр,
вероятн.
переходов

X. 1982, 19, № 9.

CS₂

Оттиск 12988

1981

4 Д667. Исследование УФ-излучения при возбуждении CS₂ электронным ударом. UV studies of electron impact excitation of CS₂. Ajello J. M., Srivastava S. K. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 9, 4454—4463 (англ.)

спектр

В области 110—510 нм исследованы спектры флуоресценции (ФЛ) при возбуждении паров CS₂ электронным ударом. Определены сечения возбуждения оптич. переходов (при E_{эл}=100 эВ): CS₂⁺(B²Σ_u⁺→X²Π_g) в области 275—290 нм, CS₂⁺(A²Π_u→X²Π_g) в области 430—510 нм, CS(A¹Π→X¹Σ⁺) в области 240—275 нм, CI, CII, SI, SII, SIII в области 114—140 нм. Определены сечения возбуждения оптич. переходов в CS₂⁺ и CS в зависимости от энергии электронов (0—125 эВ). Проведено сравнение спектров ФЛ CS₂⁺ и CS при фото-возбуждении и при электронном ударе. Библ. 28.

Ю. В. Чижов

Ф. 1982, 18, № 4.

CS₂⁺, CS

CS₂

Оммуек 12988

1981

поперечное
сечение.

Цироние

при фектр.
изаре

С.А. 1981, 95, N22.

/ 95: 194696m UV studies of electron impact excitation of carbon disulfide. Ajello, J. M.; Srivastava, S. K. (Jet Propul Lab., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91109 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(9), 4454-63 (Eng). First measurements are reported of emission cross sections of CS₂ by electron impact over the wavelength interval 110 to 510 nm. Abs. emission cross sections are obtained at 100 eV for all spectral features obsd. in the interval. The important electronic transitions listed in decreasing order of their emission cross sections at 100 eV are the ionization transitions CS₂⁺(B²E_u⁺ → X²H_g) in the middle UV, CS₂⁺(A²H_u → X²H_g) in the visible, the dissociative excitation transition CS(A¹H → X¹E⁺) in the middle UV, and individual C and S multiplets in the vacuum UV. Emission cross sections as a function of electron energy (0-125 eV) are reported for several of the important electronic transitions.

CS₂

Оттиск 11812

1981

12 Д777. Возбуждаемая лазером флуоресценция CS₂. Laser excited fluorescence of CS₂. Bernath Peter F., Dulick Michael, Field Robert W., Hardwick J. L. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 2, 275—285 (англ.)

Исследованы спектры резонансной флуоресценции молекул CS₂, возбуждаемой УФ-линиями Ar⁺- и Kr⁺-лазеров. Показано, что эти линии возбуждают одиночные вращательные уровни с $K=0$ и 1 в полосах R-системы Клемана. В спектрах флуоресценции в каждом случае наблюдаются длинные прогрессии по деформационному колебанию ν_2'' основного состояния. Идентифицированы высокие колебательные уровни молекулы CS₂ вплоть до (1,28, °0). Показано, что матричные элементы взаимодействия для членов полнад во многих случаях больше расстояниями между ними: например $\langle 0,21^0, 0/H/1,19^1, 0 \rangle \approx -204$ см⁻¹. Сделано заключение, что, несмотря на кажущуюся простоту спектров, гармонич. базис не может быть использован для их описания даже в нулевом приближении. Библ. 21.

ил. 1;

ф. 1981, 18, № 12.

В. С. Иванов

CS₂

Оттиск 11812

1981

21 Б175. Флуоресценция CS₂ возбуждаемая лазером. Bernath P. F., Dulick M., Field R. W., Hardwick J. L. Laser Excited fluorescence of CS₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 86, № 2, 275—285 (англ.)

Измерены спектры флуоресценции паров сероуглерода, возбуждаемые от различных УФ-линий Ar⁺ и Kr⁺ лазеров. Наблюдались длинные прогрессии полос, связанных с деф. кол. молекулы в основном электронном состоянии (наиболее высоколежащий уровень, наблюдаемый экспериментально — 1,28°, 0). Для каждой линии приведены волновые числа полос в спектре флуоресценции и обсуждено отнесение возбуждаемого перехода. В результате совместной обработки всех эксперим. данных найдены колебательные молек. постоянные основного состояния CS₂.

В. М. Ковба

М.П.

Х. 21. 1981

CS₂ OTUCC 12815 1981

Bohm M. C., Gleiter R.

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

CS_2

1981

Butler J. E.

фотодиссоции

J. Photochem., 1981, 17,
N1-2, 54.

~~результаты~~
~~когда~~
~~остались.~~

●
(исл. CS_2 ; III).

CS₂

1981

1 Б149. Абсолютные дипольные силы осцилляторов для фотопоглощения в фотоионизации дисульфида углерода. Carnovale F., White M. G., Brion C. E. Absolute dipole oscillator strengths for photoabsorption and photoionization of carbon disulphide. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1981, 24, № 1, 63—76 (англ.)

сечение
фотопоглощения
и фотоионизации

С использованием $(e, 2e)$ спектроскопии проведены измерения сечений (абс. дипольных сил осцилляторов) фотопоглощения, а также полных и парциальных сечений фотоионизации молекулы CS₂. Измерения проводились при фиксированном значении угла (54,7°) вылета выбитых электронов относительно направления первичного пучка (магич. угол). Спектры фотопоглощения и фотоионизации, имитируемые измерениями сечений $(e, 2e)$ -рассеяния при различных условиях проведения экспериментов, исследовались в области энергий связи

X. 1982, 19 АБ, N1.

5—40 эВ. Обнаружено сильное поглощение молекулы CS_2 в области энергий выше 20 эВ. Усиление поглощения связано с возбужденными состояниями молекулы, распадающимися в результате процесса автоионизации. В спектрах фотоионизации при значениях энергий потерь выше 20 эВ наблюдается интенсивная протяженная сателлитная структура, связанная с корреляц. эффектами. Энергии и интенсивности сателлитных структур в спектре энергий связи сопоставлены с данными расчетов спектров ионизации CS_2 методом функций Грина. С использованием полученных эксперим. данных определены абс. парциальные сечения ионизации для состояний $X^2\Pi_g$, $A^2\Pi_u$, $B^2\Sigma_u^+$ и $C^2\Sigma_g^+$ иона CS_2^+ .

И. А. Тополь



CS₂

Оттиск 12931

1981

9 Б182. Молекулярные спектры испускания разряда низкого давления в парах дисульфида углерода. Cos-sart Daniel. Molecular emission spectra from low pressure discharges through carbon disulfide vapour. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1981, 78, № 9, 711—716 (англ.; рез. фр.)

Измерены спектры испускания паров дисульфида углерода при возбуждении в 5 разных разрядах низкого давления. Показано, что в разных разрядах образуются: CS₂, CS₂⁺, CS, CS⁺ в разных электронных состояниях. Проанализирована диаграмма энергетич. уровней указанных молекул и ионов и обсуждены возможные механизмы возбуждения, диссоциации и ионизации.

С. Б. Осин

13

спектр,
диаграм. &.

X. 1982, 19, N9.

CS₂

Оттиск 12931

1981

4 Д663. Молекулярные эмиссионные спектры разрядов низкого давления в парах сероуглерода. Molecular emission spectra from low pressure discharges through carbon disulfide vapour. Cossart Daniel. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1981, 78, № 9, 711—716 (англ.; рез. фр.)

В диапазоне 250—430 нм исследованы эмиссионные спектры CS₂, возбуждаемого в положит. столбе тлеющего разряда, пучком электронов линейного ускорителя, сверхвысокочастотным разрядом, разрядом в полом катоде и разрядом в поперечном магн. поле. На основе анализа спектров оценены диапазоны энергий возбуждающих электронов в каждом типе разряда. Рассмотрено соотношение наблюдаемых спектральных полос с переходами в нейтральных и ионизированных молекулярных частицах. Ряд полос соотнесен с неизвестными ранее электронными переходами в радикалах CS. Библ. 31. С. Литке

Эмиссион.
Спектры

Ф. 1982, 18, № 4.

CS₂

[номер 12143]

1981.

в растворах

Cox T. J., et al.

Раман
спектр,
интенсивн.

Mol. Phys., 1981, 43
(2), 307-19.

и н (матер.
ссылки)

CS₂

1981

11 Д675. Электронное тушение флуоресценции паров CS₂, возбуждаемой излучением $\lambda=3371 \text{ \AA}$. Electronic quenching of CS₂ vapour excited at 3371 Å. Dueñas Fañanás J. A., Cabello A. — European Conference on the Dynamics of Excited States, Pisa, 14—16th Apr., 1980. — «Nuovo cim.», 1981, B63, № 1, 140—144 (англ.; рез. итал., рус.)

Исследовано самотушение флуоресценции паров CS₂, возбуждаемой излучением N₂-лазера (3371 Å). Флуоресценцию регистрировали через интерференционные фильтры с максимумами пропускания 4480, 5540 или 5860 Å. Давление паров CS₂ изменяли в пределах 10⁻²—1 мм рт. ст. Установлено, что при низких давлениях затухание флуоресценции является двухэкспоненциальным при всех использованных светофильтрах. При давлении нескольких десятых мм рт. ст. в затухании наблюдается лишь одна компонента. Во всем ис-

Спектр
флуоресц.

ф. 1981, 18, 111.

следованном диапазоне давлений обе компоненты флуоресценции показывают штерн-фольмеровское поведение. Определены константы скорости тушения обеих компонент. Короткоживущая флуоресценция тушится в 3 раза более эффективно, чем долгоживущая.

В. С. Иванов

CS₂

Commu 12842 | 1981

Hildenbrandt R. L.
et al.

Monergh,
Cmper.

J. Mol. Struct.,
1981, 85, 25-36

1981

CS₂

18 Б287. Инфракрасный спектр высокого разрешения $^{13}\text{CS}_2$ между 250 и 430 см^{-1} . Kauppinen J., Jolma K. High resolution infrared spectrum of $^{13}\text{CS}_2$ between 250 and 430 см^{-1} . «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 314—321 (англ.)

M.M.

и.к. спектр

Исследован ИК-спектр высокого разрешения $^{13}\text{CS}_2$ между 250 и 430 см^{-1} , измеренный с помощью фурье-спектрометра с разрешением 0,01 см^{-1} . Численная обработка спектра проведена по известным полиномиальным ф-лам для колебательно-вращательных уровней энергии линейной молекулы. Изучены $01^10 \leftarrow 00^00$, $02^20 \leftarrow 01^10$, $02^00 \leftarrow 01^10$, $03^30 \leftarrow 02^20$, $03^10 \leftarrow 02^00$, $03^10 \leftarrow 0,2^20$, $11^10 \leftarrow 10^00$, $10^00 \leftarrow 01^10$ $^{13}\text{CS}_2$ и полоса $01^10 \leftarrow 00^00$ $^{32}\text{S}^{13}\text{C}^{34}\text{S}$. Для каждой полосы даны наблюдаемое максимальное значение J (квантового числа полного углового момента), число измеренных линий и станд. отклонение частот для всей полосы. Определены вращательные постоянные B и D , колебательные уровни энергии для верхнего и нижнего состояний наблюдаемых переходов и постоянная l -удвоения для П-состояний 01^10 , 11^10 , 03^11 . Полученные результаты сравнены с имеющимися лит. данными.

В. М. Михайлов

Ж 1981 N 18

C52

1981

94: 74125g High resolution infrared spectrum of carbon-13 disulfide between 250 and 430 cm^{-1} . Kauppinen, J.; Jolma, K. (Dep. Phys., Univ. Oulu, 90570 Oulu, Finland). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 85(2), 314-21 (Eng). The high resolu. IR spectrum of $^{13}\text{CS}_2$ between 250 and 430 cm^{-1} was studied with a Fourier transform spectrometer at a resolu. of $\sim 0.010 \text{ cm}^{-1}$. The following bands were analyzed: the bending fundamental $01^{10} \leftarrow 00^{00}$ of $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and the assocd. hot bands $02^{20} \leftarrow 01^{10}$, $02^{00} \leftarrow 01^{10}$, $03^{30} \leftarrow 02^{20}$, $03^{10} \leftarrow 02^{00}$, $03^{10} \leftarrow 02^{20}$, $11^{10} \leftarrow 10^{00}$, the difference band $10^{00} \leftarrow 01^{10}$ of $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$, and the bending fundamental $01^{10} \leftarrow 00^{00}$ of $^{32}\text{S}^{13}\text{C}^{34}\text{S}$. Polynomial fits were used in the analyses. The rotational consts. B and D together with the vibrational term values were derived for the states involved. The l -type doubling const. q was obtained for the Π -states 01^{10} , 11^{10} , and 03^{10} of $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$.

M.N.

C. A. 1981. 24, N10

1981

CS₂

9 Д478. ИК-спектр высокого разрешения $^{13}\text{CS}_2$ в области $250\text{--}430\text{ см}^{-1}$. High resolution infrared spectrum of $^{13}\text{CS}_2$ between 250 and 430 см^{-1} . Kauppinen J., Jolma K. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 314—321 (англ.)

Получен ИК-спектр паров $^{13}\text{CS}_2$ при давлении 2,6 мм рт. ст. в слое 3 м в области $250\text{--}430\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,01\text{ см}^{-1}$. Приведены частоты и отнесение линий к колебательно-вращательным переходам полосы ν_2 и 15 сопутствующим ей полосам горячих переходов молекулы $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и полосы ν_2 молекулы $^{32}\text{S}^{13}\text{C}^{34}\text{S}$. Разрешены компоненты l -удвоения. Определены вращательные постоянные B и D в основном и возбужденных колебательных состояниях и колебательные частоты и константы l -удвоения. Рассчитаны энергии колебательных уровней 01^10 , 02^00 , 03^10 , 03^30 , 10^00 и 11^10 молекулы $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$.

М.М.

Ф. 1981 №9

CS₂

1981

Lacy M., et al.

поверхности
потенц.
спектры

Mol. Phys., 1981, 43,
N 1, 47-63.

●
(см. OCS; III)

CS₂

Оттиск 12393 1981

3 Д78. Ангармоническое силовое поле дисульфида углерода. The anharmonic force field of carbon disulphide. Lacy M., Whiffen D. H. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 6, 1205—1217 (англ.)

По известным эксперим. данным для колебательно-вращательных переходов в молекуле CS₂ определены параметры ангармонического силового поля. Нахождение параметров модельного гамильтониана проведено итерационным методом, причем колебательно-вращательная задача решена с помощью метода матричной диагонализации, а не теории возмущений. Найденная потенц. поверхность в интервале энергий 0—5500 см⁻¹ получена с точностью ~1%. Проведено сравнение двух различных типов координат при записи модельного гамильтониана в виде степенного разложения. Полученное силовое поле сравнено с ранее найденными. Показано, что удачный выбор координат позволяет уменьшить число параметров разложения.

Е. А. Ж.

сил. пост.

Ф. 1982, 18, №3.

CS₂

Оттиск 12393

1981

8 Б168. Ангармоническое силовое поле сероуглерода. Lacy M., Whiffen D. H. The anharmonic force field of carbon disulphide. «Mol. Phys.», 1981, 43, № 6, 1205—1217 (англ.)

Определено ангармонич. силовое поле CS₂, используя метод диагонализации матриц. Это силовое поле дает меньшую систематич. ошибку, чем поле, найденное на основе теории возмущений, и описывает потенциальную поверхность в области 0—5500 см⁻¹ с ошибкой менее 1%. Найденное силовое поле дает возможность вычисления вращательных параметров q и D с более высокой точностью, чем ранее. Разложение в ряд по координатам ρ , вместо обычно используемых координат D позволило вычислить с более высокой точностью и частоты более высоких энергетич. уровней; эти координаты особенно удобны, когда используют сокращенное силовое поле, причем достигается хорошее согласие частот и величин B с эксперим. значениями. Предложенный метод расчета годится только для молекул, в к-рых невелика ангармоничность колебаний.

Е. Разумова

сил. пост.,
м. л;

х. 1982,
19, № 8

CS_2

1981

Lacy M., et al.

Mol. Phys., 1981, 43, N1,
47-63.

потенц.
спектр.

●
(сер. OCS; III)

CS₂

Оттиск 12484

1981

5 Б180. Спектры флуоресценции с отдельных вибронных уровней состояния 1B_2 CS₂ охлажденного в сверхзвуковой открытой струе. Mikami Naohiko, Kasahara Hiroshi, Ito Mitsuo. SVL fluorescence spectra from the 1B_2 state of CS₂ cooled in a supersonic free jet. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 83, № 3, 488—492 (англ.)

Измерены спектры флуоресценции с ряда отдельных вибронных уровней состояния 1B_2 молекулы CS₂ (нижняя компонента состояния ${}^1\Delta_u$ линейной молекулы), охлажденной в сверхзвуковой открытой струе. Большинство полос в спектре возбуждения соответствует полосам, наблюдаемым в спектре поглощения газообразного CS₂, отсутствуют или малоинтенсивны лишь горячие полосы, что связано с низкой т-рой струи. Спектры флуоресценции измеряли для трех возбуждаемых переходов: 0—0 Σ (30900 см⁻¹), 1—0 Σ (31352 см⁻¹), 2—0 Σ (31794 см⁻¹). Общие особенности спектров флуоресценции следующие. Спект-

М.П., Ви;

Х, 1982, 19, 15.

ры наблюдаются в широком диапазоне от области возбуждения до $\lambda \geq 600$ нм, причем, никакого явного континуума нет. Спектр можно разделить на две части, обозначенные как M и L системы. Система M состоит из короткой прогрессии (прогрессий) с интервалом $\sim 800 \text{ см}^{-1}$ ($2\nu''_2$). Система L лежит в длинноволновой части спектра начиная с $\sim 28000 \text{ см}^{-1}$, т. е. на $\sim 3000 \text{ см}^{-1}$ ниже области возбуждения и имеет очень сложный характер. Система L состоит из нескольких серий прогрессий с интервалом $\sim 1450 \text{ см}^{-1}$ ($\nu_1'' + 2\nu_2''$). В. М. Ковба

CS₂

Ommuck 12434

1981

chemp

physopcs

' 95: 228461y SVL fluorescence spectra from the 1B_2 state of carbon disulfide cooled in a supersonic free jet. Mikami, Naohiko; Kasahara, Hiroshi; Ito, Mitsuo (Fac. Sci., Tohoku Univ., Sendai, Japan 980). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 83(3), 488-92 (Eng). The single vibronic level (SVL) fluorescence spectra from the 1B_2 state of CS₂ cooled in a supersonic free jet were obsd. The transitions to the highly excited vibrational levels in the ground state were detected. The nature of the emitting states is discussed in terms of the strong coupling with low-lying triplet state(s).

C. A. 1981, 95, N26.

CS₂

Оттиск 12434/1981

Vi;

3 Д734. Спектры флуоресценции с отдельных колебательных уровней состояния 1B_2 молекул CS₂, охлажденных в сверхзвуковой струе. SVL fluorescence spectra from the 1B_2 state of CS₂ cooled in a supersonic free jet. Mikami Naohiko, Kasahara Hiroshi, Ito Mitsuo. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 83, № 3, 488—492 (англ.)

В области 15 000—33 000 см⁻¹ получены спектры флуоресценции молекул CS₂, охлажденных в сверхзвуковой струе. Возбуждение молекул CS₂ на определенные колебательные уровни состояния 1B_2 осуществлялось импульсным перестраиваемым лазером на красителе. Идентифицирован ряд линий с участием высоколежащих колебательных уровней основного состояния молекулы CS₂. Анализ структуры полос спектра флуоресценции позволили авторам высказать предположение о сильном взаимном возмущении низлежащего триплетного состояния и состояния 1B_2 .

ф. 1982, 18, № 3.

CS₂

Commerce 12563 1981

Okwada K.

curr. ref.

2ē

Spectrochim. acta

1981, A37, 381-84

CS₂

ammuch 11471.

1981

Ono Y., et al.

про-
нонзаус J. Chem. Phys., 1981,
74 (2), 1125-32

CS₂

1981

флуоресцен-
ция

11 D677. Константы столкновительного тушения и времена жизни флуоресценции газообразного дисульфида углерода. Collisional quenching constants and collision-free lifetimes of fluorescence of gaseous carbon disulfide. Orita Hideo, Morita Hiroshi, Nagakura Saburo. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 1, 33—36 (англ.)

В области 290—340 нм получены разрешенные во времени спектры флуоресценции газообразных молекул CS₂. Возбуждение молекул осуществлялось N₂-лазером (в состоянии ¹A₂) и импульсным перестраиваемым лазером на красителе (в состоянии ¹B₂). В диапазоне 0,01—0,06 мм рт. ст. получены зависимости констант тушения возбужденных молекул CS₂ от давления, а также времена жизни, характеризующие быструю и медленную компоненты их излучательного распада. Показано, что медленная компонента обусловлена испусканием с большого числа уровней, заселяемых при колебательной релаксации молекул CS₂. Резюме

ф. 1981, Л8, N11.

1981

CS₂(флуоресцен-
ция)

22 Б175. Влияние магнитного поля на флуоресценцию CS₂ возбуждаемого в состояния ¹A₂ и ¹B₂. Orita Hideo, Morita Hiroshi, Nagakura Saburo. Magnetic field effect on the fluorescence of CS₂ excited to the ¹A₂ and ¹B₂ states. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 1, 29—32 (англ.)

Исследовано влияние магнитного поля (до 13 кГс) на флуоресценцию CS₂ ($p_{\text{CS}_2} = 10^{-3} \text{ — } \sim 0,6 \text{ мм}$) из состояний ¹A₂ и ¹B₂, возбуждаемую N₂-лазером и перестраиваемым лазером на красителе с удвоением частоты. Анализ кривой флуоресцентного распада из состояния ¹A₂ ($\lambda \approx 380 \text{ нм}$) в отсутствие и при наличии магнитного поля показал в обоих случаях наличие двух компонент с временами жизни (τ) 2,8 мксек (I) и 14,5 мксек (II). Наличие магнитного поля не влияло на интенсивность II. Для I найдено, что предэкспоненциальный множитель $A(H)$ уменьшается с ростом напряженности поля ($A(H)/A(0) \sim 0,5$ при 13 кГс) и не зависит от давления исследуемого газа ($10^{-3} \text{ — } 7,2 \times$

X. 1981/22, 1945

$\times 10^{-2}$ мм). При измерении интенсивности флуоресценции из состояния 1B_2 ($\nu_2' = 0-4$) использовалась комбинация УФ-фильтра с ограниченной полосой пропускания и интерференционного фильтра. Кривые флуоресцентного распада измерялись при $\lambda \approx 370$ нм ($\lambda_{\text{возб.}} = 323,5$ нм, $\nu_2' = 2$). Как и в случае флуоресценции из состояния 1A_2 выделены две компоненты распада — быстрая ($\tau_I = 3,1$ мксек) и медленная ($\tau_{II} = 13,4$ мксек) (при $P = 9,15 \cdot 10^{-3}$ мм). τ_I и τ_{II} , а также предэкспоненциальный множитель I не зависят от магнитного поля, в то время как предэкспоненциальный множитель I уменьшается до $A(H)/A(O) \sim 0,7$ при 6,1 кГс. τ и $A(H)$ не зависят от давления. Это указывает на то, что влияние магнитного поля на флуоресценцию CS_2 из состояний 1A_2 и 1B_2 носит чисто внутримолек. характер.

В. М. Ковба

CS₂

[common 12128] 1981

Person W. B., et al.

Кв. мех.
расчет

коэффициент.
св-в.

J. Phys. Chem., 1981,

85, 1998-2007

[part I])

CS₂

1981

Person W. B. et al.

J. Phys. Chem. 1981,
85 (14), 1998-2007.

кв. дек.
проект

(см. CO₂ ; III)

CS₂

Оттиск 11516 1981

11 Д113. Молекулярные постоянные CS₂ в возбужденных состояниях. Molecular constants of CS₂ in the excited state. Ramasamy R., Karuppanan T. A., Venkateswarlu K. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1981, 262, № 2, 230—234 (англ.)

В приближениях обобщенного валентного силового поля и силового поля Юри-Брэдли рассчитаны силовые постоянные молекулы CS₂ в возбужденном состоянии $\tilde{a}$. Рассчитаны также среднеквадратичные амплитуды колебаний, постоянные центробежного искажения и кориолисовы коэф. связи. В. И. Барановский

сил. пост.,
м.п.

ф. 1981, 18, № 11.

CS₂

Оттиск 11516

1981

20 Б180. Молекулярные постоянные CS₂ в возбужденном состоянии. Ramasamy R., Катурраппанан Т. А., Venkateswarlu K. Molecular constants of CS₂ in the excited state. «Z. phys. Chem». (DDR), 1981, 262, № 2, 230—234 (англ.)

Выполнен расчет частот и форм нормальных колебаний с обобщенным валентно-силовым полем и силовым полем Юри—Бредли, рассчитаны силовые постоянные молекулы CS₂ в возбужденном состоянии $\tilde{a}$. Вычислены среднеквадратичные амплитуды колебаний, постоянные кориолисова взаимодействия и постоянные центробежного искажения. Результаты расчета сопоставляются с соотв-щими данными для основного электронного состояния молекулы. В. М. Ковба

М. 17.

Х. 20. 1981

CS₂

Ommuck 11516

1981

M, R .

94; 182756x Molecular constants of carbon disulfide in the excited state. Ramasamy, R.; Karuppannan, T. A.; Venkateswarlu, K. (Dep. Phys., PSG Auton. Coll. Arts Sci., Coimbatore, 641014 India). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1981, 262(2), 230-4 (Eng). The normal coordinate anal. of the CS₂ mol. in its excited state was carried out for the 1st time and some of the important mol. consts. were evaluated. These consts. were compared with those corresponding to the ground state of the mol.

C.A. 1981, 94, N22

CS₂

спектр,
сечение
фото-
иониза-
ции

1981
Tabche - Foutaile A.

Thèse doct. sci. phys.
Univ. Paris, Sud, 1981,
1981, 210 p., ill.

●
(сер. O₂⁺; III)

CS₂

[Ommuck 13650]

1982

Carnovale F., Hitchcock,
et al. A. P.

фото-

химиза-
ция.

Chem. Phys., 1982, 66

N 3, 249-259.



CS₂

Оттиск 14912 1982

2 Б137. Угловая зависимость фотоэлектронных спектров CS₂ и COS, измеренная для энергий фотонов от 21 до 70 эВ. Angle resolved photoelectron spectroscopy of CS₂ and COS measured as a function of photon energy from 21 to 70 eV. Carlson Thomas A., Krause Manfred O., Grimm Frederick A. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 4, 1701—1709 (англ.)

фотоиониз.
спектр



С использованием синхротронного излучения в качестве источника возбуждения измерены фотоэлектронные спектры с угловым разрешением (ФЭСУР) молекул CS₂ и COS. Энергия возбуждающего излучения варьировалась в пределах 21—70 эВ для CS₂ и 21—40 эВ для COS. В результате измерения ФЭСУР определены энергетич. зависимости парц. сечений фотоионизации (ПСФ) и параметра асимметрии β для первых 5 полос ФЭС CS₂ и первых 4 полос ФЭС COS. Эксперим. данные интерпретированы с использованием данных расчетов

X. 1983, 19, № 2

ПСФ и β в рамках обобщенного X_α -метода рассеянных волн (на случай непрерывного спектра). В ПСФ и зависимости $\beta(E)$ для $2\pi_g$ -МО в CS_2 и 3π -МО в COS наблюдается куперовский минимум. Аналогичные особенности ПСФ хорошо переданы в теор. расчетах. Детальное сопоставление эксперим. и теор. данных показало, что метод рассеянных волн позволяет правильно описать эксперим. результаты для ПСФ и β верхних МО, а также область куперовского минимума в энергетич. зависимости ПСФ и β . Согласие теории и эксперимента ухудшается при описании фотоионизации глубоких валентных МО и резонансов формы. 5-й пик в ФЭС CS_2 отнесен к сателлиту конфигурац. взаимодействия, генетически связанному с ионизацией МО $2\pi_u$.

И. А. Тополь



CS₂

1982

2 Д615. Разрешенная по углу фотоэлектронная спектроскопия молекул CS₂ и COS в области энергий фотонов 21—70 эВ. Angle resolved photoelectron spectroscopy of CS₂ and COS measured as a function of photon energy from 21 to 70 eV. Carlson Thomas A., Krause Manfred O., Grimm Frederick A. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 4, 1701—1709 (англ.)

спектр



ср. 1983, 18, № 2

С использованием синхротронного излучения в области 21—70 эВ получены спектральные зависимости парциальных сечений фотоионизации и параметров анизотропии угловых распределений фотоэлектронов для первых пяти полос фотоэлектронных спектров CS_2 и в области 21—40 эВ, для первых четырех полос спектра COS. Эксперим. результаты сопоставлены с данными теоретич. расчетов. Показано, что фотоионизация орбиталей $2\pi_g(\text{CS}_2)$ и $3\pi(\text{COS})$ характеризуется наличием куперовского минимума, а пятая полоса в фотоэлектронном спектре CS_2 является сателлитом полосы, соответствующей ионизации с орбитали $2\pi_u$. Библ. 20. М. Т.

CS₂

1982

7 Д562. Выходы фотодиссоциации CS₂ в области 1060—1520 Å. Photodissociation yields of ~~CS₂~~ at 1060—1520 Å. Day R. L., Suto Masako, Lee L. C. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 3, 4403—4409 (англ.)

Спектр

В области 1060—1520 Å с помощью синхротронного излучения измерены сечения поглощения и выход флуоресценции ($\lambda_f = 1900—3000$ и $1900—8000$ Å) молекулы CS₂. В спектре поглощения при $\lambda > 1200$ Å зарегистрированы ридберговские переходы, а в более коротковолн. области — сильная полоса ($\sigma_a = 2,1 \cdot 10^{-16}$ см²) при 1117 Å на фоне плавного континуума. Рассмотрены возможные процессы фотодиссоциации CS₂. Установлено, что флуоресценция с $\lambda_f = 1900—3000$ Å появляется при возбуждении излучением с $\lambda < 1335$ Å и обусловлена в основном переходом CS(A¹Π → X¹Σ⁺). Флуоресценция с $\lambda_f = 1900—8000$ Å появляется при

ор. 1983, 18, № 7

$\lambda < 1490 \text{ Å}$ и наряду с переходом $CS(A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+)$ вклад в нее, вероятно, дают переходы $S(^1S_0 \rightarrow ^3P_1)$, $CS(d^3\Delta, a'^3\Sigma^+ \text{ и } a^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+)$. Максим. выход флуоресценции с $\lambda_{\text{ф}} = 1900\text{—}3000$ и $1900\text{—}8000 \text{ Å}$ наблюдается при $\lambda = 1235 \text{ Å}$ и равен 7,5 и 13% соответственно. Отмечена перспективность использования криптоновой лампы ($\lambda = 1236 \text{ Å}$) в качестве источника излучения при определении конц-ии CS_2 в атмосфере. Библ. 27. А. В. Н.



CS₂

1982

Gershikov A. G.

параметры
ангармонизм.

Zh. Strukt. Khim.

1982, 23(6), 143-7.

(см. CO₂ ; II)

CS₂

От. 14934

1982

— 5 Д614. Спектры флуоресценции и рекомбинационного излучения молекул S₂, образующихся при УФ-лазерном фотолизе CS₂ в Ar-матрице при температуре 15 К. Fluorescence and recombination — emission spectra from S₂ formed by ultraviolet laser photolysis of CS₂ in an argon matrix at 15 К. Hamaguchi Hiro-o, Tasumi Mitsuo. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 91, № 5, 406—408 (англ.)

спектр.

В области 20 000—28 000 см⁻¹ получены спектры испускания молекул CS₂, изолированных в Ar-матрице при т-ре 15 К. Спектры возбуждались 2-й гармоникой Ar⁺-лазера (λ=257,3 нм). Концентрация молекул CS₂ в матрице составляла 0,2—1%. Структура спектров отнесена к переходам в системах B³Σ_u⁻ → X³Σ_g⁻ и B''³Π_u → X³Σ_g⁻ молекул S₂, образующихся в результате рекомбинации атомов S — продуктов реакции CS₂ + hν(257,3 нм) → CS + S. Установлено, что состояние B''³Π_u лежит ниже состояния B³Σ_u⁻ на 524 см⁻¹.
М. Т.

(4) ⊠

ср. 1983, 18, N 5 S₂ (спектр, & i)

Сероуглерод

1982

3 Д515. Индуцированные взаимодействиями спектры жидкостей. Interaction-induced spectra in liquids. Mad den P. A. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8 Int. Conf., Bordeaux, 6-11 Sept., 1982». Chichester e. a., 1982, 307—315 (англ.; рез. фр.)

Описаны современные представления об индуцированных взаимодействиями молекул спектрах рассеяния и ИК-поглощения жидкостей. В качестве примера рассмотрен сероуглерод, для которого обсуждаются изотропные и анизотропные компоненты полос ν_2 и ν_3 комб. рас., полоса ИК-поглощения ν_1 , спектр в длинноволн. ИК-области, крылья разрешенной полосы комб. рас. ν_1 и анизотропного рэлеевского рассеяния. Описаны механизмы возникновения этих спектров, природа индуцированного дипольного момента, вклады различных диполей в интенсивность рассеяния. Отмечено совпа-

Vi, М.А.

Фр. 1983, 18, 13

дение контуров полос изотропного и анизотропного комб. рас. одного и того же колебания; асимптотики полос длинноволн. ИК-поглощения и индуцированного комб. рас.; компонент рэлеевского рассеяния и полосы ν_1 комб. рас., связанных с механизмом диполь—индуцированный диполь. Обсуждается влияние различного типа флуктуаций на форму полос. М. В. Т.

CS₂

[Ommuck 13892] 1982

96: 207781h Fluorescence spectrum from the ¹B₂ state of carbon disulfide. Matsuzaki, A.; Nakamura, Y.; Itoh, T. (Inst. Space Astron. Sci., Tokyo, Japan 153). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 87(4), 389-91 (Eng). The emission spectrum of gaseous CS₂ from the 2nd excited singlet state, ¹B₂(0,0,0), was studied. A sharp band assigned to the fluorescence from the ¹B₂ state was obsd. in addn. to the well-known broad band emission. The undispersed emission showed a nonexponential decay.

спектр
флуоресц.

C. A. 1982, 96, N 24.

CS₂

Сттиск 13892

1982

16 Б159. Спектр флуоресценции из состояния 1B_2 дисульфида углерода. Matsuzaki A., Nakamura Y., Itoh T. Fluorescence spectrum from the 1B_2 state of carbon disulfide. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 87, № 4, 389—391 (англ.)

Измерены возбуждаемые He—Cd-лазером (325,0 нм, 10 мВт) спектры флуоресценции дисульфида углерода CS₂ в газовой фазе, связанные с переходами из 2-го возбужденного синглетного состояния 1B_2 . Кроме известной ранее широкой полосы испускания в спектре зарегистрирована дискретная система полос в области 325—380 нм, образующая по меньшей мере две прогрессии. Проведен анализ колебательной структуры этой системы. Наблюдаемые полосы отнесены к переходам из состояния $^1B_2(0, 0^0, 0)$ на уровни $2v_2''n$ и $v_1'' + 2v_2''n$ ($n = 0—5$) основного состояния CS₂. Изучена кривая распада флуоресценции из состояния 1B_2 . Выделено две компоненты флуоресценции с временами жизни 4 и 20 мкс. Показано, что испускание носит неэкспоненциальный характер. Обсуждены процессы дезактивации в низших возбужденных состояниях CS₂, NO₂ и SO₂.

С. Б. Осин

М.П.

X. 1982, 19, N 16.

~~CS₂~~

Оттиск 13892 1982

CS₂

8 Д743. Спектр флуоресценции из состояния $\text{Cs}_2(^1\text{B}_2)$. Fluorescence spectrum from the $^1\text{B}_2$ state of carbon disulfide. Matsuzaki A., Nakamura Y., Itoh T. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 87, № 4, 389—391 (англ.)

спектр
флуоресц.

Исследованы спектры флуоресценции молекул CS_2 , возбуждаемые излучением He—Cd-лазера (325,0 нм) или второй гармоникой перестраиваемого лазера на красителе. Наряду с хорошо известной широкой полосой $^1\text{B}_2\text{—}^1\Sigma_g^+$ зарегистрированы резкие полосы, приписанные этому же переходу. Установлено, что кинетика затухания недиспергированной флуоресценции не является одноэкспоненциальной.

В. С. Иванов

Ф. 1982, 18, N 8.

CS₂

[Отмечен 13776] 1982

интерес-
ность

(экспери-
мент и
кв. мех.
расчет)

Nagashima M., Kona-
ka S., Kimura M.,

Bull. Chem. Soc. Jap.
1982, 55, N1, 28-32

CS₂

Оттиск 14920 1982

12 Д386. Многофотонная ионизация и механизмы развала CS₂. Multiphoton ionization and fragmentation mechanisms of CS₂. Seaver Mark, Hudgens Jeffrey W., De Corpo J. J. «Chem. Phys.», 1982, 70, № 1—2, 63—68 (англ.)

Многофотонная ионизация и развал CS₂ (I) при облучении молекулярного пучка I лазерными импульсами с длиной волны 193 (А) и 266 (Б) нм исследовались по ионному сигналу на масс-спектрометре, снимаемому в зависимости от интенсивности света и давления I. В случае А поглощение одного фотона приводило к образованию CS₂ ($\tilde{A}^1B_2$) с последующей преддиссоциацией на нейтральные фрагменты CS и S. Эти фрагменты ионизовались в лазерном поле и вступали во вторичные реакции, давая ионы CS₂⁺ и S₂⁺. В случае Б прямая ионизация и развал I происходили с сильно возбужденных электронных состояний, образовавшихся при поглощении по крайней мере четырех фотонов. Обсуждаются возможные элементарные реакции с участием I и продуктов.

А. П. Зуев

Многофотон.
и ионизация -
цис

Ф. 1982, 18,
N 12

CS₂

Оттиск 13097

1982

11 Б147. Индуцируемая лазером флуоресценции состояния $\tilde{R}^{es}B_2CS_2$, возбуждаемая в области 3547 Å. Vasudev R. Laser-induced fluorescence of the $\tilde{R}^{es}B_2$ state of CS₂ excited at 3547 Å. «Chem. Phys.», 1982, 64, № 2, 167—173 (англ.)

резонанс. флуоресц., спектр, м.п.

Измерены спектры резонансной флуоресценции молекул CS₂, возбуждаемые третьей гармоникой Ne—ИАГ-лазера ($\lambda_{\text{возб}} = 3547 \text{ Å}$; $\Delta\nu \approx 2 \text{ см}^{-1}$). Показано, что излучение лазера накачивает линии R (62) перехода 0,8,0—0,1,0 и R (58, 59) перехода 0,10,0—0,2²,0 системы $\tilde{R}^{es}B_2-X^1\Sigma_g^+CS_2$. Наблюдено и идентифицировано большое число переходов на различные колебательные уровни основного электронного состояния. С. Б. Осин

Х. 1982, 19, № 11.

CS₂

1983

1 Л152. ИК-спектры высокого разрешения полосы $\nu_3-\nu_1$ сероуглерода $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Spectres infrarouges à haute résolution du disulfure de carbone $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ et $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ la bande $\nu_3-\nu_1$. Baeten Edith, Blanquet Ghislain, Walrand Jacques, Courtoy C. P. «Ann. Soc. sci. Bruxelles.», 1983, 97, № 4, 229—241 (фр.; рез. англ.)

С помощью двойного дифракционного спектрометра с разрешением $0,07\text{ см}^{-1}$ исследованы спектры поглощения в области перехода с возбужденного колебательно-го состояния $\nu_3-\nu_1$ (860 см^{-1}) молекул CS₂ в газовой фазе. Исследованы образцы, обогащенные изотопами ^{32}S и ^{34}S . Измерено положение >200 линий колебательно-вращательной структуры. Определены вращательные параметры молекул CS₂, воспроизводящие наблюдаемый спектр со средним отклонением не хуже $0,004\text{ см}^{-1}$.

К. Э. М.

$\nu_i, \text{м.п.}$

ф. 1985, 18, №1

CS₂

1983

24 Б1255. Инфракрасные спектры высокого разрешения полосы $\nu_3-\nu_1$ сероуглерода $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Spectres infrarouges à haute résolution du disulfure de carbone $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ et $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. La bande $\nu_3-\nu_1$. Baeten E., Blanquet G., Walrand J., Courtoy C. P. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1983, 97, № 4, 229—241 (фр.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения высокого разрешения ($0,07 \text{ см}^{-1}$) полосы $\nu_3-\nu_1$ изотопных молекул $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Из анализа ТС полос (83 и 98 компонент, соотв.) определены молек. постоянные (данные для изотопа ^{34}S в скобках): переход 00^01-10^00 , $\nu_0 = 877,356 \pm 0,0004 \text{ см}^{-1}$ ($889,235 \pm 0,003$), $B'' (10^{-5} \text{ см}^{-1}) = 10896,15 \pm 0,25$ ($10254,79 \pm 0,32$), $\Delta B = -55,85 \pm 0,005$ ($-51,99 \pm 0,03$), $D'' (10^{-3} \cdot \text{см}^{-1}) = 1,045 \pm 0,024$ ($0,981 \pm 0,021$), $\Delta D = -0,040 \pm 0,004$ ($-0,007 \pm 0,002$). Для $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ выполнен также анализ ТС (61 компонента) горячей полосы $(\nu_2^1 + \nu_3) - (\nu_1 + \nu_2^1)$, $\nu^0 = 878,431 \text{ см}^{-1}$.

Б. В. Рассадин

Vi, M. N.

X. 1984, 19, № 24

CS₂

1984

102: 86752f Tunable diode laser spectra of the $\nu_3-\nu_1$ region of carbon disulfide. Baeten, Edith; Blanquet, Ghislain; Walrand, Jacques; Courtoy, C. P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame de la Paix, 5000 Namur, Belg.). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1286-92 (Eng). The 850 to 900 cm⁻¹ region of CS₂ was investigated with a tunable diode laser spectrometer having Doppler-limited resolu. and a waveno. accuracy of 10⁻³ cm⁻¹. More than 2250 lines were detected and attributed to 8 transitions of ¹²C³²S₂, ¹²C³²S³³S, or ¹²C³²S³⁴S.

$\nu_3 - \nu_1$,
laser boss.
Chexms

C.A. 1985, 102, N10

CS₂

1983

1 Л381. Многофотонная ионизация паров CS₂. Multistep ionization of CS₂ vapour. Bieniak B., Ernst K. «Appl. Phys.», 1983, В31, № 3, 153—155 (англ.)

Изучена многофотонная ионизация паров CS₂ в замкнутой кювете под действием излучения N₂-лазера (337 нм) при плотности мощности излучения 10⁷ Вт·см⁻². Получены зависимости фототока от давления и интенсивности лазерного излучения. Эксперим. результаты проанализированы на основе формализма кинетич. ур-ний. Установлено, что ионизация осуществляется в результате 3-фотонного поглощения. Получена оценка для времени ион-электронной рекомбинации (100 мкс).

В. А. Елохин

многофотон.
ионизация

сф. 1984, 18, № 1

CS₂

1983

22 Б1503. Многоступенчатая ионизация паров CS₂. Multistep ionization of CS₂ vapour. Bieniak B., Ernst K. «Appl. Phys.», 1983, В31, № 3, 153—155 (англ.)

При помощи ионизац. камеры, заполненной парами CS₂ при давл. 15—150 Торр, изучали процесс многоступенчатой фотоионизации (МФИ) CS₂ под действием сфокусированного излучения 337 нм импульсного лазера на N₂ (ширина импульса 6 нс, пиковая мощность ~200 кВт, частота следования импульсов 30 Гц, плотность потока энергии в фокусном пятне W до 10^7 Вт/см²). В опытах измеряли величину фототока I в зависимости от давл. паров CS₂, интенсивности I лазерного луча (ее изменяли при помощи нейтр. стеклянных фильтров) напряженности электрич. поля (расстояние между плоскопараллельными электродами 3,5 мм, напряжение 10—1000 В). Показано, что при $W < 10^6$ Вт/см² зависимость I от I имеет вид $I \sim I^n$, где $n \approx 3$, что указывает на процесс трехфотонной иони-

многоступенчат
ионизация

Х. 1983, 19, N22.

зации CS_2 (Пт ионизации CS_2 равен 10,1 эВ, энергия фотона света 337 нм равна 3,7 эВ). При более высоких значениях W зависимость J от I обнаруживает тенденцию к насыщению ($n=3,1-3,3$), что указывает на наличие резонансного процесса (однофотонное поглощение света с возбуждением 1A_2 -компоненты состояния $^1\Delta_u$ или двухфотонное поглощение с возбуждением высоких колебательных уровней $\tilde{C}$ -состояния молекулы CS_2). Зависимость J от давл. паров CS_2 линейна при давл. ниже 50 Торр и становится квадратичной при более высоких давл. Предположен, что эффект связан с ионизацией под действием вторичных электронов, ускоренных электр. полем. Этот вывод подтвержден опытами по включению электр. поля через различные промежутки времени (до 350 мкс) после лазерного импульса. Показано, что вклад этого процесса в ~ 100 раз превышает вклад от чистой фотоионизации.

В. Е. Скурат

р.
опро

CS₂

1983

99: 79554j Multistep ionization of carbon disulfide vapor.
Bieniak, B.; Ernst, K. (Inst. Exp. Phys., Warsaw Univ., PL-00681
Warsaw, Pol.). *Appl. Phys., [Part] B* 1983, B31(3), 153-5 (Eng).
A multistep ionization process was obsd. in CS₂ vapor irradiated by a
337-nm N laser. A model is described in which optical as well as
collisional excitation are involved in the ionization process.

многократная
ионизация

C.A. 1983, 99, N10

CS₂

[Om. 16879]

1983

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

Ac;

J. Phys. Chem., 1983,
87, N 1, 45-49.

CS₂

1983

Donovan R. J., Fotakis C.,
et al.

enckmp Car. J. Chem., 1983,
61, NS, 1023-1026

● (Car. CS; III)

CS₂

От. 16966

1983

12 Д499. Высшие электронно-возбужденные состояния дисульфида углерода. Исследования методом электронного удара. Higher electronic excited states of carbon disulfide. An electron impact investigation. Doering J. P., McDiarmid Ruth. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 10, 1822—1829 (англ.)

В области 6—12 эВ получены спектры энергетич. потерь электронов при рассеянии на газообразном дисульфиде углерода. Энергия и угол падения первичных электронов варьировались в диапазонах 28—100 эВ и 0°—10° соответственно. В спектрах идентифицированы переходы с участием состояний $ns(\Pi_g)$ и $np_\sigma(\Pi_u)$ ридберговской серии, сходящейся к первому потенциалу ионизации, а также валентные переходы в состояния $(2\pi_g)^{-1} (7\sigma_g) {}^1\Pi_g$ и $(2\pi_u)^{-1} (7\sigma_g) {}^1\Pi_u$.
Библ. 35. М. Т.

спектр

фр. 1983, 19, N 12

CS₂

DM. 16966 1983

22 Б113. Высоковозбужденные электронные состояния сероуглерода. Изучение методом электронного удара. Higher electronic excited states of carbon disulfide. An electron impact investigation. Doering J. P., McDiarmid R. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 10, 1822—1829 (англ.)

Высоковозбужденные
электронные
состояние

Для молекул CS₂ в газовой фазе измерены спектры потерь энергии электронов в области 5,7—11 эВ при изменении энергии возбуждения E от 28 до 100 эВ и угла рассеяния θ от 0° до 13°. Разрешение по энергии составляло 15 мэВ. Интерпретация полученных спектров проведена на основе анализа колебательной структуры и изменений относит. интенсивностей линий при варьировании E и θ и после детального сопоставления с лит. данными. В спектрах идентифицированы особенности, соотв-щие возбуждению: ns (Π_g), $np\sigma$ (Π_u), и, вероятно, 5 и 6рл (Π_u) ридберговских состояний, сходящихся к первому потенциалу ионизации, а также переходов в валентные $(2\pi_g)^{-1}(7\sigma_g)^1\Pi_g$ и $(2\pi_u)^{-1}(7\sigma_g)^1\Pi_u$ состояния. Показано, что соотношение рид-

X. 1983, 19, 122

берговских состояний с синглетными и триплетными состояниями справедливо только при $n < 6$ (в случае (Λ, Σ) схемы связывания). При $n \geq 6$ определяющим является (Ω, ω) тип связи.

О. А. Басченко



CS₂

1983

8 Б4370. Эффект лазерного снега в парах CS₂. Laser snow effect in CS₂ vapour. Ernst Krzysztof. «Adv. Laser Spectrosc. Proc. NATO Adv. Study Inst., San Miniato, 26 July—7 Aug., 1981». New York; London, 1983, 331—337 (англ.)

По интенсивности рассеяния излучения He—Ne-лазера исследовано образование т. наз. лазерного снега (ЛС) (т. е. частиц с размерами ~1 мкм) при облучении паров CS₂ светом 337 нм лазера на N₂ или светом 351 и 357 нм лазера на Kr⁺. Процесс образования частиц ЛС является цепным. Предложен, след. механизм их образования $CS_2 + h\nu \rightarrow CS_2^*$; $CS_2^* + CS_2 \rightarrow 2CS_2$; $CS_2^* + CS_2 \rightarrow 2CS + S_2$; $nCS \rightarrow (CS)_n$. Этот процесс возможен при условии, что длина волны возбуждающего света совпадает с линиями поглощения CS₂, принадлежащими к одной из двух перекрывающихся полос поглощения при 290—380 и при 330—430 нм. Образование ЛС связано и с Фл возбужденных моле-

X. 1984, 19, № 8

кул CS_2^* . Фиолетовые линии 407, 413 и 415 нм лазера на Kr^+ , к-рые в принципе могут совпадать с одной из линий в полосе поглощения 330—430 нм, не возбуждают Фл и не дают ЛС. Это показывает, что для образования частиц ЛС требуются электронновозбужденные молекулы CS_2^* . В условиях эксперимента прямая фотодиссоциация CS_2 невозможна по энергетич. причинам: минимальная энергия фотона, требуемая для процесса $\text{CS}_2 + h\nu \rightarrow \text{CS} + \text{S}$, составляет 4,46 эВ (~ 230 нм). Аэрозольные частицы образуют коричневый осадок на дне кюветы. Масс-спектральный анализ осадка обнаруживает присутствие CS , $(\text{CS})_2$ и различных форм серы ($\text{S}_2, \dots, \text{S}_8$), что согласуется с предложенной моделью образования ЛС. Изучение кинетики процесса показывает, что частицы ЛС образуются при давл. CS_2 выше нек-рого порогового значения, к-рое зависит от интенсивности лазерного пучка и от геометрии эксперимента. Показано, что осаждение частиц обнаруживает осцилляции с периодом ~ 6 —10 мин, причем период увеличивается с повышением давл., а положения максимумов и их амплитуды зависят от давл. CS_2 . Эффект связан с ростом в системе только крупных частиц. Лишь после их осаждения, к-рое происходит периодически, начинается зародышеобразование и рост малых частиц. Дана модель возникновения осцилляций. Размеры осаждающихся частиц также обнаруживают осцилляции во времени около среднего значения 1 мкм. Указано, что эффект ЛС может быть использован практически для визуализации конвективных движений в газовых средах.

В. Е. Скурат

CS₂

Дм. 18371 1983

5 Л259. Прямые измерения УФ-спектра поглощения при переходах $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ в охлажденном истечением из сопла CS₂. The direct ultraviolet absorption spectrum of the $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ transition of jet-cooled CS₂. Hemley R. J., Leopold D. G., Roebber J. L., Vaida V. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 11, 5219—5227 (англ.)

В области 47 750—53 200 см⁻¹ измерены спектры поглощения CS₂ [переход $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$], охлажденного сверхзвуковым истечением из сопла в смеси с буферным газом. Регулировкой состава и давления последнего достигались различные колебательные т-ры CS₂

М.А.

ф. 1984, 18, № 5

(≤ 300 K) при глубоком (< 10 K) вращательном охлаждении молекул, что облегчило точное определение частот и относит. интенсивностей переходов с нулевого и возбужденных колебательных уровней основного состояния. Исходя из качеств. анализа спектра в средней части диапазона ($49\,000\text{--}51\,000\text{ см}^{-1}$) сделан вывод о том, что его ровибронная структура в большей степени соответствует квазилинейной возбужденной молекуле, нежели симметричному волчку. Существенное усложнение структуры спектра с ростом энергии возбуждения предположительно связано с усилением ангармоничности состояний CS_2 .

С. В. Литке

CS₂

DM. 18371 1983

9 B1130. Прямой ультрафиолетовый спектр поглощения в области перехода $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ охлажденного в струе CS₂. The direct ultraviolet absorption spectrum of the $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ transition of jet-cooled CS₂. Hemley R. J., Leopold D. G., Roebber J. L., Vaida V. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 11, 5219—5227 (англ.)

В области 47 750—53 200 см⁻¹ с разрешением ~0,2 Å измерены спектры поглощения молекул CS₂, переохлажденных в сверхзвуковой струе. Путем подбора состава газа-носителя получены спектры CS₂ в области перехода $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ с низкой вращательной (<10 K) и высокой колебательной (~300 K) т-рой (CS₂:Ar = 1:10) и с низкой вращательной и низкой колебательной т-рами (CS₂:C₄H₁₀:Ar = 1:2:10). В спектрах наблюдалась структура из кластеров полос, разделенных интервалом ~400 см⁻¹. Эта прогрессия отнесена к переходу из основного состояния CS₂ с линейной конфигурацией на возбужденное 1B_2 с угловой конфигура-

Vi, M. N.

X. 1984, 19, 49

цией. Идентифицированы переходы на уровни (v_1', v_2') , $(v_1'+1, v_2'-1)$, $(v_1'-1, v_2'+1)$, $(v_2'+2, v_1'-2)$ и т. д. из основного и первых возбужденных колебательных уровней нижнего состояния. Установлено, что в возбужденном состоянии симм. вал. и деф. колебания имеют близкую частоту. Наблюдаемые нерегулярности структуры в области ниже $49\,000\text{ см}^{-1}$ объяснены сильным взаимодействием этих колебаний. В области франк-кондоновского максимума выделено две более регулярные подсерии с интервалами 392 и 426 см^{-1} , в каждую из к-рых вносят вклад деф. и вал. кол. в возбужденном состоянии. Указано, что вращательная структура полос в области $49\,000\text{—}51\,000\text{ см}^{-1}$ плохо описывается моделью почти симм. волчка и соответствует линейной или квазилинейной молекуле. В области $51\,000\text{ см}^{-1}$ вибронная структура усложняется, что объясняется увеличением ангармонич. взаимодействия между v_1' и v_2' . Отмечено, что для более детального анализа необходимо изотопозамещение по ^{13}C и ^{34}S .

С. Б. Осин

ТИТ

CS₂

Om. 18371

1983

100: 14744r The direct ultraviolet absorption spectrum of the $\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ transition of jet-cooled carbon disulfide. Hemley, R. J.; Leopold, D. G.; Roebber, J. L.; Vaida, V. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(11), 5219-27 (Eng). The absorption spectrum of the linear $\rightarrow$ bent $\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ transition of jet-cooled CS₂ is reported at 47,750-53,200 cm⁻¹. Adjustment of diluent gas compn. enables the prepn. of rotationally cold (<10 K)/vibrationally hot (~300 K) and rotationally cold/vibrationally cold samples. The collapse of rotational envelopes on cooling facilitates the accurate detns. of frequencies and relative absorption intensities of transitions both from the zero point level and from excited vibrational levels of the ground electronic state. At 49,000-51,000 cm⁻¹, in the region of the Franck-Condon max., a simple vibronic pattern emerges involving 2 upper state vibrational modes contg. both stretching and bending contributions. In this region of the spectrum, the upper state rotational structure diverges from that of a nearly sym. top and approaches that of the linear or quasilinear mol. At higher energies, the vibronic structure grows in complexity, suggesting increased anharmonic mixing of these nearly degenerate modes.

$$(\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2^+)$$

e. A. 1984, 100, N 2

CS₂

От. 16493

1983

13 Б84. Исследование CS₂ в области энергий потерь 3—10 эВ с помощью спектроскопии энергетических потерь электронов. Study of CS₂ in the 3—10 eV energy range by electron energy loss spectroscopy. Hubin-Franskin M.-J., Delwiche J., Poulin A., Lecerf B., Roy P., Roy D. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 1200—1212 (англ.)

спектр

С помощью спектров энергетич. потерь электронов (СЭПЭ) исследован спектр возбужденных состояний молекулы CS₂ в газовой фазе в области энергий возбуждений 3—10 эВ. Измерения СЭПЭ проводились при различных энергиях перв. пучка электронов (1—100 эВ выше порога возбуждения) и углах рассеяния 4—90°. Высокая разрешающая способность, достигнутая при измерениях СЭПЭ (~25 мэВ), позволила провести детальный анализ колебательных прогрессий и ридберговских серий в СЭПЭ. Определение симметрии и типа возбужденных состояний проводилось на основании исследованной энергетич. и угловой зависимости дифференц. сечений возбуждения исследованных электронных

Х. 1983, 19, N 13

переходов в CS_2 . СЭПЭ в области энергий потерь 6—10 эВ, измеренный при энергии перв. пучка электронов 60 эВ, позволил провести реинтерпретацию и новую классификацию состояний в данной области энергий. Состояния в области энергии возбуждений 6—10 эВ отнесены к 10 ридберговским сериям, сходящимся к основному состоянию $x^2\Pi_g$ иона CS_2^+ . Переходы с энергиями 6,749 и 6,827 эВ отнесены к запрещенному по симметрии и оптически разрешенному, соотв., переходам в состояния $^1\Pi_g$ и $^1\Pi_u$. Исследования СЭПЭ при малых энергиях перв. электронного пучка и больших углах рассеяния позволили определить ранее неизвестные электронные состояния с энергиями возбуждения в области 3—4 эВ. В области прогрессии с энергией $\sim 6,6$ эВ обнаружено новое триплетное состояние, в то время как предположительный триплетный характер ряда состояний CS_2 , изученных ранее, в данных исследованиях не подтвердился.

И. А. Тополь.

CS₂

Om. 16493

1983

98:116407r Study of carbon disulfide in the 3-10 eV energy range by electron energy loss spectroscopy. Hubin-Franskin, M. J.; Delwiche, J.; Poulin, A.; Leclerc, B.; Roy, P.; Roy, D. (Dep. Phys., Univ. Laval, Quebec, PQ Can. G1K 7P4). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(3), 1200-12 (Eng). Electron impact energy loss spectra were obtained in CS₂ in the energy loss range of 3-10 eV with high and medium energy resolu. Measurements were performed at various incident electron energies (~10-100 eV) and scattering angles (4°-90°). The high energy resolu. (~25 meV) has made possible the detailed anal. of the vibrational progressions and Rydberg series, and some identifications are supported by the plots of the differential cross sections of the studied transitions. New bands are evidenced in the region of the low-lying states 3-5 eV and classifications are proposed. The features appearing between 6.5 and 10 eV are classified into 10 Rydberg series converging to the $\tilde{X}^2\Pi$, ground state of CS₂⁺, and assignments are proposed for most of them. New triplet features are also evidenced around 6.6 eV, while the triplet character proposed by F. R. Greening and G. W. King (1976) for some transitions is not confirmed.

Pugeten.
CocmoXmuu

C.A. 1983, 98, N 14

CS₂

От 16493 1983

8 Д537. Исследование CS₂ в области энергий 3—10 эВ с помощью спектроскопии энергетических потерь электронов. Study of CS₂ in the 3—10 eV energy range by electron energy loss spectroscopy. Hubin-Fran-skin M.-J., Delwiche J., Poulin A., Leclerc B., Roy P., Roy D. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 1200—1212 (англ.)

спектр, $\tilde{\epsilon}$;

С помощью спектроскопии неупругого рассеяния электронов исследованы спектры возбуждения молекулы CS₂ в области энергий 3—10 эВ. Измерения проводились с аппаратным разрешением ~25 и 90 мэВ при различных начальных энергиях электронов в интервале 10—100 эВ и углах рассеяния 4—90°. Выполнен анализ ридберговских серий и колебательной структуры спектров. Обнаружен ряд новых электронных переходов, в том числе не наблюдавшаяся ранее триплетная структура в области 6,6 эВ. Уточнена идентификация ридберговских серий, сходящихся к ионному состоянию X²Π_g. Библ. 41.

А. В. Н.

90, 1983, 18, № 8

CS₂

Оммух 16486

1983

Kovacs B.,

фотометр. J. Chem. Phys., 1983,
спектр. 78, N4, 1684-1692.

CS₂

1983

Левинский А. А.,
Продринков В. М.

поверхностный
потенциал.
энергия.

Хелленбург.
Известия, 1983, 17,
N4, 328-330.

(ссылка. CO₂; III)

CS₂

1983

1 Л216. Индуцированные взаимодействиями спектры жидкого CS₂. Исследование методом численного моделирования. The interaction induced spectra of liquid CS₂. A computer simulation study. Madden P. A. Tildesley D. J. «Mol. Phys.», 1983, 49, № 1, 193—219 (англ.)

Рассчитаны индуцированные межмолекулярными взаимодействиями спектры жидкого CS₂ в области запрещенных правилами отбора полос: вращательной и ν_1 в ИК-поглощении и ν_3 в комб. рас. Получены выражения для индуцированного дипольного момента и поляризуемости при двух- и трехчастичных взаимодействиях, определены интегр. интенсивности полос и методом численного моделирования рассчитаны временные корреляционные ф-ции дипольного момента и поляризуемости. Вычислены контуры полос для разных т-р в интервале 191—294 К. Рассчитанные данные хорошо согласуются с экспериментальными, исключение составляет

спектр

ср. 1984, 18, №1

форма далеких крыльев полос, что связано с несовершенством модели. Проведенные расчеты подтверждают важность роли трансляционного движения в формировании полос и определяющую роль бинарных взаимодействий в интенсивности полос. Библ. 29. М. В. Т.

CS₂

1983

99: 221433q Infrared bands of carbon disulfide, ammonia, and water vapor in selected spectral regions. Manheim, Jon Richard (Ohio State Univ., Columbus, OH USA). 1983. 259 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8318398. From *Diss. Abstr. Int. B* 1983. 44(4). 1165.

(cncxmp)

10(72) NH₃, H₂O

c.A. 1983, 99, N 26

CS₂

1983

16 Б150. Кластерное разложение волновой функции. Спектр ионизации внешних и внутренних валентных уровней CS₂ и COS. Cluster expansion of the wavefunction. Outer- and inner-valence ionization spectra of CS₂ and COS. Nakatsuji Hiroshi. «Chem. Phys.», 1983, 76, № 2, 283—293 (англ.)

спектр



(+2)

В рамках методов симметризованных кластеров (СК) и конфигурац. взаимодействия с учетом СК (СК КВ) рассчитаны спектры фотоионизации внешних и внутренних электронных оболочек молекул CO₂, CS₂ и COS. Исследована зависимость теор. фотоэлектронных спектров (ФЭС) от расширения базиса сгруппированных гауссовых функций (ГФ) за счет поляризац. *d*-ГФ на каждом из атомов. Хорошее соответствие между теор. и эксперим. ФЭС как для внешней, так и внутренней области было достигнуто при учете в методе СК КВ 3- и 4-электронных возбужденных конфигураций. В COS

X. 1983, 19, N 16

не удалось воспроизвести в расчете правильного порядка следования энергий ионизации $Mo\ 2p$ и $9s$. Расчеты относит. интенсивностей ФЭС показали, что во внешней валентной области ФЭС относит. интенсивности пиков составляют более, чем 0,8, и одночастичная картина ионизации является оправданной. Для ионизации внутренних валентных МО происходит сильное смешивание конфигураций, соотв. одноэлектронной ионизации, и мультипольных возбуждений (МВ) в процессе ионизации, что приводит к стиранию отличий между основными и сателлитными пиками ФЭС. На основании данных расчетов проведено систематич. отнесение структур ФЭС и анализ подобия и отличия ФЭС 3 исследованных молекул. Показано, что процесс МВ приводит к возбуждениям электрона на сильно разрыхляющую МО, и геометрия соотв. состояний может сильно отличаться от геометрии основного состояния молекулы. Как следствие, изменение геометрии вызывает уширение ФЭС во внутренней валентной области.

И. А. Тополь

CS₂

Дм. 16467

1983

8 Д548. Ударно-индуцированные изменения в электронных спектрах жидкого CS₂. Shock-induced changes in the electronic spectra of liquid CS₂. Ogilvie Kendall M., Duvall George E. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 3, 1077—1087 (англ.)

Электрон.
Спектры

Описана эксперим. методика, позволяющая получать разрешенные во времени спектры пропускания и отражения тонких пленок жидкого CS₂, подвергающихся последовательным ударным возмущениям. Полученные авторами спектры пропускания в ближней УФ- и видимой областях демонстрируют сдвиг красных краев полос спектра поглощения при увеличении давления. Так, при давл. 55 кбар ослабление проходящего света на-

р. 1983, 18, N 8

блюдается в интервале длин волн 250—410 нм, а при
больших длинах волн оно отсутствует. При давл.
120 кбар свет ослабляется во всей видимой области.
Библ. 21. М. Т.

CS₂

1983

Ohwada Ken.

Paerem
cer. noem. Spectrochim. acta, 1983,
A39, N 2, 181-187.

(● cer. CO₂; III)

CS₂

Om. 16388

1983

UK-спектр,
поперза-
щиз час-
том

Ovaska M., Kivinen A.,
J. Mol. Spect.,
1983, 98, N1-2,
19-26.

CS₂

1983

1 Д153. Исследование неэмпирическим методом корреляции электронов остова и валентных электронов. An ab initio study of core-valence correlation. Part-ridge Harry, Bauschlicher Charles W., Jr., Walch Stephen P., Liu Bowen. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 4, 1866—1873 (англ.)

В расчетах двухатомных молекул щелочных металлов ранее были получены завышенные значения для длин связей. Так, после учета релятив. эффектов у молекулы CS₂ длина связи оказалась на 0,5 а₀ больше эксперим. значения (Walch S. P. et al. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, 54). Показано, что результаты расчета длин связей, потенциалов ионизации и электронного сродства значительно улучшаются, если учитывается взаимодействие состояний остова и валентной оболочки. Т. обр. удастся получить наиболее удовлетворительные величины для длин связей и энергий связей у рассматриваемых молекул.

Ю. Дмитриев

М.П.

ср. 1984, 18, N1

CS₂

1983

2 Б1135. Влияние магнитного поля на дискретную и непрерывную флуоресценцию CS₂. The effect of a magnetic field on discrete and continuum CS₂ fluorescence. Silvers S. J., McKeevet M. R., Chawla G. K. «Chem. Phys.», 1983, 80, № 1—2, 177—182 (англ.)

При воздействии магнитного поля (0—18 кГс) исследованы св-ва флуоресценции (Ф), возбуждаемой азотным лазером, паров CS₂ (I) при давл. 5—400 мТорр. Спектр Ф I представляет дискретные полосы, наложенные на непрерывный спектр. Полосы Ф являются последовательностями электронно-колебательных переходов с возбужденного уровня T¹A₂, а появление континуума Ф вызвано процессами столкновительной и возможно внутримолек. релаксации. Магнитное поле величиной 18 кГс тушит 75% дискретной Ф, не воздействуя на ее время жизни. Тушение дискретной Ф объясняется зеемановской расстройкой линий возбуждения и поглощения. Непрерывная Ф частично тушится в поле 18 кГс: при давл. 1340 мТорр тушится 20% Ф. С понижением давл. I процент тушения непрерывной Ф I уменьшается. При давл. 25 мТорр тушения непрерывной Ф не наблюдается.

Н. Н. Морозов

спектр

х. 1984, 19,
42

CS₂

1983

4 Л387. Действие магнитного поля на дискретную и непрерывную флуоресценцию CS₂. The effect of a magnetic field on discrete and continuum CS₂ fluorescence. Silvers Stuart J., McKeeever Mark R., Chawla Gunjit K. «Chem. Phys.», 1983, 80, № 1—2, 177—182 (англ.)

Спектр флуоресценции паров CS₂ при возбуждении излучением азотного лазера состоит из дискретных полос, наложенных на континуум. Эти два вида флуоресценции различаются временем высвечивания. Исследовано влияние магн. поля напряженностью до 18 кГс на интенсивность и время флуоресценции. Обнаружено значительное тушение дискретной флуоресценции магн. полем, которое объясняется зеемановским сдвигом уровней. Непрерывная флуоресценция также тушится магн. полем, однако эффективность этого процесса уменьшается с уменьшением давления пара и тушение прекращается при 20 м.мм рт. ст. Природа тушения непрерывного спектра флуоресценции окончательно не выяснена.

Е. П. Смирнов

флуоресц.

ф. 1984, 18, № 4

CS₂

1983

20 Б185. КР- и ИК-спектры твердого углероддиселенида. Raman and infrared spectra of solid carbon diselenide. Torrie B. H., Andrews B., Anderson A., Powell B. M. «J. Raman Spectrosc.», 1983, 14, № 2, 96—98 (англ.)

При т-рах 20—205 К измерены КР- и ИК-спектры в области 30—1800 см⁻¹ поликрист. CSe₂ (I). Поскольку возбуждение спектра КР излучением с λ 480,0 нм вызывало разложение образца, использовали λ 514,5 и 632,8 нм. Сложный контур полосы ν_1 в области 360—370 см⁻¹ в спектре КР I разделен на 5 компонент с учетом относительного содержания изотопов ^{76,79,80,82}Se. Отмечено сходство ИК- и КР-спектров I в НЧ-области со спектрами CS₂ (II), что объясняется однотипной центросимм. орторомбич. структурой I и II (пространственная группа C_{2h}¹⁸; Z=2, позиционная симметрия C_{2h}). В области частот внутренних колебаний 300—1625 см⁻¹ в спектре КР I проявляется только

Vi.

X. 1983, 19, N20

активное в КР колебание ν_1 и обертона $2\nu_2$, тогда как в спектре КР II наблюдался ряд составных частот, в том числе запрещенных в КР, активизированных за счет наличия разных изотопов S. Хотя изотопич. состав I разнообразнее, чем II, тем не менее спектры I лучше соответствовали простым теоретико-групповым предсказаниям, сделанным на основе структуры типа II. На основании монотонного убывания с ростом t -ры от 20 до 205 К частот колебаний решетки I в интервалах 63—55 и 55—45 см^{-1} сделан вывод об отсутствии фазовых переходов в I в изученном интервале температур.

А. Н. Курский



CS₂

1983

Von Nissen W.

рацем
соединений
и их свойств

Mol. Ions: Geom. and Elec-
tron. Struct. Proc. NATO
Adv. Study Inst. Isle of
Kos. Sept. 30-Oct. 10,
1980. New York; London,
1983, 355-406.

(см. CS; III)

CS₂

[Om. 16684]

1983

Pu gdem.
nepexote

98: 152097y Study of sulfur-containing molecules in the EUV region. III. Photoexcitation of carbon disulfide. Wu, C. Y. Robert; Judge, D. L. (Space Sci. Cent., Univ. South. California, Los Angeles, CA 90089 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(5), 2180-3 (Eng). By using synchrotron radiation as a continuum background, the absorption cross section of CS₂ was measured using a double ionization chamber. The cross sections range from 4 to a max. value of 65 Mb in the 175-760 Å region. Two new Rydberg series X and XI were identified and apparently converge to the $\bar{D} \Pi_u$ state of CS₂⁺ at 16.943 eV.

C. A. 1983, 98, N18.

CS₂

Om. 16684

1983

10 Д503. Исследования серусодержащих молекул в дальней УФ-области. Ч. III. Фотовозбуждение молекул CS₂. Study of sulfur-containing molecules in the EUV region. III. Photoexcitation of CS₂. Wu C. Y. Robert, Judge D. L. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2180—2183 (англ.)

С использованием синхротронного излучения и двойной ионизационной камеры в области 17,5—76,0 нм получена спектральная зависимость сечения фотопоглощения молекул CS₂. В спектрах идентифицированы две ридберговские серии X и XI, сходящиеся к состоянию $\bar{D}^2\Pi_u$ иона CS₂⁺; энергия которого равна 16,943 эВ. Ч. II. см. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 4301. Библ. 28. М. Т.

спектр

(H) 

ср. 1983, 18, N10



CS₂⁺ (Li)

CS₂

От. 16684 1983

16 Б1322. Изучение серусодержащих молекул в крайней УФ-области. III. Фотовозбуждение CS₂. Study of sulfur-containing molecules in the EUV region. III. photoexcitation of CS₂. Wu Robert C. Y., Judge D. L. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2180—2183 (англ.)

спектр,
Si;

С использованием синхронного излучения в области длин волн 175—760 Å (энергии фотонов 70—16 эВ) при разрешении ~1 Å зарегистрирован спектр поглощения CS₂. При помощи двойной ионизационной камеры измерены абс. сечения поглощения света, к-рые варьируют от 4 Мбарн при 175 Å до максим. значения 65 Мбарн при 760 Å. Отождествлены две новые ридберговские серии X и XI, обусловленные переходами из состояний $nd\pi$ (или $n\pi\pi$) и $nd\sigma$ (или $n\pi\sigma$) и сходящиеся к $D^2\Pi_u$ -состоянию иона CS₂⁺ при 16,943 эВ (731,7 Å). В. Е. Скурат

X. 1983, 19, N 16

CS₂

1984

101: 140110q High-resolution infrared spectra of the $\nu_3-\nu_1$ band of carbon sulfides ($^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$) and ($^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$). Baeten, Edith; Blanquet, Ghislain; Walrand, Jacques; Courtoy, C. P. (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame, B-5000 Namur, Belg.).

Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1 1983 (Pub. 1984). 97(4), 229-41 (Fr). The $\nu_3-\nu_1$ band of $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ was analyzed by using a dual-grating IR spectrometer. For $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ the band was obsd. with a resolu. of $\sim 0.07 \text{ cm}^{-1}$. The $(\nu_2^1 + \nu_3) - (\nu_1 + \nu_2^1)$ hot band was also obsd. for $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$. Rotational consts. for both isotopic mols. are given.

UK chem
физическое
химическое

C.A. 1984, 101, N 16

CS₂

DM. 21184

1984

10 Л154. Спектры молекул CS₂ в области $\nu_3-\nu_1$ при возбуждении перестраиваемым по частоте диодным лазером. Tunable diode laser spectra of the $\nu_3-\nu_1$ region of CS₂. Baeten Edith, Blanquet Ghislain, Walrand Jacques, Courtoy C. P. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1286—1292 (англ.; рез. фр.)

Получены ИК-спектры (900—850 см⁻¹) молекул CS₂ в газовой фазе при давл. $5 \cdot 10^{-4}$ мм рт. ст. при возбуждении перестраиваемым по частоте диодным лазером со спектральным разрешением $5 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹. Проведен анализ вращательных компонент ИК-полос колебаний этих молекул. Точность определения положения полос в спектре составляла 10^{-3} см⁻¹. Наблюдаемые более 2250 линий приписаны 8 переходам в молекулах ¹²C-³²S₂, ¹²C³²S³³S и ¹²C³²S³⁴S. Рассчитаны значения вращательных постоянных изученных молекул. Частота центра ИК-полосы $\nu_3-\nu_1$ молекул ¹²C³²S₂ равна $877,3562 \pm 0,0006$ см⁻¹. Обсуждены возможные условия для регистрации ИК-спектра высокого разрешения молекул CS₂ в области частоты колебания ν_3 .

И. В. А.

М.П., Vi;

ср. 1985, 18, №10

CS₂

(Om. 20126)

1984

Carter S., Murrell J. N.

op-ue
nomeres.
Heepue,
(X¹⁻2g⁺)

Croatia Chemical
acta, 1984, 57(3)
355-365.

CS₂

1984

Chin S., Person W. B.

расчёт
сум.
полей.

J. Phys. Chem., 1984,
88, N3, 553 - 559.

(сум. CO^+ ; III)

1984

CS₂

10 Л188. ИК-полосы изотопического сероуглерода. Infrared bands of isotopic carbon disulfide. D' Cunha Romola, Seliskar Carl J., Manheim J. R., Rao Narahari K. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 3, 401—404 (англ.)

Получены ИК-спектры (2900—2000 см⁻¹) молекул сероуглерода (I) и их изотопич. аналогов (³²S, ³⁴S, ¹³C и ¹²C) в газовой фазе при давл. 1—10 мм рт. ст. со спектральным разрешением 0,01 см⁻¹. Проведен анализ вращательной структуры ИК-полос колебаний I. Идентифицированы компоненты вращательной структуры ИК-полос, соответствующих вращательным переходам типа 02°1←00°0 и 03°1←01°0. Вычислены значения частот составных колебаний $\nu_1 + \nu_3$ в спектрах I. Рассчитаны значения вращательных постоянных и молекулярных постоянных I в колебательно-возбужденных состояниях. Отмечено удовлетворительное согласие данных расчета и наблюдаемых значений частот полос в колебательно-вращательных спектрах I и их изотопически-замещенных аналогов в газовой фазе. Библ. 12.

И. В. А.

И. М. П., геометр.
структура

сб. 1984, 18, № 10

CS₂

1984

23 Б1287. Инфракрасные полосы изотопов дисульфид-углерода. Infrared bands of isotopic carbon disulfide. D'Cunha Romola, Seliskar Carl J., Mannheim J. R., Rao K. Narahari. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 3, 401—404 (англ.)

ИК-спектры смеси изотопов дисульфидуглерода исследованы в области 3—5 мкм (2000—2900 см⁻¹) на фурье-спектрометре с разрешением 0,01 см⁻¹. Спектры записаны при комн. т-ре и давл. 1—10 Торр, эффективная длина оптич. пути составляла 50 см. Спектральные линии калибровались относительно линий СО. В области 2300—2350 см⁻¹ найдены две новые полосы ¹²C³²S³⁴S. Они отнесены к $\Sigma \rightarrow \Sigma$ -переходу 02°1 ← 00°0 и П—П-переходу 03°1 ← 01°0. $\Sigma \rightarrow \Sigma$ -полоса интенсивная и хорошо отделена от др. полос, в П—П-полосе наблюдается для $J > 13$ структура l-удвоения. Обработка спектров проводилась МНК по программе Заре («J. Mol. Spectrosc.», 1973, 46, 37), составленной в приближении изолированной полосы. В результате обработки спект-

спектр, М.А.

Х. 1984, 19, № 23

ров впервые наблюдаемых полос $2\nu_2$, $3\nu_2 - \nu_2$ $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$
 и полос $\nu_1 + \nu_3$ остальных изотопов $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$, $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{33}\text{S}$,
 $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$, и $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ определены центры полос ν_0 , эффектив-
 ные вращательная B_v и центробежная D_v постоянные
 для возбужденных колебательных состояний, включен-
 ных в анализ спектров. Из анализа ТС в спектре
 $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ определена постоянная l -удвоения q , к-рая
 составляет величину $7,778 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ для 01¹0-уровня и
 $13,71 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ для 03¹1-уровня. Эти величины для q
 $^{12}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ оказались сравнимыми с соотв. величинами
 для $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$ $7,695 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ и $14,44 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, опреде-
 ленными ранее. Для исследованных ранее полос, спект-
 роскопич. постоянные определенные в этой работе со-
 гласуются в пределах эксперим. ошибок с известными
 величинами.

В. М. Михайлов

CS₂

1984

' 100: 76564r Infrared bands of isotopic carbon disulfide. D'Cunha, Romola; Seliskar, Carl J.; Manheim, J. R.; Rao, K. Narahari (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, OH 43210 USA). *J. Phys. Chem.* 1984, 88(3), 401-4 (Eng). A study of the IR spectra of isotopically enriched CS₂ in the region 3-5 μ m obtained at 0.01-cm⁻¹ resolu. led to the identification and interpretation of 2 new band systems of ¹²C³²S³⁴S, 0201 $\leftarrow$ 00⁰⁰ and 03¹¹ $\leftarrow$ 01¹⁰. For the ($\nu_1 + \nu_3$) bands of ¹²C³²S³⁴S, ¹²C³²S³³S, ¹²C³²S₂, and ¹³C³²S₂ which also appeared in the spectra recorded, improved mol. consts. were obtained for the levels involved.

UK chemp.
изомонжаруш.

C.A. 1984, 100, N 10

CS₂

Am. 20022

1984

3 Л238. УФ-спектры высоко колебательно-возбужденных молекул CS₂. Ultraviolet spectra of vibrationally highly excited CS₂ molecules. Dove J. E., Hippler H., Plach J., Troe J. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 3, 1209—1214 (англ.)

При помощи лазерного возбуждения на длинах волн 308 и 351 нм получены высоко колебательно возбужденные молекулы CS₂ с энергиями вплотную к диссоциативному порогу основного электронного состояния. Проведено сравнение полученных УФ-спектров с УФ-спектрами молекул CS₂, возбуждаемых термически в ударных волнах при т-рах до 4000° К. Библ. 39.

А. В. Головин

спектр

ф. 1985, 18, № 3

CS₂

От. 20 022

1984

3 Б4452. Ультрафиолетовые спектры молекул CS₂ при сильном колебательном возбуждении. Ultraviolet spectra of vibrationally highly excited CS₂ molecules. Dove J. E., Hippler H., Plach J., Troe J. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 3, 1209—1214 (англ.)

В области 190—500 нм измерен коэф. УФ-поглощения CS₂ (0,01—1% в Ar), возбужденного до энергий, близких к пределу диссоциации основного состояния, лазером (308 и 351 нм) и ударной волной (т-ра 800—4000 К). Установлено соответствие УФ-спектров поглощения CS₂ при любом (оптич. или термич.) способе возбуждения, количественно объясняемое зависимостью коэф. поглощения не от функции распределения, а только от средней энергии возбуждения.

Л. Ю. Мельников

УФ спектр

X. 1985, 19, N3

CS₂

1984

/ 101: 100559m Study of interband absorption of ferromagnetic substances based on ellipsometric measurements. Drozd, P. I.; Poperenko, L. V.; Shaikovich, I. A. (USSR). *Magnit. Svoistva Kristal. i Amorf. Materialov, Irkutsk* 1983, 147-9 (Russ). From *Ref. Zh., Fiz. (A-D)* 1984, Abstr. No. 6N1066. Title only translated.

Коды уровни
влияния
мощности

с. А. 1984, 101, N 12

1984

CS₂

18 Б4252. Лазерно-возбужденная электронная флуоресценция. Самогашение и тушение паров CS₂. Laser-excited electronic fluorescence: self-quenching and quenching of CS₂ vapour. Dueñas J. A., Cabello A. «Nuovo sim.», 1984, D3, № 3, 578—588 (англ.; рез. ит., рус.)

Методом лазерно-индуцированной флуоресценции (Фл) (импульсный лазер на N₂, свет 3371 А, длительность импульса 10 нс, энергия 2 мДж) изучено тушение электронно-возбужденных состояний CS₂ (давл. 0,01—1 Торр). Константа скорости тушения короткоживущей Фл при 4480 А (свет 4480 и 5860 А выделяли с помощью интерференц. фильтров с полушириной полосы пропускания ~80 А) $k_s = 5,5 \cdot 10^{-10}$, а долгоживущий $k_e = 1,6 \cdot 10^{-10}$ см³/(молекула·с). Для Фл при 5860 А время жизни короткоживущей компоненты τ не зависит от давл., CS₂, а $k_e = 1,0 \cdot 10^{-10}$ см³/(молекула·с). Отмечается, что интенсивность Фл при 5860 А нарастает значительно дольше, чем при 4480 А. Для тушения Фл CS₂ при 5860 А молекулами CO₂ $k_e =$

X. 1984, 19, N18

$= 0,81 \cdot 10^{-10}$, $k_s = 2,7 \cdot 10^{-10}$ см³/(молекула·с), а при 4480 А $k_e = 0,94 \cdot 10^{-10}$, $k_s = 3,88 \cdot 10^{-10}$ см³/(молекула·с). Тушение Фл при 4480 А молекулами CH₃CN происходит с $k_s = 7,61 \cdot 10^{-10}$ см³/(молекула·с). При давл. CH₃CN $\geq 0,1$ Торр тушение Фл при 4880 и 5860 А не подчиняется зависимости Штерна — Фольмера: время жизни Фл достигает постоянного значения, не изменяющегося с ростом давл. CH₃CN. Считается, что свечение CS₂ происходит из состояний ¹A₂ и ³A₂. Независимость τ от давл. (при давл. < 0,1 Торр) показывает, что Фл при 4480 А происходит из состояния ¹A₂ после колебательной релаксации, эффективно протекающей даже при давл. < 0,01 Торр. Две компоненты излучения при 5860 А из состояния ³A₂ обусловлены двумя путями образования ³A₂ из ¹A₂ и существованием процессов колеб. релаксации в триплетном состоянии.

Ю. И. Дорофеев

CS₂

1984

12 Л332. Индуцированная лазером электронная флуоресценция. Самогашение и тушение паров CS₂. Laser-excited electronic fluorescence. Self-quenching and quenching of CS₂ vapour. Dueñas J. A., Cabello A. «Nuovo sim.», 1984, D 3, № 3, 578—588 (англ.; рез. ит., рус.)

В области 448—586 нм получены спектры индуцированных азотным лазером ($\lambda = 337,1$ нм) паров CS₂, а также газовых смесей CS₂ с CH₃CN и CO₂. Давление газовых мишеней варьировалось в диапазоне 0,1—1 мм рт. ст. По эксперим. данным рассчитаны сечения самогашения и тушения синглетных и триплетных состояний CS₂. Анализ структуры спектров в длинноволн. области показал наличие колебательной релаксации синглетного состояния CS₂. Обнаружены два долгоживущих состояния в области 586 нм — одно при низком давлении, другое при высоком. Установлено, что скорости тушения этих состояний молекулами CO₂ близки. По мнению авторов, этот факт свидетельствует о колебательной релаксации триплетного состояния.

М. Т.

спектр

ф. 1984, 18, N 12

CS₂

[Om. 20051]

4.984

Fotakis C., Zervolis D.,
et al.,

срехмр,
Ругоер.
срм

Chem. Phys. Lett., 1984;
110, N 1, 73-78.

CS₂

1984

2 Л220. Излучение интенсивности ИК-полосы колебания ν_1 сероуглерода. IR study on the intensity of ν_1 of carbon disulfide. Kanetsaka Isao, Miyajima Tsuneyuki, Kawai Kiyoyasu. «J. Mol. Struct.», 1984, 118, № 3—4, 195 (англ.)

Получены ИК-спектры (700—600 см⁻¹) чистого жидкого сероуглерода (I) и растворов I в ацетонитриле и циклогексане. Обсуждены изменения интенсивности ИК-полосы валентного колебания ν_1 I при вариации т-ры. Проведен анализ норм. колебаний и определены значения частот колебаний и силовых постоянных связей изолированных молекул I и их димеров. Предположено, что производная дипольного момента связи для колебания ν_1 в значительной мере определяется эффективностью взаимодействия этого колебания с колебаниями ν_2 и ν_3 этих молекул в жидкой фазе, тогда как электр. поля соседних молекул слабо влияют на изменение интенсивности ИК-полосы ν_1 I. Сделан вывод, что взаимодействие молекул I и растворителя приводит к изменению параметров колебательных движений и, соответственно, изменению интенсивности полос в ИК-спектре I. Библ. 25.

И. В. А.

 ν_1 ф. 1985, 18,
N 2

CS₂

Am. 18848

1984

10 Л418. Спектры возбуждения и рассеянной флуоресценции перехода $^1B_2(V) \rightarrow ^1\Sigma_g^+(\bar{X})$ реактивно охлажденного CS₂. Excitation and dispersed fluorescence spectra of the $^1B_2(V) \rightarrow ^1\Sigma_g^+(\bar{X})$ transition of jet-cooled CS₂. Kasahara Hiroshi, Mikami Naohiko, Ito Mitsuo, Iwata Suehiro, Suzuki Isao. «Chem. Phys.», 1984, 86, № 1—2, 173—188 (англ.)

Получены спектры возбуждения флуоресценции и рассеянной флуоресценции в области перехода $^1B_2(V) \rightarrow ^1\Sigma_g^+(\bar{X})$ молекулы CS₂ в реактивной струе. На основании неэмпирич. расчета потенц. кривых возбужденного состояния и с учетом резонанса Ферми проведен анализ колебательной структуры спектров. Согласно расчетам в возбужденном состоянии молекула имеет сильно изогнутую форму ($\theta_{scs} = 131^\circ \pm 5^\circ$, $R_{cs} = 1,645 \pm 0,01$ Å), что подтверждается также нали-

м.п.

ф. 1984, 18, N 10

нием длинных прогрессий деформационного обертона $2\nu_2''$ в спектре флуоресценции. Определены спектроскопич. постоянные состояния ${}^1B_2(V)$ CS_2 и получена аналитич. аппроксимация потенц. кривой по углу изгиба молекулы. Отклонения в распределении интенсивности колебат. полос от франк-кондоновского объясняется ангармонизмом потенц. кривой и зависимостью электронного момента перехода от ядерных координат. Библ. 26.

Е. П. Смирнов

CS₂

от. 18 848

1984

18 B1123. Спектры возбуждения и диспергированной флуоресценции связанные с переходом ${}^1B_2(V) \rightarrow {}^1\Sigma_g^+(X)$, охлажденного в струе CS₂. Excitation and dispersed fluorescence spectra of the ${}^1B_2(V) \rightarrow {}^1\Sigma_g^+(X)$ transition of jet-cooled CS₂. Kasahara Hiroshi, Mikami Naohiko, Ito Mitsuo, Iwata Suehiro, Suzuki Isao. «Chem. Phys.», 1984, 86, № 1—2, 173—188 (англ.)

Измерены спектры возбуждения (область 3000—3300 Å) и флуоресценции CS₂ (переход ${}^1B_2(V) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) в сверхзвуковой струе. Приведены положение и интенсивность полос в спектре возбуждения, положение и отнесение (ν_1'' , ν_2'' , ν_3'') полос в спектрах флуоресценции, возбуждаемых в области четырех интенсивных полос спектра возбуждения [(30530, 30750, 30900 и 31346 см⁻¹, полосы 0—1, 0—0, 1—0). Анализ колебат. структуры перехода выполнен с учетом результатов неэмпирич.

1984,

кометр,
структ.,
м.п., Но;

х. 1984, 19, N 18

расчета (ССП — КВ) адиабатич. потенциальной кривой возбужденного состояния и резонансных взаимодействий типа Ферми между колебат. уровнями основного электронного состояния. Согласно расчету, молекула CS_2 в состоянии $^1B_2(V)$ имеет сильно изогнутую конфигурацию с углом $\Theta = 131 \pm 5^\circ$ и величиной $R(\text{CS}) = 1,645 \pm 0,01 \text{ \AA}$ (вычисл. вращат. постоянные B и $A = 0,1140$ и $3,6 \text{ см}^{-1}$). Это объясняет наличие в спектрах флуоресценции чрезвычайно развитых прогрессии по $2\nu_2''$. Эксперим. значения T_{000} и ν_2' $\text{CS}_2(^1B_2)$ — 30 530 и 370 см^{-1} . Для состояния 1B_2 оценена высота потенциального барьера по координате Θ , $V = 2000 - 2750 \text{ см}^{-1}$. Значения параметров K_2 и K_4 потенциала $V(\Theta) = -K_2 \Theta^2 + K_4 \Theta^4$ равны соотв. $6922 \text{ см}^{-1}/\text{рад}^2$ и $4792 \text{ см}^{-1}/\text{рад}^4$. Аналогичный расчет проведен для состояния $^3A_2(R)$. Значения $R(\text{CS})$, Θ , ν равны $1,644 \text{ \AA}$; 136° и 4800 см^{-1} . Отклонения от франк-кондоновского распределения интенсивностей полос (для гармонич. осцилляторов) в спектрах флуоресценции объяснены существенно ангармоническим характером потенциала и зависимостью момента перехода от координат ядер. В. М. Ковба

CS₂

Dm. 18848

1984

100: 200261f Excitation and dispersed fluorescence spectra of the ${}^1B_2(V) - {}^1\Sigma_g^+(X)$ transition of jet-cooled carbon disulfide. Kasahara, Hiroshi; Mikami, Naohiko; Ito, Mitsuo; Iwata, Suehiro; Suzuki, Isao (Fac. Sci., Tohoku Univ., Sendai, Japan 980). *Chem. Phys.* 1984, 86(1-2), 173-88 (Eng). The fluorescence excitation and dispersed fluorescence spectra of the transition ${}^1B_2(V) - {}^1\Sigma_g^+(X)$ of jet-cooled CS₂ were measured. Vibrational anal. of the spectra was carried out with the aid of ab initio calcns. of the adiabatic potential in the excited state and of a Fermi resonance calcn. of the ground-state vibrational levels. The calcd. potential indicates a drastically bent structure in the excited state ($\theta_{SCS} = 131^\circ \pm 5^\circ$, $R_{CS} = 1.645 \pm 0.01$ Å) which explains the obsd. fluorescence spectra having extremely long progressions of the overtone of bending mode $2\nu_2''$. The electronic origin of the transition was found at 30,530 cm⁻¹ and the irregularly spaced vibronic levels in the excited state were interpreted by a model potential $V(\theta) = -k_2\theta^4$ along the bending coordinate θ with a central barrier height of 2000-2750 cm⁻¹. The anomalous Franck-Condon intensity distribution of the fluorescence spectrum is also discussed in terms of the anharmonic potential and the nuclear coordinate dependence of the transition moment.

 ${}^1B_2(V) - {}^1\Sigma_g^+(X)$

спухнух.
наран,
спектр флуор.

C.A. 1984, 100, N 24

CS₂

1984

/ 102: 102670k Fermi resonance and Raman intensities of carbon disulfide. Montero, S.; Domingo, C.; Wetzel, F.; Finsterhoelzl, H.; Schroetter, H. W. (Inst. Estruct. Mater., CSIC, Madrid, Spain). *J. Raman Spectrosc.* 1984, 15(6), 380-5 (Eng). The gas-phase Raman spectrum of CS₂ was recorded and analyzed in the region of the $\nu_1:2\nu_2$ Fermi resonance. The abs. differential Raman scattering cross-sections and depolarization ratios of the obsd. vibrational transitions are satisfactorily interpreted in terms of 3 bond polarizability parameters and the cubic force const. k_{122} .

($\nu_1, 2\nu_2$)
CKP

e.A. 1985, 102, N 12

CS₂

1984

7 Л214. Резонанс Ферми и интенсивности линий комбинационного рассеяния сероуглерода. Fermi resonance and Raman intensities of carbon disulphide. Montero S., Domingo C., Wetzel F., Finsterhölzl H., Schrötter H. W. «J. Raman Spectrosc.», 1984, 15, № 6, 380—385 (англ.)

Получен поляризационный спектр комб. рас. (630—830 см⁻¹) молекул CS₂ (I) в газовой фазе при возбуждении лазерными линиями 514,5 и 530,9 нм. Проведен теоретич. анализ спектра I в области частоты валентного симметричного колебания ν_1 и обертона колебания ν_2 I. Рассчитаны величины абс. диффер. сечения комб. рас. и степени деполяризации линий комб. рас. I с учетом эффекта резонанса Ферми между состояниями ν_1 и $2\nu_2$. Определены силовые постоянные связей в I. Найдены анизотропия и след тензора комб. рас. для изученных колебаний I. Показано, что наблюдаемый спектр комб. рас. I может быть интерпретирован в рамках теории поляризуемости связей с использова-

ν_1 , сим. пост.
м.п.

ср. 1985, 18, № 7

нием трех независимых параметров тензора комб. рас.
и кубической силовой постоянной связи K_{122} , равной
43 см⁻¹. И. В. А.

Одн
еяни

1984

CS₂

4 Л291. ~~Неупругое рассеяние и тонкая структура~~ сателлитов в УФ-фотоэлектронном спектре высокого разрешения молекулы CS₂. Inelastic scattering and satellite fine structure in the high-resolution UV photoelectron spectrum of CS₂. Reineck I., Wannberg B., Veenhuizen H., Nohre C., Maripuu R., Norrell K.-E., Mattsson L., Karlsson L., Siegbahn K. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1984, 34, № 3, 235—252 (англ.)

спектр

Исследованы зависимости формы полос HeI (58,4 нм) — фотоэлектронные спектры паров CS₂ от давления. В работе применен усовершенствованный спектрометр Уппсальского университета (Швеция), позволяющий определять положение узких линий в шкале энергий с точностью не хуже ± 1 мэВ. Установлено, что интенсивность некоторых компонент колебательной структуры полос, соответствующих образованию иона

ф. 1985, 18, № 4.

CS_2^+ в состояниях $X^2\Pi_g$, $B^2\Sigma_u^+$ и $\bar{C}^2\Sigma_g^+$, зависит от давления CS_2 . Авторами высказано предположение о том, что причиной этой зависимости является неупругое рассеяние фотоэлектронов, образующихся при адиабатич. переходах. Высокие эксплуатационные возможности спектрометра позволили обнаружить колебательную структуру полос, интерпретируемых как сателлиты. Библ. 31. М. Т.

CS₂

1984

5 B1114. Тонкая структура, связанная с неупругим рассеянием и сателлитом, в фотоэлектронных спектрах высокого разрешения CS₂. Inelastic scattering and satellite fine structure in the high-resolution uv photoelectron spectrum of CS₂. Reineck I., Wannberg B., Veenhuizen H., Nohre C., Maripuu R., Norrell K.-E., Mattsson L., Karlsson L., Siegbahn K. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1984, 34, № 3, 235—252 (англ.)

С высоким разрешением (~ 9 МэВ) измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) с возбуждением излучениями He-I и Ne-I для молекул CS₂ в области ионизации верхних валентных уровней. В полученных спектрах идентифицирована обширная колебат. структура полос, связанных с $X^2\Pi_g$, $A_2\Pi_u$, $B^2\Sigma_u^+$ и $C^2\Sigma_g^+$ конечными состояниями иона CS₂⁺. Обнаружено, что относительные интенсивности нек-рых линий в ФЭС зависят от плотности газовой мишени. Этот эффект объяснен

(41)

Х. 1985, 19, 25

спектр

неупругим рассеянием фотоэлектронов с возбуждением различных типов колебаний основного электронного состояния CS_2 . Кроме того в измеренных ФЭС выявлена колат. структура двух сателлитных полос, расположенных в областях значений P_t ионизации 16,5—17,4 и 13,8—14,3 эВ.

О. А. Басченко

CS₂

1984

Spiridonov V. P., Lyutsaren V. S., Butayev B. S.

2, l.

Chem. Phys. Lett.,
1984, 110, N 1, 32-39.

●
(cur. CD₂ ; III)

CS₂

1984

Veenhuisen Hans P.

Экзем-
пляр.
бесплатно
разре-
шено

Acta univ. upsal.

Abstrs Uppsala Diss.

Fac. Sci., 1984, n 742,
24 pp., ● ill.

(с.ч. PH₃ ; III)

CS₂

1984

Заяц А. Ю., Перов А. А.,
Симонов А. П.

спектр,
Ридбер-
говские
соединения

Явления высок. энергии,
1984, 18, N2, 182-183.

●
(ссыл. M25; III)

CS₂

[Dm. 23472]

1985

Blanquet G., Baeten E.,
et al.,

(Pi, u.n.) J. Mol. Spectrosc., 1985,
112, N1, ● 55-70.

CS₂

1985

19 Б1337. Измерения спектра сероуглерода с использованием диодного лазера и общий колебательно-вращательный анализ. Diode-laser measurements of carbon disulfide and general rovibrational analysis. Blanquet G., Baeten E., Cauuet I., Walrand J., Courtoy C. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 1, 55—70 (англ.)

В диапазоне 690—950 см⁻¹ на диодном лазерном спектрометре с использованием многоходовой ячейки Уайта ($l \sim 52$ м, давл. 0,4 мм) измерен спектр поглощения CS₂ (полосы 11¹1—21¹0, 03³1—13³0, 03¹1—13¹0, 20⁰1—30⁰0, 00⁰2—10⁰1, ¹²C³²S₂; 10⁰1—20⁰0, ¹²C³²S³⁴S). Проанализирована (совместно с данными по др. полосам) вращат. структура указанных колебат. переходов и приведены значения ν_0 , B'' , $B' - B''$, D'' , $D' - D''$. Определены значения гармонич. частот колебаний (ω_i), параметров ангармоничности (x_{ij}), параметров резонансного взаимодействия Ферми (k_{122} , λ_i , δ) и колебат.-вращат. взаимодействия (α_i). Приведены также параметры l -удвоения для уровней ($v_1 = 0-2$, $v_2 = 0-3$, $v_3 = 0,1$).

В. М. Ковба

(м.п.)

X. 1986, 19, N 19

CS₂

(М.П.)

1985

2) 11 Л185. Исследование сероуглерода с диодным лазером; общий колебательно-вращательный анализ. Diode-laser measurements of carbon disulfide and general rovibrational analysis. Blanquet Ghislain, Baeten Edith, Cauuet Isabelle, Walrand Jacques, Courtoy C. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 1, 55—70 (англ.)

С помощью диодного лазерного спектрометра получены ИК-спектры поглощения паров CS₂ в области 690—950 см⁻¹ в слое 52 м при давл. 0,4 мм рт. ст. Приведены измеренные с точностью 2·10⁻⁴ см⁻¹ частоты линий 5 разностных полос, включающих колебательные уровни до 4-го порядка молекул ¹²C³²S₂ и полосы 10°1—20°0 ¹²C³²S³⁴S. Для этих полос определены колебательные частоты и вращательные и центробежные постоянные начальных и конечных состояний. С привлечением литературных данных по частотам 40 колебательных переходов найдены гармонич. частоты, все параметры ангармоничности χ_{ij} и параметр y_{222} , а также параметры резонанса Ферми. При анализе учтено влияние резонанса Ферми на вращательные константы. Определены константы l-удвоения для П-состояний. Библ. 23.

М. В. Т.

Ф. 1986, 18, N 11.

CS₂

1985

Chae F.T., McDowell
C.A.

cer. rocce,
Y, Re;

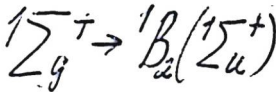
Y. Mol. Street.
1985, 129 (1-2), 169-
-73.

● (cer. F₂; III)

CS₂

1985

17 Б1159. Резонансное комбинационное рассеяние, связанное с переходом ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ CS₂. Resonance Raman scattering in the ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ transition of CS₂. Desiderio R. A., Gerrity D. P., Hudson B. S. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 115, № 1, 29—33 (англ.)



Получены спектры РКР молекулы CS₂ при возбуждении в обл. перехода $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$. ($\lambda_{\text{возб}} = 192, 200, 204, 208, 213, 218, 223$ нм, в возбужденном электронном состоянии молекула имеет симметрию C_{2v}). Приведено положение ($\Delta\nu$) и отнесение полос ($\nu_1 = 0-7, \nu_2 = 0-13, \nu_3 = 0-4$) в спектрах, возбуждаемых в обл. 204 нм (начальное колебат. состояние: 01^10) и 200 нм (начальное состояние 00^00). Все переходы соответствуют $\Delta l = 0$.
В. М. Ковба

Х. 1985, 19, N 17.

CS₂

1985

18 Л192. Резонансное комбинационное рассеяние в переходе ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ молекул CS₂. Resonance Raman scattering in the ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ transition of CS₂. Desiderio R. A., Gerrity D. P., Hudson B. S. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 115, № 1, 29—33 (англ.)

Получены спектры резонансного комб. рас. (200—6000 см⁻¹) молекул CS₂ (I) в газовом потоке при возбуждении набором лазерных линий в диапазоне $\lambda = 192\text{—}223$ нм. Идентифицированы линии фундаментальных колебаний, обертонов, составных частот и «горячих» переходов в ансамбле взаимодействующих состояний I. Установлено резкое увеличение интенсивности комб. рас. I при возбуждении рассеяния в полосе электронного перехода в состояние ${}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ I с $\lambda = 204$ и 200 нм. Предположено, что наблюдаемое распределение интенсивности обертонов симметричного валентного колебания ν_1 и деф. кол. ν_2 согласуется с моделью изогнутой конформации молекул I в электронно-возбужденном состоянии. Сделан вывод, что активизация линий асимметричного валентного колебания ν_3 в спектрах I

спектр, ν_1 ,
сим. пост.

фр. 1985, 18, № 8

обусловлена значительным изменением силовых постоянных связей I при электронном возбуждении. И. В. А.



CS₂

1985

102: 175409s Resonance Raman scattering in the ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ transition of carbon disulfide. Desiderio, R. A.; Gerrity, D. P.; Hudson, B. S. (Chem. Phys. Inst., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 115(1), 29-33 (Eng). Resonance Raman spectra of CS₂ are presented at excitation wavelengths of 204 and 200 nm. Both spectra show activity in the sym. (ν_1) stretch and bending (ν_2) modes consistent with a bent, sym. stretched ${}^1B_2({}^1\Sigma_u^+)$ upper state. In addn., these spectra show activity of the transition involving 2 quanta in the asym. (ν_3) stretch as well as progressions in ν_1 and ν_2 based upon this asym. mode overtone.

$({}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1B_2({}^1\Sigma_u^+))$

CKP

C.A. 1985, 102, N20

CS₂

1985

9 Б1200. Что исследуется в эксперименте по вынужденному комбинационному рассеянию с временным разрешением? What is measured in a time-resolved stimulated Raman experiment? Exter, Martin van, Lagendijk Ad. «Opt. Commun.», 1985, 56, № 3, 191—196 (англ.)

На примере исследования спектра CS₂-(I) в обл. линии $\nu_1 \sim 656 \text{ см}^{-1}$ произведено сравнение экспериментов по ВКР с временным разрешением при использовании 2 и 4 лазерных импульсов. Спектры возбуждались двумя пикосекундными лазерами на красителях с синхронной накачкой от аргонового лазера. Задержка зондирующего импульса (или пары зондирующих импульсов во втором случае) по отношению к импульсу (или паре импульсов) накачки достигала $\sim 40 \text{ пс}$. В 1-м случае можно получать информацию о мнимой части $\text{Im}\chi^{(3)}(-\omega_s, \omega_s, \omega_e, -\omega_e)$, где ω_s — частота стоксова сигнала, ω_l — частота лазерного импульса). Во 2-м можно определять абс. значения $\chi^{(3)}(-\omega_s, \omega_s, \omega_e, -\omega_e)$. При этом в спектрах проявляется вклад электронов в $\chi^{(3)}$.

А. В. Бобров

спектр

X. 1986, 19, 29

CS₂

от 23000

1985

Гершиков А.Т., Скрипко -
нов В.Т. и др.,

расчет
центробеж-
полноток
к
структур-
и колебатель-
параметрам

Вестн. АТУ. Желтый,
1985, 26, № 6, 531-534.



CS₂

1985

Grimsrud Eric P.,
Caldwell Gary, et al.

He;

J. Amer. Chem. Soc.,
1985, 107, N16, 4627-4634.

(cor. SO₂; III)

CS₂

Ом. 22634

1985

1) 4 J1224. Сигма полосы в спектре поглощения $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ в близкой УФ области. Sigma bands in the near-ultra-violet absorption spectrum of $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Hardwick J. L., Seliskar C. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 2, 275—285 (англ.)

С высоким разрешением исследована в спектре поглощения R-система ($^3A_2-^1\Sigma_g$) полос Клемана (3350—3900 Å) молекулы $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Идентифицировано тридцать Σ -полос. В результате вращательного анализа определены колебательные изотопич. сдвиги и вращательные постоянные для уровней (0,2,0) и (0,4,0) основного состояния и уровней с $V_1=0,1$; $V_2=3-11$; $V_3=0,2$ возбужденного состояния молекулы. В. С. Иванов

М.П., Мо;

ф. 1986, 18, № 4

CS₂

OF 22634

1985

7 B1218. Сигма полосы в ближнем ультрафиолетовом спектре поглощения $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Sigma bands in the near-ultraviolet absorption spectrum of $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Hardwick J. L., Seliskar C. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 113, № 2, 275—285 (англ.)

Исследован с высоким разрешением УФ-спектр поглощения (335—390 нм) молекулы $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ (R — система Клемана, переход $\tilde{a}^3A_2 - X^1\Sigma$). Использовали многоходовую ячейку Уайта ($l=6-36$ м, давл. 1—100 мм). Измерена и проанализирована вращат. структура 30 Σ -полос и получены вращат. постоянные для уровней $(0, v_2''=2, 0)$, $(0, v_2''=4, 0)$, (v_1', v_2', v_3') ($v_1'=0, 1$; $v_2'=3-11$; $v_3'=0$ и 2). Наблюдалось также большое число П-, Δ -, Ф- и Г-полос. Дано положение кантов и линий вращат. структуры холодных Σ -полос.

В. М. Ковба

м.п., ν_i

X. 1986, 19, №7.

CS₂

DM-22634

1985

УФ спектр
не использован

103: 186175j Sigma bands in the near-ultraviolet absorption spectrum of carbon-12 disulfide-34 (¹²C³⁴S₂). Hardwick, J. L.; Seliskar, C. J. (Radiat. Lab., Univ. Notre Dame, Notre Dame, IN 46556 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 113(2), 275-85 (Eng). The absorption spectrum of ¹²C³⁴S₂ was examd. at high resolu. at 3350-3900 Å (Kleman's R system). Thirty Σ bands were identified and rotationally analyzed, yielding vibrational isotope shifts and rotational consts. for the (0,2,0) and (0,4,0) levels of the ground electronic state and for levels of the excited electronic state having $\nu_1 = 0$ and 1, $\nu_2 = 3-11$, and $\nu_3 = 0$ and 2.

C.A. 1985, 103, N22

CS₂

1985

Fasien Paul G.,
Stevens Walter J.

n. n.

J. Chem. Phys., 1985,
83, N 6, 2984-2989.

(C₆₀ CO; III).

CS₂

(CM. 2300C)

1985

Joens Jeffrey A.

u.n.

J. Phys. Chem., 1985,
89, N25, 5366-5370.

(Cels. ● OCS; III)

CS₂

1985

5 Л194. Спектры высокого разрешения в далекой ИК-области некоторых легких линейных трех- и четырех-атомных молекул. High resolution far infrared spectra of certain light linear three and four atomic molecules. Jolma Kalevi. «Acta univ. ouluen.», 1985, A, № 173, 1—22 (англ.)

Сборник статей по исследованию ИК-колебательно-вращательных спектров поглощения молекулами CS₂, C₂N₂, N₂O, CO₂, OCS и их изотопными модификациями. Методом фурье-спектроскопии с разрешением (1—0,5) · 10⁻² см⁻¹ и точностью определения частот до 10⁻⁴ см⁻¹ в области 890—210 см⁻¹ измерены положения ~4700 линий вращательной структуры в 60 различных полосах исследованных молекул. Определены положения начал наблюдаемых полос и значения вращательных постоянных для основного колебательного состояния рассмотренных молекул. Отмечено удобство использования измеренных частот линий для калибровки инструментов с высокой разрешающей способностью в области 890—210 см⁻¹. Библ. 52. В. К.

(Bv)

(4)

ор. 1986, 18, N5

CS₂

1985

Kumar Ashok, Meath
William J.

curr
occurrence

Can. J. Phys., 1985, 63,
N 3, 417-427.

(curr. SO₂; III)

CS₂

1985

20 Б1167. Импульсные распределения валентных оболочек и энергии ионизации дисульфида углерода.

Valence-shell momentum distributions and ionization energies of carbon disulfide. Leung K. T., Brion C. E., Fatyga B. W., Langhoff P. W. «Chem. Phys.», 1985, 96, № 2, 227—240 (англ.)

Проведены измерения $(e, 2e)$ -спектров молекулы CS₂, на основании к-рых построены спектр потенциалов ионизации (ПИ) и импульсные распределения (ИР) валентных оболочек CS₂. Измеренные ПИ сопоставлены с лит. данными расчетов энергий ионизации молекулы CS₂ в различных многоэлектронных приближениях. В эксперим. и теорет. спектрах ПИ наблюдается большое число ионизац. состояний при энергиях связи (ЭС) > 20 эВ, что указывает на нарушение одночастичной картины ионизации CS₂. Интенсивный пик при ЭС ≈ 17 эВ от-



(2)

X. 1985, 19, № 20

несен к сателлиту перв. ионного состояния с конфигурацией $(2\pi_u)^{-1}$. Измеренные ИР сопоставлены с теорет. ИР МО, рассчитанными в миним. и расширенном базисах сгруппированных гауссовых ф-ций. Контурные карты электронных плотностей отдельных МО в радиальном и импульсном пространствах использованы для интерпретации формы и атомных характеристик эксперим. ИР. Показано, что использование теорет. ИР, в частности МО $4\sigma_u$ и $5\sigma_g$, позволяет однозначно определить природу сателлитов в спектре ПИ. ИР валентных МО молекулы CS_2 сопоставлены с соотв. ИР МО валентно-изоэлектронной молекулы CO_2 .

И. А. Тополь

CS₂

DM-21332

1985

10 J157. Диодная лазерная спектроскопия четырех изотопных форм CS₂ в области полосы ν_3 . Diode laser spectroscopy of the ν_3 band region of four isotopic forms of CS₂. Lindenmayer Josef, Jones Harold. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 65—73 (англ.)

С помощью диодного лазера получены спектры поглощения паров CS₂ при давл. 0,1—2 мм рт. ст. в области 1450—1550 см⁻¹. Приведены измеренные с точностью 10⁻³ см⁻¹ частоты колебательно-вращательных линий полос ν_3 , $\nu_3-\nu_2$ и $\nu_3-2\nu_2$ молекулы ¹²C³²S₂ и полосы ν_3 молекул ³⁴S¹²C³²S, ³³S¹²C³²S, ¹³C³²S. Для этих полос определены колебательные частоты и эффективные значения вращательных констант *B* и *D* основного и возбужденного колебательного состояния. Уточнена равновесная геометрия молекулы. Библ. 19. М. В. Т.

М. В. Т.;

ср. 1985, 18, N 10

CS₂

От 21332

1985

18 Б1298. Измерения ИК-спектров четырех изотопических форм молекулы CS₂ в области полосы ν_3 на диодном лазерном спектрометре. Diode laser spectroscopy of the ν_3 band region of four isotopic forms of CS₂. Lindenmayer J., Jones H. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 65—73 (англ.)

На диодном лазерном спектрометре измерены ИК-спектры поглощения 4 изотопич. разновидностей молекулы CS₂ в обл. 1450—1550 см⁻¹. Волновые числа линий измерены с точностью до 0,001 см⁻¹ по отношению к известным линиям H₂O и HDO. Выполнен анализ вращат. структуры полосы ν_3 и ряда «горячих» полос молекул C³²S₂, C³²S³⁴S, C³²S³³S и ¹³C³²S₂: идентифицированы линии с $J \leq 145$. Определены значения волновых чисел центров полос, вращат. постоянной и квартичной центробежной постоянной для основного и возбужденных колебат. состояний.

Е. В. Алиева

Vi, M. N;

X. 1985, 19, N 18.

CS₂

[Dm. 21332]

1985

102: 140040n Diode laser spectroscopy of the ν_3 band region of four isotopic forms of carbon disulfide. Lindenmayer, Josef; Jones, Harold (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 110(1), 65-73 (Eng). The diode laser spectrum of a natural sample of the linear mol., CS₂, was measured in the region 1450-1550 cm⁻¹. An abs. frequency calibration of approx. 0.001 cm⁻¹ was achieved by measuring CS₂ absorption lines relative to those of H₂O and HDO and using the abs. wave nos. Band consts. were detd. for the following: C³²S₂; (0, 0, 1) ← (0, 0, 0), (0, 1¹, 1) ← (0, 1¹, 0), (0, 2^{0,2}, 1) ← (0, 2^{0,2}, 0), (1, 0, 1) ← (1, 0, 0); ³⁴SC³²S; (0, 0, 1) ← (0, 0, 0); ³³SC³²S; (0, 0, 1) ← (0, 0, 0); ¹³C³²S₂; (0, 0, 1) ← (0, 0, 0).

(13)

C. A. 1985, 102, N16.

CS₂

[Om. 21632]

1985

исследования.
и параметров.
тепловых
свойств.

Leung K.T., Brion C.E.,
et al.,

Chem. Phys., 1985, 96,
N 2, 227-240.

CS₂

1985

McCrary V. R., Lu R.,
et al.

opomoguce. J. Chem. Phys.,
1985, 83, N 7,
3481-3490.

(cell. CS; III)

CS₂

от 23865

1985

11 Б1188. Ультрафиолетовый спектр прямого поглощения на переходе $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ охлажденных в струе $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. The direct ultraviolet absorption spectrum of the $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ transition of jet-cooled $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$. Rosbber J. L., Vada V. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 6, 2748—2753 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

В области 43 000—54 000 см⁻¹ с разрешением 5—6 см⁻¹ измерены спектры поглощения молекул $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ и $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$, охлажденных в сверхзвуковой струе в смеси с Ar (1:20). Анализ спектров проводили в сравнении со спектрами CS₂ с природным содержанием изотопов. Для всех 3 изотопомеров в указанной обл. наблюдали серии полос, разделенных интервалом 400—450 см⁻¹. Мультиплетная структура интерпретирована переходами на близко расположенные колебат. уровни возбужденного состояния, обусловленные взаимодействием между ν_1 и ν_2 . Наблюдаемые в обл. до 49 000 см⁻¹ прогрессии отнесены к переходам из линейного основного состояния CS₂ на изогнутое возбужденное (1B_2). Из анализа колебат. и K-структуры полос в обл. франк-кондоновского максимума (выше

М.П.

X. 1987, 19, 11

49 000 см^{-1}) показано, что переходы в этой обл. осуществляются на квазилинейное состояние. Измеренные изотопные сдвиги свидетельствовали, что активным в спектре колебанием являлось симм. вал. кол., возмущенное взаимодействием с деформационными колебаниями. С. О.

CS₂

(Im. 23865)

1985

103: 169043x The direct ultraviolet absorption spectrum of the $^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$ transition of jet-cooled carbon disulfide ($^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$). Roebber, J. L.; Vaida, V. (Dep. Chem., Northeast. Univ., Boston, MA 02125 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(6), 2748-53 (Eng). The absorption spectra of $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$, cooled in supersonic expansion are reported and compared with the spectrum of the natural isotope. Cooling these samples eliminated spectral congestion due to inhomogeneous factors and yielded measurements of frequencies and isotopic shifts of bands of $^{13}\text{C}^{32}\text{S}_2$ and $^{12}\text{C}^{34}\text{S}_2$ relative to $^{12}\text{C}^{32}\text{S}_2$. The spectrum is interpreted to reflect a transition from a linear ground state to a bent excited state up to $\sim 49,000\text{ cm}^{-1}$ and to a quasilinear excited state above this energy.

Yp cncmp
now

$^1\Sigma_g^+ \rightarrow ^1B_2(^1\Sigma_u^+)$

C.A. 1985, 103, N20

CS₂

1985

Scarlett M., Taylor P.R.

Chem. Phys., 1985,

101, n1, 17-26.

Sp;

●
(Cur. CO₂; III)

CS₂

[Dm. 21490]

1985

структур.
и атомн-

мизм.
параметры,
теор. расчет
(основн. и

физич. и
взаимодей-
ствия)

Spiridonov V.P., Lyuzarev
V.S., et al.

У. Мол. Крист., 1985,
127, N 3-4, 267-276.

CS₂

(om. 22653)

1985

Spiridonov V.P., Nasarenko
A.Ya., et al.,

re, pac-
ren

J. Mol. Struct., 1985, 124,
N 3-4, 277-286.



CS₂

1986

УД Л137. Спектральные интенсивности в полосе $\nu_3-\nu_1$ CS₂. Spectral intensities in the $\nu_3-\nu_1$ band of CS₂. Dang-nhu M., Blanquet G., Walrand J., Courtoy C. P. «Mol. Phys.», 1986, 58, № 5, 995—1000 (англ.)

В области разностной колебательно-вращательной полосы $\nu_3-\nu_1$, 850—830 см⁻¹, изучен ИК-спектр поглощения CS₂, полученный с помощью перестраиваемого диодного лазера. При $t=297$ К и давл. образца (0,9—6) · 10⁻² бар измерены положения и интенсивности ряда колебательно-вращательных линий, представлена их интерпретация. В результате анализа эксперим. данных определена абс. интенсивность разностной полосы, приведено сравнение рассчитанных интенсивностей линий с наблюдаемыми. Полученные при анализе данные использованы для расчета абс. интенсивности составной полосы $\nu_3+\nu_1$. В. К.

(М.П.)

ф. 1987, 18, № 4

CS₂

1986

8 Л313. Масс-спектры молекулы CS₂ при многофотонной ионизации под действием излучения XeCl-лазера. CS₂ multiphoton ionization mass spectra induced by a XeCl laser. Guan Yifu, Han Jingcheng, Liu Songhao. «Гуансюэ сюэбао, Acta opt. sin.», 1986, 6, № 2, 162—168 (кит.; рез. англ.)

Получены масс-спектры молекулы CS₂ при многофотонной ионизации под действием излучения XeCl-лазера. Исследована зависимость степени фрагментации молекулы от плотности мощности лазерного излучения. Проведено сопоставление масс-спектров, полученных при ионизации электронным ударом и лазерным излучением. На основании полученных эксперим. данных предложен механизм многофотонной ионизации молекулы CS₂. В. А. Е.

масс-
спектры

ср. 1986, 18, № 8

CS₂

1986

11 Л209. Фундаментальные колебания CS₂ как метод оценки влияния матрицы в спектроскопии матрично-изолированных соединений. The fundamental vibrations of CS₂ as probes of matrix effects in matrix isolation spectroscopy. Givan A., Loewenschuss A., Bier K. D., Jodl H. J. «Chem. Phys.», 1986, 106, № 1, 151—159 (англ.)

Получены ИК-спектры молекул ¹²CS₂ и ¹³CS₂, изолированных в матрицах N, Ar, Kr и Xe при t-ре 15—25 K, а также спектры КР матрично-изолированных молекул при возбуждении линиями излучения Ar⁺- и Kr⁺-лазеров. Сопоставлены частоты колебаний этих молекул в твердой фазе и в матрицах. Предположено, что наблюдаемое расщепление и уширение колебательных линий матрично-изолированных молекул обусловлено неэквивалентностью и типом симметрии локальных силовых полей матрицы, взаимодействиями соседних молекул в матрице, а также взаимодействием колебаний по механизму резонанса Ферми. Библ. 25. И. В. А.

ф. 1986, 18, № 11.

CS₂

DM. 24180

1986

1 B1256. Использование фундаментальных колебаний CS₂ для анализа матричных эффектов в спектроскопии матричной изоляции. The fundamental vibrations of CS₂, as probes of matrix effects in matrix isolation spectroscopy. Givan A., Loewenschuss A., Bier K. D., Jodl H. J. «Chem. Phys.», 1986, 106, № 1, 151—159 (англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения и спектры-КР CS₂ (I), изолированного в Ar-, Kr- и N₂-матрицах при различных концентрациях, скоростях осаждения и т.п. Установлены корреляции между наблюдаемыми спектрами I и различными физ. эффектами, возникающими при матричной изоляции: множественностью типов мест, занимаемых молекулами I в матрицах, взаимодействием между молекулами I, влиянием материала матрицы.

Г. М. Курамшина

ИК спектры
поглощения
и
спектры-КР
в матрицах

Х. 1987, 19, N1

CS₂

Om. 24180⁴ 1986

(Lk, CKP)

105; 69296e. The fundamental vibrations of carbon disulfide as probes of matrix effects in matrix isolation spectroscopy. Givan, A.; Loewenschuss, A.; Bier, K. D.; Jodl, H. J. (Dep. Inorg. Anal. Chem., Hebrew Univ., 91904 Jerusalem, Israel). *Chem. Phys.* 1986, 106(1), 151-9 (Eng). The IR and Raman spectra of matrix-isolated CS₂ were examd. under a variety of exptl. conditions. The results are discussed in terms of the phys. effects common to matrix isolation spectra in general like site effects, interactions between trapped mols., effects of matrix materials and of the symmetry at the trapping site, Fermi resonance and the inherent differences between IR and Raman spectra.

C.A. 1986, 105, N 8

CS₂ (21)

1986

(CKP, ν_i)

105: 161176p Polarized and depolarized Raman spectra of liquid carbon disulfide in the pressure range 0-10 kbar. I. Vibration frequencies, carbon-sulfur bond length, and Fermi resonance. Ikawa, S.; Whalley, Edward (Div. Chem., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(5), 2538-47 (Eng). The effect of pressure on the polarized and depolarized Raman spectra of liq. CS₂, i.e., the peak frequencies, bandwidths, and relative intensities of both the allowed ν_1 and $2\nu_2$ bands and the interaction-induced ν_2 and ν_3 bands, were measured at 22° up to 10 kbar. The effect is discussed of pressure on the frequencies and on the relative isotropic intensity of the ν_1 and $2\nu_2$ bands. The frequency of the ν_1 band increases linearly with pressure,

C.A. 1986, 105, 118

within the exptl. uncertainty, at the rate $0.16 \pm 0.01 \text{ cm}^{-1}\text{-bar}^{-1}$, and the frequencies of the ν_2 , ν_3 , and $2\nu_2$ bands decrease nonlinearly. The frequency shifts are described by 2nd-order perturbation theory with the mol. anharmonicity and the intermol. interaction as perturbations. The leading terms of the shifts consist of the same deriv. of the interaction potential, multiplied by different anharmonicity consts., and the shifts of the ν_1 and $2\nu_2$ bands suggests that the C-S bond length decreases at the rate $2 \times 10^{-4} \text{ Å-kbar}^{-1}$. The relative isotropic intensity of the $2\nu_2$ and ν_1 bands increases with pressure at the rate 0.050 kbar^{-1} , whereas the anisotropic $2\nu_2$ intensity relative to the isotropic ν_1 intensity is independent of pressure to the exptl. precision of ~ 0.005 . The effect of pressure on the 2nd deriv. of the isotropic and anisotropic parts of the polarizability with respect to the bend coordinate was $1.1 \times 10^{-43} \text{ C-m}^2\text{-V}^{-1}\text{-kbar}^{-1}$ and ~ 0 , resp., from these values.

К. Саэмеер

1986

$(CS_2)_n$ Kondow Tamotsu.

Electron. At. Collisions,
Invited Pap. Int. Conf.
He; Phys. Electron. At. Colli-
sions, 14th 1985 (Pub. 1986),
577-28.

(ср. Реактер $(CO_2)_n$; III)

CS₂

[om. 23021]

1986

Scarlett M., Taylor P.R.,

Ap,
cmprk-
mupa

Chem. Phys., 1986, 101,
N1, 17-26.

Memorandum
a cekmpa

1987

CS₂

107: 123565y QR decomposition in least squares analysis, with an application to the reduction of rotational spectra to molecular constants. Badowski, N. (Inst. Inorg. Chem. Metall. Rare Elements, Tech. Univ. Wroclaw, 50-370 Wroclaw, Pol.): Spectrosc. Lett. 1987, 20(4), 365-73 (Eng). A QR decompn. and the modification of the Gram-Schmidt method in least-squares anal. are presented, as well as a detailed description of the numerical calcn. of the rotational consts. The ordinary least-squares technique with the construction of normal equations and the cor. least-squares technique with QR decompn. were compared. These procedures were tested using well-defined synthetic data and the published microwave data on the CS₂ mol.

C. A. 1987, 107, N14

CS₂ (27150 (om. 29475) 1987

Butayev B.S.,
Sakyan A.S., et al.

Chem. Phys. Lett.,
1987, 138, N4, 303-309.

( III)
(III CO₂; III)

CS₂

(om. 27693)

1987

Hardwick J.L., Dao Y.,
et al.,

лучи-
поток.
диссоц.
и

J. Phys. Chem., 1987,

показав 91, 4506 - 4510.

CS₂

(Om. 27322)

1987

Marrison I., King G. C.,

Спектр
потери
элект-
рона

J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom., 1987,
43, N 2, 155-168.

CS₂(2) (DM. 27049) 1987

Rebarle P., Chowdherry S.,

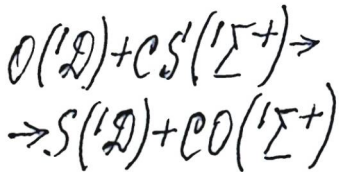
Ae; Chem. Rev., 1987, 87,
N3, 513-534.

CS₂

[Om. 26 912]

1987

Murrell J.N., Guo H.,



J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2, 83,
N4, 683-692.

CS₂

Im. 26499) 1987

9 Л454. Индуцированная лазерным возбуждением вращательно-разрешенная люминесценция и зеемановская спектроскопия квантовых биений состояния V^1B_2 сероуглерода, охлажденного в потоке. Rotationally resolved laser-induced fluorescence and Zeeman quantum beat spectroscopy of the V^1B_2 state of jet-cooled CS₂. Ochi Nobuaki, Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji, Koda Seiichiro. «Chem. Phys.», 1987, 113, № 2, 271—285 (англ.)

При лазерном возбуждении исследован спектр люминесценции CS₂, охлажденного в сверхзвуковой струе до вращательных т-р менее 10 К, и проанализирована

ф. 1987, 18, № 9

вращательная структура состояния V^1B_2 . Ряд спектральных компонент зарегистрированной структуры отождествлен с переходами с «горячих» колебательных подуровней молекулы. На основании результатов исследований зеемановских квантовых биений в кинетике затухания люминесценции определены магн. моменты участвующих в переходе возбужденных вращательно-колебательных состояний. Установлено влияние спин-вращательного взаимодействия с орбитальным состоянием $^{13}A_2$ на время жизни уровня 1B_2 . Библ. 24.

В. С. З.

CS₂

(Om. 26499)

1987

(V¹B₂ - X¹Σ_g⁺)

107: 14921r Rotationally resolved laser-induced fluorescence and Zeeman quantum beat spectroscopy of the V¹B₂ state of jet-cooled carbon disulfide. Ochi, Nobuaki; Watanabe, Hajime; Tsuchiya, Soji; Koda, Seiichiro (Coll. Arts Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *Chem. Phys.* 1987, 113(2), 271-85 (Eng). The rotationally resolved laser-induced fluorescence (LIF) excitation spectrum of V system bands (V¹B₂-X¹Σ_g⁺ transition) of CS₂ cooled in a supersonic jet was obsd. In a supersonic jet of CS₂/Ar or He mixt., the rotational temp. of CS₂ is reduced to <10 K, and thus the LIF excitation spectrum is simplified significantly. Two types of rotational structure are found; one is composed of P and R branch transitions from even J'' levels and the other is of P, Q, and R branch transitions from even as well as odd J''. The bands with the former rotational structure were assigned to transitions to K' = 0 levels of the ¹B₂ state, the bands with the latter structure to transitions to K' = 1 levels from the (0, 1¹, 0) level of the electronic ground state, i.e. vibrationally hot bands. This assignment is supported by the further evidence that these hot bands disappear when the supersonic jet includes a 3-body gas such as NH₃ which enhances the vibrational relaxation of CS₂. Calcn. of transition moments for resp. transitions leads to the conclusion that the upper

c.A. 1987, 107, v2

levels of the V system bands are located in the region close to or higher than the potential barrier of the bending vibration of excited CS₂. The radiative lifetime of CS₂ in single rovibronic levels of the ¹B₂ state is the range of 2-8 μs which is of the same order of magnitude as that calcd. from the absorption coeff. It tends to be longer for higher J levels or for higher vibronic levels. Zeeman quantum beating is obsd. in the fluorescence decay of excited CS₂ for a no. of rovibronic levels under a weak magnetic field, and thus a magnetic moment assocd. with each rovibronic level can be detd. The g values are around 0.02 and tend to be smaller in higher J levels for some vibronic states. Based on the obsd. radiative lifetime and the g value, it is suggested that the ¹B₂ state is perturbed by a spin-rotation interaction with 2 spin components, A₁ and B₁ of the ³A₂ orbital state besides a strong spin-orbit coupling with the R³B₂ state.



ССС

[от. 27 553]

1987

Зюбима Т. С., Чаркин О. П.,
Зюбин А. С.,

струк-
тура
и
стабильн.

Ис. Мезоргант. Живучи,
1987, 32, № 11, 2616-
● - 2624.

CS₂

1988

108: 84426c Interaction-induced vibrational spectra of liquid carbon disulfide in various solvents. Concentration effect. Dayan, E.; Dervil, E.; Loisel, J.; Pinan-Lucarre, J. P.; Tarjus, G. Serv. Spectrosc. Mol. Milieu Condense, Univ. Pierre Marie Curie, 5230 Paris, Fr.). *Chem. Phys.* 1988, 119(1), 107-23 (Eng). The forbidden $\nu_1(\Sigma_g^+)$ IR and $\nu_2(\Pi_u)$ Raman bands of CS₂ were studied in a variety of binary liq. mixts. Attention was focused on integrated intensities measured at different vol. fractions of the solvent. The variation with concn. of the IR intensity was accounted for by combining the usual multipole expansion techniques and simple liq. mixt. models. Two distinct mechanisms are involved in the Raman case; they are related to the vibrationally modulated hyperpolarizability β' and to the vibrationally modulated quadrupolar polarizability A' . Although the latter mechanism is predominant in pure CS₂, the former mechanism cannot be neglected in strongly polar solvents.

(ν_1, ν_2)

C. A. 1988, 108, N10.

CS₂

(OM. 30028)

1988

McIntosh B.G., Adams N.
et al.,

(Ap) Chem. Phys. Lett., 1988,
148, N2-3, 142-148.

CS₂

№ 28860

1988

9 7 Л243. Вращательные возмущения в спектре поглощения дисульфида углерода между 3300 и 3450 Å (*U*-система). Rotational perturbations in the absorption spectrum of carbon disulfide between 3300 and 3450 Å (the *U* system). Merer A. J., Morris Sandra A., Jungen Ch. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 2, 425—449 (англ.)

Спектр поглощения CS₂ получен в области 3300—3500 Å при *t*-рах —78°С и +100°С. Изученная область спектра соответствует высоким колебательным состояниям *R*- и *S*-систем (³Δ_u (³Δ₂, Σ=0), *B*₂—*X*¹Σ_g⁺) и *U*-системе двух изотопных модификаций ¹²CS₂ и ¹³CS₂. Анализ присутствующих возмущений подтвердил, что *U*-система является продолжением *R*- и *S*-прогрессий, однако возрастающее влияние возмущений приводит к хаотизации колебательной структуры при *v*_r'=12. Отмечено, что спектр CS₂ является характер-

М.П.

ф. 1988, 18, № 7

ным примером ситуации, когда возмущение за счёт взаимодействия с неизвестной совокупностью уровней постепенно нарушает регулярность электронного перехода. Выделено 6 стадий возмущения, начиная с локального удвоения линий и появления псевдопересечений, через фрагментацию полос, их уореднение, раздробление к полному хаосу. Е. А. Ж.

CS₂

Om-28860 1988

108: 65080u Rotational perturbations in the absorption spectrum of carbon disulfide between 3300 and 3450 Å (the U system). Merer, A. J.; Morris, Sandra A.; Jungen, C. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 127(2), 425-49 (Eng). Rotational analyses were carried out for the bands of ¹²CS₂ at 28,940-30,230 cm⁻¹ from plates taken with the vapor at -78°; the spectrum of ¹³CS₂ was analyzed similarly at 28,940-29,420 cm⁻¹. The region studied corresponds to the high vibrational levels of B. Kleman's (1963) R and S systems (³Δ_u(³A₂, Σ = 0), ^{evs}B₂-X¹Σ_g⁺) and the U system. Every single upper level is perturbed in some fashion. Interpretation of the perturbations by least-squares fitting was possible for many of the bands, guided by careful considerations of the relative intensity patterns, which were often decisive in establishing the interaction mechanisms. The U system is the continuation of the R and S progressions, though the rapidly increasing severity of the perturbations by extra levels not assocd. with the R state reduces the vibrational structure to chaos near the v'₂ = 12 level. The extra levels have different C isotope shifts from the R state levels and probably belong to the ground state; both J-dependent and J-independent interactions were found. Perturbations within the level structure of the R state occur:

Франсис-
АКЦИУ
М. Черкня

C.A. 1988, 108, N 8

anharmonic resonances between the levels 0 11 0 and 260, and 330 and 042 ($s + 2$) were analyzed and the ratios of the transition moments detd. The $\nu_1 = 3$ progression was not recognized in previous studies of CS₂. The CS₂ spectrum is a prototype example of how perturbations by a manifold of unseen levels progressively destroy the regularity of an electronic transition. Six stages can be recognized in the appearance of the perturbed structure, beginning with local line doublings and progressing through avoided crossings, extra band fragments, averaged bands, and shattered bands to complete chaos.

CS₂

CA 28840

1988

† 15 Б1321. Диодные лазерные спектры изотопозамещенного дисульфида углерода $^{13}\text{CS}_2$ в области 12 мкм. Diode-laser spectra of isotopic carbon disulfide $^{13}\text{CS}_2$ in the region of 12 μm . Walr and J., Humblet V., Blanquet G. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 127, № 2, 304—323 (англ.)

С использованием перестраиваемого диодного лазера и многоходовой кюветы с длиной поглощающего слоя 52 м в обл. 800—850 cm^{-1} (полоса $\nu_3-\nu_1$) с разрешением $1,3 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, определяемым доплеровским контуром линий, измерены спектры поглощения молекул $^{13}\text{CS}_2$. Зарегистрированы колебательно-вращат. переходы в 10 полосах $^{13}\text{C}^{32}\text{S}^{32}\text{S}$, полосе 00^01-10^00 $^{13}\text{C}^{32}\text{S}^{33}\text{S}$ и 4 полосах $^{13}\text{C}^{32}\text{S}^{34}\text{S}$ и приведены волновые числа линий. Выполнен анализ вращат. структуры наблюдаемых полос и с учетом имеющихся лит. данных по ИК-фурье-спектрам поглощения рассчитаны новые зна-

М.П.

Х. 1988, 19, N 15

чения молек. постоянных для $^{13}\text{CS}_2$ (см^{-1} , вращат. параметры в 10^{-5} см^{-1}) $\omega_1=672,659$ (фикс.), $\omega_2=385,125$, $\omega_3=1507,249$, $x_{11}=-1,002$, $x_{12}=-2,437$, $x_{22}=0,936$, $x_{13}=-7,429$, $x_{23}=-6,009$, $x_{33}=-6,451$, $x_{11}=-0,645$, $k_{122}=41,867$, $\lambda_1=0,414$, $\lambda_2=0,334$, $\lambda_3=0,013$, $\alpha_1=21,03$, $\alpha_2=-20,20$, $\alpha_3=68,47$, $\delta=6,00$.

С. Б. Осип

CS₂

Am. 28840

1988

108: 84414x Diode-laser spectra of isotopic carbon disulfide ¹³CS₂ in the region of 12 μm. Walrand, Jacques; Humblet, Vinciane; Blanquet, Ghislain (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Univ. Notre-Dame Paix, B-5000 Namur, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 127(2), 304-23 (Eng). By using a tunable diode-laser spectrometer, 10 transitions were obsd. in the ν_3 - ν_1 region of ¹³CS₂ with a sample enriched in ¹³C. One band of ¹³C³²S³³S and 4 bands of ¹³C³²S³⁴S were analyzed. The mol. const. of ¹³C³²S₂ were detd. by a general rovibrational anal. including all known data.

(d.n.)

laserdoff.
chempr

C.A. 1988, 108, N 10.