

$Cl_2$   
 $Cl_2^-$

Отпуск 1911

1981

12 Д234. Прилипание электронов к галогенам. Electron attachment to halogens. Ayala J. A., Wentworth W. E., Chen E. C. M. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 7, 768—777 (англ.)

Для систем  $X_2$  и  $X_2^-$  (где  $X=Cl, Br, I$ ) обсуждаются корреляционные диаграммы для основного и 1-го возбужденного состояний  $X_2^-$  и основного состояния  $X_2$ , а также информация об этих кривых, получаемая из экспериментов по диссоциативному прилипанию электронов (ДПЭ) к  $X_2$ . Предложено описывать указанные состояния кривыми Морза с одним и тем же параметром в экспоненте  $\beta$ , но с разными предэкспоненц. множителями для основного и 1-го возбужденного состояний  $X_2^-$ . Измерены константы скорости ДПЭ к  $X_2$  в зависимости от т-ры. Получены следующие аррениусовские энергии активации (в электронвольтах):  $0,037 \pm \pm 0,004$  ( $Cl_2$ );  $0,008 \pm 0,007$  ( $Br_2$ );  $0,033 \pm 0,005$  ( $I_2$ ). Предложенная параметризация потенц. кривых и полученные данные использованы для корреляции прежних эксперим. данных по образованию  $X^-$ . А. И. Р.

корреляцион.  
диаграммы,  
ДПЭ,  
(диссоциатив.  
прилипание  
электрона

✱  
+2

ф. 1981, 18N12.

$Br_2^-$ ,  $Br_2$

$I_2$ ,  $I_2^-$

Cl<sub>2</sub>

1981

Brunel Y., et al

Vi

J. chim. phys. et phys.-chim.  
biol., 1981, 78, n<sup>o</sup> 2, 119-125

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

Cl 2

Коммуна 11297

1981.

негидрированное,  
лазер-возб.  
гидроксида,  
(2)

Clyne M. A. A.; Martinez E.

J. Chem. Soc. Faraday  
Trans. II, 1981, 76,  
1561-68

Cl<sub>2</sub>

OMMICK 11449

1981

Br<sub>2</sub>

95: 30734w Pseudopotential evaluation of the ground-state potential curves for the chlorine and bromine molecules. Das, G. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 79(2), 305-9 (Eng). The electronic wave functions and potential curves for the ground states of the Cl<sub>2</sub> and Br<sub>2</sub> mols. were calcd. by using pseudopotential techniques. The agreement with expt. for both mols. is satisfactory. For Cl<sub>2</sub>, all-electron calcs. were also done to study the accuracy of the pseudopotential approach to bound states.

noises.

refuse

(+1)

C.A. 1981.95 N 4

Cl<sub>2</sub>

Br<sub>2</sub>

Оттиск 11449

1981

17 Б31. Вычисление потенциальных кривых основного состояния молекул Cl<sub>2</sub> и Br<sub>2</sub> методом псевдопотенциала. Das G. Pseudo-potential evaluation of the ground-state potential curves for the Cl<sub>2</sub> and Br<sub>2</sub> molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 79, № 2, 305—309 (англ.)

В рамках псевдопотенциального метода оптимизированных валентных конфигураций (ПОВК), основанного на модифицированном методе Филлипса — Клейнмана, рассчитаны потенциальные кривые основных состояний молекул Cl<sub>2</sub> и Br<sub>2</sub>. Для сравнения потенциальная кривая основного состояния Cl<sub>2</sub> вычислена также методом ССП МО ЛКАО с учетом всех электронов. В расчетах Cl<sub>2</sub> методом ПОВК использовались 3 базиса, отличающиеся степенью вовлечения в пространство валентных орбиталей «внешних» 2p-функций остова. В одном из

расчет  
потенц. крив.  
осн. состоян.

(+)

☒

X. 1981 N 17

базисов спектроскопич. постоянные основного состояния  $\text{Cl}_2$  в приближении ПОВК составили (в скобках эксперим. значения):  $R_e = 3,81(3,76)$  ат. ед.,  $\omega_e = 510(560)$   $\text{см}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 3,4(2,7)$   $\text{см}^{-1}$ ,  $D_e = 2,36(2,48)$  эВ. Соотв-щие постоянные для основного состояния  $\text{Br}_2$ :  $R_e = 4,42(4,31)$  ат. ед.,  $\omega_e = 302(325)$   $\text{см}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 1,3(1,1)$   $\text{см}^{-1}$ ,  $D_e = 1,92(1,97)$  эВ. Отмечено, что лучшие согласие между теор. и эксперим. спектроскопич. постоянными для  $\text{Br}_2$  указывает на необходимость более тщательного выбора основных функций при расчетах  $\text{Cl}_2$  методом ПОВК.

Оттиск 11449 1981

Cl<sub>2</sub>

Br<sub>2</sub>

8 Д69. Псевдопотенциальное определение потенциальных кривых основного состояния молекул Cl<sub>2</sub> и Br<sub>2</sub>. Pseudo-potential evaluation of the ground-state potential curves for the Cl<sub>2</sub> and Br<sub>2</sub> molecules. Das G. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 79, № 2, 305—309 (англ.)

Модифицированным методом Филиппса—Клейнмана (Das G., Wahl A. C. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, 53) проведены псевдопотенц. расчеты потенц. кривых для молекул Cl<sub>2</sub> и Br<sub>2</sub>. Полученные значения спектроскопич. констант хорошо согласуются с эксперим. данными и с результатами выполненного для Cl<sub>2</sub> расчета с учетом всех электронов. А. Ф. Шестаков

потенц.  
кривые

(47) A

ф. 1981 N 8

Cl<sub>2</sub>

Омиск 11860 1981

12 Д517. Спектр поглощения Cl<sub>2</sub> в ВУФ-области.  
The absorption spectrum of Cl<sub>2</sub> in the vacuum ultraviolet.  
Douglas A. E. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 6, 835—  
840 (англ.; рез. франц.)

М.П;

Спектр поглощения Cl<sub>2</sub> в области 1070—1500 Å сфотографирован с дисперсией 0,16—0,24 Å/мм. Для упрощения анализа наряду со спектром природного Cl<sub>2</sub> получен спектр изотопич. молекул <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub>, а также спектры при t-ре 100° С. Выполнен вращательный анализ ряда полос. В области 1330—1450 Å идентифицирована система полос, связанная с переходом в ионное состояние. Большое кол-во возмущений в системе не позволило определить обычные колебательно-вращательные постоянные для этого состояния. Получена новая информация о ридберговских состояниях молекулы Cl<sub>2</sub>. Библ. 13.

В. С. Иванов

ф. 1981, 18, № 12.



Cl<sub>2</sub>

Ommuck 11860

1981

95: 52141c The absorption spectrum of chlorine in the vacuum ultraviolet. Douglas, A. E. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc., Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Can. J. Phys.* 1981, 59(6), 835-40 (Eng). The absorption spectrum of Cl<sub>2</sub> in the vacuum UV region was photographed with sufficient resolu. to allow rotational analyses of many bands. The sepd. isotopic mol. <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> and cooled absorption cells were used to simplify the spectrum. A band system assocd. with an ionic state was obsd. in the 1330-1450 Å range. Many large perturbations in the system prevent the detn. of the usual rotational and vibrational consts. Some progress was made in the analyses of a few bands assocd. with Rydberg states.

M.R.

спектр ВУФ,

C.A. 1981, 95, N6.

Cl<sub>2</sub>

[Dammick 10992]

1981.

sucrofo -  
ompuçam.

Ferreira R., et al.

Theor. chim. acta,  
1981, 58, 131-36

$C_2$

кв. век.  
парім.

Kochanski E.

1981.

Quant. Theory Chem.  
React. Vol. 2. Dordrecht  
e. a., 1981, 177-191.

(сер.  $C_2H_4$ ; III).

Cl<sub>2</sub>

1981

Кучера М. В., et al.

константа  
скорости  
реакции  
диссоциации

Chem. Phys., 1981, 59,  
N 1-2, 125-136.

●  
(ссыл. F<sub>2</sub>, III)

1981

Cl<sub>2</sub>  
KrArClчекмп  
опытсес.

95: 70413x Time-resolved study of the UV fluorescence of chlorine under synchrotron radiation excitation of diatomic chlorine/rare-gas mixtures. Le Calve, J.; Castex, M. C.; Haaks, D.; Jordan, B.; Zimmerer, G. (DPC/SPP/SP, CEN/=SACLAY, 91190 Gif sur Yvette, Fr.). *Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. B* 1981, 63B(1), 265-75 (Eng). The UV fluorescence of pure Cl<sub>2</sub> and Cl<sub>2</sub>/rare-gas mixts. was investigated under selective, pulsed vacuum UV excitation. In pure Cl<sub>2</sub>, a strong fluorescence between 1350 and 2000 Å was found, with typical radiative lifetimes of 3 ns. The addn. of Kr(Ar) to Cl<sub>2</sub> strongly quenches this fluorescence and Kr(Ar)Cl\* emissions appear, as well as the Cl<sub>2</sub> laser emission at 2580 Å. The radiative lifetime of the Cl<sub>2</sub> laser state is 16 ns.

(H)

X

CA 1981, 95, N 8

1981

Cl<sub>2</sub>

22 Б1640. Изучение разрешенной во времени УФ-флуоресценции хлора при возбуждении синхротронным излучением смесей Cl<sub>2</sub> с редкими газами. Le Calvé J., Castex M. C., Haaks D., Jordan B., Zimmerer G. Time-resolved study of the UV fluorescence of chlorine under synchrotron radiation excitation of Cl<sub>2</sub>/rare-gas mixtures. European Conference on the Dynamics of Excited States. Pisa, 14—16 th Apr., 1980. «Nuovo sim.», 1981, B63, № 1, 265—275 (англ.; рез. итал. рус.)

Исследована флуоресценция (Фл) в области 1300—3000 А (разрешение 30 А) чистого Cl<sub>2</sub> и его смесей с редкими газами при возбуждении монохроматизированным (спектральная ширина 5—8 А) синхротронным излучением в области от ~1050 до 2000 А. Времена затухания Фл измеряли при использовании импульсной структуры синхротронного излучения (импульсы шири-

(спектр флуоресц.)

Л. 1981 № 22, 19 АБ

ной  $\sim 1$  нс с частотой следования 14 МГц). В чистом  $\text{Cl}_2$  наблюдали сильную Фл в области 1350—2000 Å с излучательными временами жизни  $\tau=3$  нс. Добавки Кг (или Аг) к  $\text{Cl}_2$  тушат эту Фл и приводят к появлению свечения  $\text{KгCl}^*$  (или  $\text{АгCl}^*$ ), а также «лазерного» испускания при 2580 Å с  $\tau=16$  нс, к-рое приписано «ионному»  $^3\pi_{2g}$ -состоянию  $\text{Cl}^+\text{Cl}^-$ . Однако константы скорости тушения этого состояния атомами редких газов слишком велики, чтобы его можно было использовать для создания лазера на этой спектральной полосе.

В. Е. Скурат

Cl<sub>2</sub>

Lommuu 11378 | 1981.

Liška M., et al.

M.M.

J. Mol. Struct., 1981.  
72, 177-81.

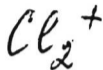


1981

10 Д95. Электронно-возбужденные и ионизованные состояния молекулы хлора. Electronically excited and ionized states of the chlorine molecule. Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «Chem. Phys.», 1981, 57, № 3, 279—296 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом взаимодействия большого числа одно- и двукратно

возбужденных конфигураций рассчитаны потенц. кривые (ПК) для основного и большого числа возбужденных конфигураций  $Cl_2$ ,  $Cl_2^-$  и  $Cl_2^+$ . Все состояния, коррелирующие с атомами в основном состоянии, являются отталкивательными (возможным исключением является  $^1\Pi_u$ ). Состояния, коррелирующие с ионами, сильно взаимодействуют с ридберговскими состояниями, что приводит к различным разрешенным пересечениям ПК и, следовательно, ПК с двумя минимумами. Из триплетных состояний, диссоциирующих на атомы в основном состоянии, не является отталкивательным только  $^3\Pi_u$ . Энергия диссоциации для основного состояния найдена равной 2,455 эВ (эксперим. значение 2,475), вертикальный потенциал ионизации 11,48 (11,50), средство к

 $^1D_0; ^1\Sigma; A\bar{e}$ 

(+2)  $\boxtimes$

ф. N10.1981

11526  
ОММЦК

электрону 2,38 ( $2,51 \pm 0,1$ ), сродство к электрону атома Cl 3,42 (3,61), диссоциационный предел для диссоциации на  $\text{Cl}^-(^1S_g) + \text{Cl}+(^3P_g)$  9,44 (9,35), на  $\text{Cl}^-(^1S_g) + \text{Cl}+(^1D_y)$  11,02 (10,79), на  $\text{Cl}^*(2p_g, 4s) + \text{Cl}(^2P_u)$  — на 9,20 выше основного состояния атома (9,24). Показано, что лазерная полоса отвечает эмиссии  $^3P_g \rightarrow ^3P_u$  (вертикальная энергия перехода оценена в 4,86 эВ — эксперим. значение 4,805). Показано, что разрешенное пересечение ридберговских и валентных состояний  $\text{Cl}_2$  приводит к относительно крутой ПК для высшего состояния  $2^1\Sigma_u^+$ , положение которого согласуется с эксперим. данными по синхротронному излучению.

В. Л. Лебедев

РФ  
Юказ

Ommuck 11526 1981

$Cl_2$

$Cl_2^+$

$Cl_2^-$

nonres.  
irresol

95: 30746b Electronically excited and ionized states of the chlorine molecule. Peyerimhoff, Sigrid D.; Buenker, Robert J. (Univ. Bonn, D-5300 Bonn, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1981, 57(3), 279-96 (Eng). Potential curves for the ground and excited states of  $Cl_2$ ,  $Cl_2^+$ , and  $Cl_2^-$  were calcd. by means of the multiref.-double-excitation-CI method. Among the triplet species of  $Cl_2$  that dissociate into the ground state atoms only the  $^3\Pi_u$  state is not repulsive. The calcd.  $D_0$  value for the ground state is 2.455 eV compared to the exptl. value of 2.475 eV; the vertical ionization energy and electron affinity are 11.48 and 2.38 eV, resp. The  $Cl_2$  laser line was confirmed to result from a  $^3\Pi_g \rightarrow ^3\Pi_u$  emission, whereby the calcd. downward vertical transition energy of 4.86 eV fits in quite well with the known location of this line at 4.805 eV. The 1st 2 dipole-allowed transitions from the ground state of  $Cl_2$  involve  $^1\Sigma_u^+$  and  $^1\Pi_u$  states, which are nearly isoenergetic. An avoided crossing between Rydberg and valence states produces a relatively steep potential well for an upper state ( $2^1\Sigma_u^+$ ).

(+2)

C.A. 1981, 95 N4

Cl<sub>2</sub>

1981

Sakai Yoshiko et al

J. Comput. Chem., 1981,  
2(1), 108-25.

ze; см. пост.  
фрагм. пост.  
vi; кв. елх.  
расчет

● (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) III

Cl<sub>2</sub>

Ommick 12632

1981

Do,

M.N.,

reomemp

Saxi Y.,

J. Chem. Phys. 1981, 75(3),  
1203-1208.

Cl<sub>2</sub>

[Common 12099] 1981.

Stevie F. A., et al.

nonperm.

ceretell

nonuzasun

Det. ygar.

J. Chem. Phys., 1981,

71 (9), 5106-5110.

Cl<sub>2</sub>

1982

Ae ;

14 Б88. Энергетика образования отрицательных ионов при диссоциативном присоединении электрона к CCl<sub>4</sub>, CFCl<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и CF<sub>3</sub>Cl. Illenberger E. Energetics of negative ion formation in dissociative electron attachment to CCl<sub>4</sub>, CFCl<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, and CF<sub>3</sub>Cl. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1982, 86, № 3, 252—261 (англ.)

С помощью установки, позволяющей измерять времена пролета ионов и состоящей из источника моноэнергетич. электронов (энергии 0—10 эВ при разбросе 0,1 эВ, электронный ток 10<sup>-8</sup>—10<sup>-7</sup> А), источника молек. пучка и квадрупольного масс-фильтра исследованы р-ции диссоциативного присоединения электрона



(+4)

● CFCl<sub>2</sub>, CCl<sub>3</sub>, CCl<sub>2</sub>,  
CF<sub>2</sub>Cl

x. 1982, 19, n 14.

(ДПЭ) к  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CFCl}_3$ ,  $\text{CF}_2\text{Cl}_2$  и  $\text{CF}_3\text{Cl}$ . Из потенциалов появления и распределений кинетич. энергий ионов — продуктов ДПЭ, определенных по зависимостям ионных токов от времени пролета, оценено сродство к электрону для молекул  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{CFCl}_2$ ,  $\text{CCl}_3$ ; получены оценки сродства к электрону снизу для  $\text{CCl}_2$ ,  $\text{CF}_2\text{Cl}$  и сверху для  $\text{FCl}$ . Для  $\text{CF}_2\text{Cl}$  оценка сродства к электрону ( $\geq 2,0 \pm 0,3$  эВ) получена впервые. Показано, что р-ция  $\text{CF}_3\text{Cl} + e \rightarrow \text{CF}_3\text{Cl}^- \rightarrow \text{CF}_3 + \text{Cl}^-$  идет без перераспределения энергии по колебательным степеням свободы  $\text{CF}_3\text{Cl}^-$ .

Д. В. Чеховской




Cl<sub>2</sub>

Ommuck 14299 1982

dr. 17,  
XIII.  
cb. 336

Arco R., Robinson E. A.,  
J. Phys. Chem., 1982, 86,  
16, 894-899.



Cl<sub>2</sub>

Оттиск 15025

1982

2 Д203. Симметрия резонансных состояний Cl<sub>2</sub><sup>-\*</sup> образующихся при реакциях диссоциативного прилипания электронов к Cl<sub>2</sub>. Symmetry of Cl<sub>2</sub><sup>-\*</sup> resonant states formed in dissociative electron attachment reaction on Cl<sub>2</sub>. Azria R., Abouaf R., Teillet-Billy D. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 16, L569—L574 (англ.)

Потенц.  
Кривые

Методом скрещенных пучков с анализом образующихся ионов по массам, энергиям и углам, исследовано диссоциативное прилипание электронов к молекуле Cl<sub>2</sub>. Обнаружено, что ток ионов Cl<sup>-</sup> имеет три максимума: при нулевой энергии электронов, а также при 2,5 и 5,5 эВ. Угловое распределение Cl<sup>-</sup> в области второго пика хорошо аппроксимируется зависимостью  $\sin^2\Theta\cos^2\Theta$ , свойственной прилипанию электрона с <sup>1</sup>Σ<sub>g</sub>→<sup>2</sup>Π<sub>g</sub>-переходом. Образование Cl<sup>-</sup> при малых электронных энергиях связывается, в свою очередь, с переходом в <sup>2</sup>Σ<sub>u</sub>+Cl<sub>2</sub>-основное состояние, кривая потенц. энергии которого в



Фр. 1983, 18, №2

Cl<sub>2</sub><sup>-</sup> (електр)

соответствии с предсказаниями неэмпирич. расчетов, пересекает кривую  ${}^1\Sigma_g^+$   $\text{Cl}_2$ -состояния вблизи равновесного расстояния в  $\text{Cl}_2$ . Угловое распределение для третьего пика сильно изменяется при увеличении энергии от 5,4 до 6,5 эВ. Это объясняется тем, что ниже 5,4 эВ главную роль играют переходы  ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Pi_u$  и  ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Sigma_g^+$ , а при более высоких энергиях остается только переход  ${}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Pi_u$ .

А. А. Зембеков

Cl<sub>2</sub>

[Оттиск 13717]

1982.

хемиллом.  
при расщеп-  
УВ.,  
вероятнось  
создания  
лазера

Belokrinitskii N.S.,  
et al.,

Chem. Phys. Lett.  
1982, 87, N2, 134-138.

Cl<sub>2</sub>

1982

Chinnappan V.A., Nata

Tajar A.

Vi, veoerēp;  
ētpyknypa;  
cer. noem. Indian J. Pure and  
Appl. Phys., 1982, 20,  
N1, 14-17.

(cer. H<sub>2</sub>O; III)

Cl<sub>2</sub>

Ommuck 13442. 11982

спектр  
фуроресц.

Diegelmann H., Mokla K.  
Rebertröst F., Kompa K. Z.,  
Z. chem. Phys., 1982,  
76, N3, 1233-1247.

● (ссыл. F2 ; III)

Cl<sub>2</sub>

Оттиск 14881

1982

З Б1358. Интерпретация спонтанной преддиссоциации Cl<sub>2</sub>[B<sup>3</sup>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>)]. Interpretation of the spontaneous predissociation of Cl<sub>2</sub>[B<sup>3</sup>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>)]. Heaven Michael C., Clyne Michael A. A. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 8, 1339—1344 (англ.)

Проведены расчеты вероятностей спонтанной преддиссоциации Cl<sub>2</sub>[B<sup>3</sup>Π(0<sub>u</sub>)] в двух моделях: вследствие связи этого состояния с отталкивательным состоянием <sup>1</sup>Π(1<sub>u</sub>) и с отталкивательной частью потенц. кривой

спектр,  
потенц.  
кривые

Х. 1983, 19, № 3

состояния  $A^3\Pi(1u)$ . Лишь эти состояния коррелируют с двумя атомами Cl в основном состоянии, что соответствует известным из лит-ры эксперим. данным, тогда как  $B$ -состояние  $Cl_2$  коррелирует с системой  $Cl(^2P_{3/2}) + Cl(^2P_{1/2})$ . Расчет для модели преддиссоциации через  $^1\Pi(1u)$ -состояние дает величины, к-рые не согласуются с известной эксперим. зависимостью скорости преддиссоциации  $Cl_2$  от энергии колебательного возбуждения. Такое согласие достигается лишь для расчетов на основании второй модели — для преддиссоциации через  $A^3\Pi(1u)$ -состояние, для к-рого необходимые параметры потенц. кривой найдены на основании спектроскопич. данных. Т. обр., преддиссоциация  $B$ -состояния  $Cl_2$  происходит через отталкивательную часть потенц. кривой связанного  $A^3\Pi(1u)$ -состояния, с к-рым оно вступает во взаимодействие  $b$ -типа, тогда как согласно лит. данным преддиссоциация  $B$ -состояния  $Br_2$  и  $J_2$  происходит через  $^1\Pi(1u)$ -состояние, т. е. по альтернативному механизму.

В. Е. Скурат



Cl<sub>2</sub>

От. 14881

1982

1 Д594. Интерпретация спонтанной преддиссоциации Cl<sub>2</sub>(B Π(O<sub>u</sub><sup>+</sup>)). Interpretation of the spontaneous predissociation of Cl<sub>2</sub>[B<sup>3</sup>Π(O<sub>u</sub><sup>+</sup>)]. Heaven Michael C. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 8, 1339—1344 (англ.)

Проанализированы ранее полученные эксперим. данные по спонтанной преддиссоциации состояния B<sup>3</sup>Π(O<sub>u</sub><sup>+</sup>) молекулы Cl<sub>2</sub>. С использованием построенных по эксперим. данным потенц. кривых рассчитаны скорости преддиссоциации. Показано, что наблюдаемая экспериментально колебательная зависимость скорости преддиссоциации не может быть объяснена преддиссоциацией за счет взаимодействия с состоянием <sup>1</sup>Π(1<sub>u</sub>) (как у молекул Br<sub>2</sub> и J<sub>2</sub>). Расчеты свидетельствуют в пользу того, что преддиссоциация Br<sub>2</sub>(B<sup>3</sup>Π) связана с состоянием A<sup>3</sup>Π(1<sub>u</sub>). Получено хорошее количеств. согласие между расчетным и эксперим. значениями констант скорости преддиссоциации.

В. С. Иванов

Спонтанная  
преддиссоц.

ср. 1983, 18, 41

Cl<sub>2</sub>

Оммуек 14881

1982

/ 97: 151034t Interpretation of the spontaneous predissociation of chlorine B  $^3\Pi(O_u^+)$ . Heaven, Michael C.; Clyne, Michael A. A. (Bell Lab., Murray Hill, NJ 07974 USA). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1982, 78(8), 1339-44 (Eng). Calcn. of spontaneous predissocn. rate const. for the B  $^3\Pi(O_u^+)$  state of Cl<sub>2</sub> was used to investigate the form of the repulsive potential which provides the dissocn. channel. The exptl. obsd. vibrational dependence of the predissocn. rate cannot be accounted for by predissocn. via the  $^1\Pi(1_u)$  state. This is in contrast to the similar predissocns. of the I<sub>2</sub> and Br<sub>2</sub> B states, which are both predissocd. by  $^1\Pi(1_u)$  states. Further calcns. demonstrated that the A  $^3\Pi(1_u)$  state provides the dissociative channel. Calcns. were made using an A-state potential energy curve derived from spectroscopic data, and quant. agreement was obtained between exptl. and calcd. predissocn. rate const.

рометрес.

кредити б

B  $^3\Pi(O_u^+)$

состоян.

C. A. 1982, 97, N 18

Cl<sub>2</sub>

1982

1 Д865. УФ-испускание молекулярного хлора. Ultra-violet emission of molecular chlorine. Ishiwata Takashi, Fujiwara Ichiro, Tanaka Ikuzo. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 6, 527—529 (англ.)

Получен спектр флуоресценции газообразного хлора в области 220—270 нм, возбужденный излучением азотного лазера  $\lambda \approx 500$  нм за счет двухфотонных переходов. В спектре наблюдается полоса с регулярной структурой, соответствующая переходу в основное состояние молекулы, и широкий континуум, отвечающий переходу в несвязанное состояние с продуктами диссоциации  $2\text{Cl}(^2P)$ . Электронное состояние, с которого наблюдается флуоресценция, имеет энергию  $T_e \approx 59774 \text{ см}^{-1}$  и связано с валентными уровнями с симметрией  $0^+$ .

М. В. Т.

м.п., Те;

сп. 1983, 18, N 1

Cl<sub>2</sub>

1982

1 B150. Ультрафиолетовое испускание молекулярного хлора. Ultraviolet emission of molecular chlorine. Ishiwata Takashi, Fujiwara Ichiro, Tanaka Ikuzo. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 6, 527—529 (англ.)

Измерены спектры возбуждения флуоресценции молек. хлора в видимой и УФ-областях при возбуждении в области 514—481 нм перестраиваемым лазером на красителе. Самый интенсивный пик обнаружен в области 501,89 нм, где линия перехода  $P_{11}$  перекрывается с линией  $R_{13}$  полосы 12—0  $^{35}\text{Cl}_2$ . Отмечено, что пики возбуждения УФ-флуоресценции хоть и имеют нерегулярную структуру, но точно совпадают с нек-рыми линиями поглощения системы В—Х. Показано, что население верхнего состояния, вызывающее УФ-испускание осуществляется из состояния В, а интенсивности сильно зависят от различных условий резонанса, ограниченных правилами отбора для перехода В—Х и перехода на верхнее состояние из состояния В. В спектре УФ-флуоресценции, возбуждаемой в области

М.П;

X, 1983, 19, N1

501,89 нм, наблюдается две системы переходов — дискретная (255—220 нм) и непрерывная с максимумом 259 нм. Установлено, что дискретная система связана со ступенчатым трехфотонным возбуждением  $\text{Cl}_2$  из основного состояния через промежуточное состояние  $B^3\Pi_{0u^+}$  на новое состояние симметрии  $0_u^+$  ( $T_e \approx 59774 \text{ см}^{-1}$ ,  $r_e \approx 3,0 \text{ \AA}$ ). Испускание из этого состояния осуществляется с уровня  $v' = 0$  с временем жизни флуоресценции  $\sim 20 \text{ нс}$  на уровень  $^3\Pi_u$ , диссоциирующий на ионы  $\text{Cl}^+(^3P_g) + \text{Cl}^-(^1S_g)$ . Широкая полоса 259 нм отнесена к переходу из состояния  $0_u^+$  на отталкивательное четное состояние с продуктами диссоциации  $\text{Cl}(^2P) + \text{Cl}(^2P)$ .

С. Б. Осин

АНЕИ  
ВНОСТ

Cl<sub>2</sub>

1982

Jeung Gwanghi.

Thèse doct. état - sci.  
chim. quant. Univ.  
Paul Sabatier Toulouse,  
1982. Var. pag., ill.

пачінае іі,  
н. н.

(с.с. Ті Ну ; III)

Cl<sub>2</sub>

1982

15 Б116. Пороговое возбуждение Cl<sub>2</sub> электронным ударом. Jugeta J., Svejanović S., Кигера М., Svejanović D. Threshold electron impact excitation of Cl<sub>2</sub>. «Z. Phys.», 1982, А304, № 2, 143—153 (англ.)

С высоким разрешением (35 мэВ) измерены спектры пороговых электронов, образованных при возбуждении молекул Cl<sub>2</sub> электронным ударом энергии ( $E$ ) 2—14 эВ. В области  $E$  до 7,5 эВ в спектре наблюдаются широкие пики, положение к-рых согласуется с лит. оптич. данными, а относит. интенсивности сильно отличаются, что указывает на существенный вклад дипольно-запрещенных переходов. При  $E=7,46$  эВ обнаружена серия из 5 пиков, к-рые отнесены к колебательным состояниям  $^2\Pi_g$  резонанса Фешбаха, образованного из основного состояния Cl<sub>2</sub><sup>+</sup> и пары ридберговских электронов (4s $\sigma$ )<sup>2</sup>. Из анализа интенсивностей этих пиков и на основе лит. теор. результатов сделан вывод, что резонанс

Спектр

X. 1982, 19, N 15.

Фешбахa распадается в отталкивательные  $1,^3\Pi_u$ - и  $1,^3\Pi_g$ -состояния с конфигурациями  $\sigma_g^2\Pi_u^4\Pi_g^3\sigma_u^1$  (2431) и (2341) соотв. При более высоких  $E$  в спектре идентифицирован ряд дидберговских состояний, в том числе впервые  $4s$ ,  $5s$  и  $6s$  компоненты серий, сходящихся к  $3,^1\Pi_g$ -состояниям с конфигурацией (2430). Из сопоставления полученных результатов с данными расчетов (Reyerimhoff S. O., Vuenker R. J. «Chem. Phys.», 1981, 57, 279) заключено, что в  $Cl_2$  важную роль играют сильные конфигурац. взаимодействия между ридберговскими и валентными состояниями. О. А. Басченко



Cl<sub>2</sub>

1982

8 Д537. Спектр пороговых электронов при возбуждении Cl<sub>2</sub> электронным ударом. Threshold electron impact excitation of Cl<sub>2</sub>. Jureta J., Svejanović S., Kugera M., Svejanović D. «Z. Phys.», 1982, A304, № 2, 143—152 (англ.)

Методом спектроскопии пороговых электронов при возбуждении электронным ударом изучено возбуждение Cl<sub>2</sub> в диапазоне энергий 2—14 эВ. В области до 7,5 эВ наблюдается широкая диссоциативная структура, которая коррелирует с оптически активными валентными состояниями. Относит. интенсивности полос при электронном ударе и опич. возбуждении существенно различаются, что указывает на значительный вклад оптически запрещенных переходов. При 7,46 эВ наблюдается серия резких пиков, соответствующих фешбаховскому резонансу <sup>2</sup>Π<sub>g</sub>. Проанализированы каналы распада, ответственные за появление резонанса в

Спектр

ф. 1982, 18, №8.

спектре пороговых электронов. Высказано предположение, что они включают несколько валентных состояний с конфигурациями (2431) и (2341), чьи потенц. кривые пересекают кривую  $Cl_2^{-2}P_g$  в области энергий, при которых образуются резонансные состояния. При больших энергиях вплоть до области ионизации в спектре доминируют ридберговские переходы. Библ. 18.

А. В. Головин



Cl<sub>2</sub>

1982

18 Б29. Использование эффективных остовных потенциалов в расчетах поправок по теории возмущений к теореме Купменса: вертикальные потенциалы ионизации Cl<sub>2</sub>, ClN<sub>3</sub> и ClNCO. Use of effective core potentials in perturbation corrections to the Koopmans theorem: vertical ionization potentials of Cl<sub>2</sub>, ClN<sub>3</sub>, and ClNCO. Langhoff Stephen R., Jaffe Richard L., Chong Delano P. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4th Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap., Pt 3, 875—886 (англ.);

расчет E,  
стрем., γ;

⊕2

Вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) молекулы Cl<sub>2</sub> вычислены методом ССП МО ЛКАО с учетом всех электронов и в приближении эффективного потенциала остова (ЭПО), основанном на использовании псевдовалентных орбиталей, соответствующих по форме валентным АО (Christiansen P. A., Lee Y. S., Pitzer K. S. «J. Chem. Phys.», 1979; 71, 4445). Расчеты проводились с использованием двухэкспонентного базиса (ДЭБ) сгруппированных гауссовых функций (ГФ) и ДЭБ с

X. 1983, 19, N 18

включением поляризац. ГФ. Установлено, что для 3-  
низших ПИ  $\text{Cl}_2$  использованный ЭОП позволяет пол-  
ностью воспроизвести результаты расчетов ПИ с уче-  
том всех электронов. Вычисление ПИ проводили с  
учетом поправок к теореме Купменса, получаемых по  
теории возмущений Рэля—Шрёдингера до 3-го по-  
рядка включительно. В том же приближении проведе-  
ны расчеты электронного строения и вертикальных ПИ  
молекул  $\text{ClN}_3$  и  $\text{ClNCO}$ . Показано, что включение в ба-  
зис поляризац. функций является необходимым усло-  
вием как для сбалансированного описания связи в ис-  
следованных молекулах, так и вычисления уточнен-  
ных ПИ. На основании данных расчетов ПИ с учетом  
поправок к теореме Купменса проведена новая интер-  
претация фотоэлектронных спектров молекул  $\text{ClN}_3$  и  
 $\text{ClNCO}$ .

И. А. Тополь

$Cl_2, Cl_2^+$

1982

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

*Kb. mex.  
pacific*

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

$C_2$

1982

McMaster Blair N.,

Smith Vedene H., et al.

расчёт  
электрон.  
плотностей.

Mol. Phys., 1982,

46, N3, 449-463.

●  
(сер.  $C_2$ ; III)

$Cl_2$  (2e)

[Ommuck 14584]

1982

Murthy C.S., Singer K.,  
et al.,

UK company  
nonoriginal

Chem. Phys. Lett.,  
1982, 90, No. 2, 95-98.

Cl<sub>2</sub>

[ Ommux 13866 ]

1982

Sakai Y, Muzinaov S.,

J. Chem. Phys., 1982,

76, 15, 2552 - 2557.

кв. сек-  
расем



(сер. Co; III)



Cl<sub>2</sub>

Ommuck 14562

1982

97:101160k Ultraviolet emission of molecular chlorine. Ishiwata, Takashi; Fujiwara, Ichiro; Tanaka, Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 89(6), 527-9 (Eng). The UV emission of Cl<sub>2</sub> from a new valence-shell state having 0<sub>u</sub><sup>+</sup> symmetry ( $T_e \approx 59774 \text{ cm}^{-1}$ ,  $r_e \approx 3.0 \text{ \AA}$ ) was obsd. by focusing  $\approx 500 \text{ nm}$  laser radiation to gaseous Cl. Excitation was achieved by virtual 2-photon absorption from the B<sup>3</sup>Π<sub>0<sub>u</sub> state formed by single-photon absorption stepwisely. The emission spectra showed transitions to the ground state as well as to the repulsive gerade state disassoc. to Cl(<sup>2</sup>P) + Cl(<sup>2</sup>P) products.</sub>

УФ спектры  
кислорода,

и т.д.

C.A. 1982, 97, N 12

Cl<sub>2</sub>

1983

Brinza D. E., Swartz  
B. A., et al.

$(B^3\Pi_{ou}^+ - X^1\Sigma_g^+)$

J. Chem. Phys.,  
1983, 79 (3), 1541-2.

●  
(cur. NeCl<sub>2</sub>; III)

Cl<sub>2</sub>

Om. 17202

1983

98: 206823c Potential energy parameters and shapes of the vibrational components of the 345-nm system of chlorine. Burkholder, James B.; Bair, Edward J. (Dep. Chem., Indiana Univ., Bloomington, IN 47405 USA). *J. Phys. Chem.* 1983, 87(11), 1859-63 (Eng). The spectral absorption coeff. of the vibronic continuum of Cl<sub>2</sub> was measured over the range 270-420 nm at 195 K, where there is little vibrational excitation, and at 301 K, where the vibrational excitation is appreciable. The spectral absorption coeff. data provide potential energy functions for both the <sup>1</sup>Π<sub>1u</sub> and the <sup>3</sup>Π<sub>0+u</sub> electronic states. These potential energy functions are used to examine the components of the shapes and spectral moments that can be attributed to different vibrational states, to rotational excitation, and to specific effects, such as the relationship of the spectrum of these components to changes in the electronic transition moment with vibrational coordinate. The relationship of this information to models of the continuous vibronic absorption by certain triat. mol. is discussed.

no memos.

φ-111e

©.A. 1983, 98, N24

Cl<sub>2</sub>

1983

8 Д655. Фотоэлектронная спектроскопия Cl<sub>2</sub> с угловым разрешением в зависимости от энергии фотонов от 18 до 70 эВ. Angle-resolved photoelectron spectroscopy of Cl<sub>2</sub> as a function of photon energy from 18 to 70 eV. Carison Thomas A., Krause Manfred O., Grimm Frederick A., Whitley Timothy A. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 2, 638—642 (англ.)

спектр

С целью изучения куперовских минимумов в сечениях фотоионизации молекул получены парциальные сечения верхних орбиталей  $2\pi_g$ ,  $2\pi_u$  и  $5\sigma_g$  молекулы Cl<sub>2</sub> и параметры углового распределения фотоэлектронов в зависимости от энергии фотонов в интервале 18—70 эВ. Минимумы четко проявляются в парциальных сечениях орбиталей  $2\pi_g$  и  $2\pi_u$  и соответствующих параметрах  $\beta$  в области 30—40 эВ и гораздо менее выражены в сечении фотоионизации  $5\sigma_g$  МО. Проведены расчеты тех же величин методом ХХ РВ. На основании эксперим. и теоретич. данных обсуждена природа куперовских минимумов. Е. П. Смирнов

СР. 1983, 18, N8

Cl<sub>2</sub>

1983

Dekock R. G., Jasperse  
G. P., et al.

рефер., J. Fluor. Chem., 1983,  
септем. 22, N 6, 575-584.

(ср. (ClClF)<sup>+</sup>; III)

Cl<sub>2</sub>

От. 17781

1983

2 Б1110. Теоретическая интерпретация резонансного спектра комбинационного рассеяния газообразного хлора. Theoretical interpretation of the resonance Raman

spectrum of gaseous chlorine. Ghandour F., Jacson M., Norby Svendsen E., Oddershede Jens. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 5, 2150—2156 (англ.)

Теоретически рассчитан резонансный спектр КР газ. Cl<sub>2</sub> (I) в области основного колебания I и его первых 7 обертонов при возбуждении линией 3638 Å. Резонансный вклад оценивался в полуклассич. приближении, учитывался также нерезонансный вклад в интенсивность линий КР (неэмпирич. методом МО). Показано, что резонансное увеличение интенсивностей линий КР обусловлено в основном вкладом перехода  ${}^1\Pi(1u) \rightarrow {}^1\Sigma_g^+$  I. Небольшие изменения дипольного момента I при этом не оказывают заметного влияния на распре-

спектр

Х. 1984, 19, N 2

деление интенсивностей в спектре. Отмечается заметный  
нерезонансный вклад в интенсивность линий, связанный  
с виртуальными переходами на вышележащие электрон-  
ные состояния (в частности, на уровень  $^1\Sigma_u^+ \sim 9,73$  эВ).

А. В. Бобров



Cl<sub>2</sub>

Om. 17781

1983

99: 113201d Theoretical interpretation of the resonance Raman spectrum of gaseous chlorine. Ghandour, F.; Jacon, M.; Svendsen, E. Noerby; Oddershede, Jens (Lab. Rech. Opt., Univ. Reims, 51062 Reims, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(5), 2150-6 (Eng). A theor. calcn. of the Raman band profiles of gaseous Cl<sub>2</sub> excited by a 3638-Å line was performed. The resonance part of the Raman amplitude was calcd. within a semiclassical approach and the nonresonant part by an ab initio calcn. The profiles of the overtones are well described by considering only the resonant scattering via the excited electronic state C<sup>1</sup>II(1u), and the anomalous value of the fundamental band intensity compared to the 1st overtone is due to virtual transitions to higher electronic states (normal Raman effect).

СКР, меорем.  
расем  
чекмпа

C.A. 1983, 99, N 14



$\text{Cl}_2$

1983

Huxley P., Murrell J.N.

потенци,  
р-из  
осн.

состоям.

J. Chem. Soc., Faraday  
Trans. 2 1983, 79 (2),

323-8.

( $\bullet$  сел.  $\text{Li}_2$ ; III)

Cl<sub>2</sub>

От. 18330

1983

6 Л1104. Идентификация новых ионных состояний молекулярного хлора. Identification of new ion-pair states of molecular chlorine. Ishiwata Takashi, Fujiwara Ichiro, Shinzawa Tsutomu, Tanaka Ikuzo. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 10, 4779—4787 (англ.)

Измерен спектр 3-фотонного возбуждения молекул хлора в области 7,3—7,7 эВ через промежуточное состояние  $B^3\Pi_{0u}^+$ . В качестве источников возбуждения использованы два независимо перестраиваемых лазера на красителе, накачиваемых  $N_2$ -лазером. Обнаружены три новых ионных состояний молекулы, проведен анализ их спектров свечения в зависимости от частоты и поляризации возбуждающего излучения. Колебательно-вращательный анализ полученных спектров позволил

М.А.

Ф. 1984, 18, 46

определить ряд спектроскопич. параметров новых нонных состояний и определить вид их симметрии ( $0_u^+$ ). Отмечено, что использованный метод позволяет заселять нижние колебательные подуровни этих состояний, возбуждение которых непосредственно из основного состояния не эффективно ввиду малости франк-кондонских факторов соответствующих переходов. Библ. 27.

---

X. В.

Cl<sub>2</sub>

От. 18330

1983

9 Б1150. Идентификация новых состояний ионных пар молекулярного хлора. Identification of new ion-pair states of molecular chlorine. Ishiwata T., Fujiwara I., Shinzawa T., Tanaka I. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 10, 4779—4787 (англ.)

Метод оптич. двойного резонанса с последующим трехфотонным поглощением применен для исследования состояний ионных пар молек. хлора. Возбуждение молекул из основного состояния  $X^1\Sigma_g^+$  в промежуточное состояние  $B^3\Pi_0^+$ , а затем в состояние ионных пар нечетной симметрии производилось двумя перестраиваемыми импульсными лазерами (с частотами генерации  $\nu_1$  и  $\nu_2$ ) на красителях, работающих при накачке от одного и того же азотного лазера. Индуцировались переходы в состояния ионных пар трех типов, отвечающих возбуждениям  $\nu_1 + (2\nu_2)$ ,  $\nu_1 + (\nu_1 + \nu_2)$  и  $\nu_2 +$

*V<sub>i</sub>, структура*

*X. 1984, 19, № 9*

$+ (2\nu_2)$ . В спектрах проявлялись  $O$ -,  $Q$ - и  $S$ -ветви. Анализ влияния изотопозамещения ( $^{35}\text{Cl}-^{35}\text{Cl}$  и  $^{35}\text{Cl}-^{37}\text{Cl}$ ), а также поляризац. измерения в спектрах позволили дать интерпретацию колебательно-вращательных спектров ионных пар и показать, что симметрия трех новых электронных состояний ионных пар —  $O_u^+$ . Обсуждены особенности электронной конфигурации этих состояний и влияние ее на характеристики состояний.

А. В. Бобров

Cl<sub>2</sub>

1983

9 Д110. Использование эффективных остовных потенциалов при расчете поправок теории возмущений к теореме Купманса. Вертикальные потенциалы ионизации Cl<sub>2</sub>, ClN<sub>3</sub> и ClNCO. Use of effective core potentials in perturbation corrections to the Koopmans theorem. Vertical ionization potentials of Cl<sub>2</sub>, ClN<sub>3</sub>, and ClNCO. Langhoff Stephen R., Jaffe Richard L., Chong Delano P. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4 Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap., Pt 3, 875—886 (англ.)

расчет М.П.,  
У,

Поправки к купмансовским вертикальным потенциалам ионизации (ПИ) валентных уровней молекул Cl<sub>2</sub>, ClN<sub>3</sub> и ClNCO вычислены в третьем порядке теории возмущений Рэля—Шрёдингера. В расчетах использовались эффективные остовные потенциалы атома Cl в форме Филиппса—Клейнмана (ФК) и Кристиан-

(42) 

ср. 1983, 18, № 9

сена — Ли — Питцера (КЛП). Установлено, что отличие полученных ПИ  $Cl_2$  от данных полного неэмпирич. расчета очень мало при применении потенциала КЛП (в среднем 0,04 эВ) и несколько больше — для потенциала ФК (0,1—0,4 эВ). Проведено отнесение пиков фотоэлектронных спектров  $ClN_3$  и  $ClNCO$ ; средние отклонения расчетных ПИ от экспериментальных составило соответственно 0,26 и 0,21 эВ. Отмечено удобство использования натуральных орбиталей в качестве одночастичного базиса при расчетах ПИ и ненадежность значений ПИ, получаемых методом ССП в двухэкспонентных базисах АО без поляризационных ф-ций.

А. В. Зайцевский

Cl<sub>2</sub>

Am. 16693 1983

10 Д493. Спектроскопическое исследование электронной структуры молекулы хлора в вакуумной УФ-области. Spectroscopic investigation of the electronic structure of the chlorine molecule in the VUV. Moeller Thomas, Jordan Bernhard, Gürtler Peter, Zimmerer Georg, Haack Dieter, Le Calve Jacques, Castex Marie-Claude. «Chem. Phys.», 1983, 76, № 2, 295—306 (англ.)

Методы вакуумной УФ абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии использованы для определения электронной структуры молекулы Cl<sub>2</sub>. Изучены следующие

М.А., Г.;

ср. 1983, 18, N10



щие возбужденные состояния, расположенные в области  $73\,000\text{--}81\,000\text{ см}^{-1}$ :  $2^1\Pi_u$ ,  $2^3\Pi(0_u^+)$ ,  $2^3\Pi(1_u)$  и  $1^1\Sigma_u^+$ . На основании франк-кондоновского анализа полученных данных установлено, что потенц. кривая состояния  $1^1\Sigma_u^+$  имеет два минимума. Результаты сопоставлены с *ab initio* расчетами (Peuerimhof S. D. et al. «Chem. Phys.», 1981, 57, 279). Получено хорошее согласие. Библ. 27. В. А. Е.

1983

Cl<sub>2</sub>

17 B201. Спектроскопическое исследование электронной структуры молекулы хлора в ВУФ. Spectroscopic investigation of the electronic structure of the chlorine molecule in the VUV. Moeller Thomas, Jordan Bernhard, Gürtler Peter, Zimmerer Georg, Le Calve Jacques, Castex Marie-Claude, Haaks Dieter. «Chem. Phys.», 1983, 76, № 2, 295—306 (англ.)

М.П., Цо;

X. 1983, 19,  
N 17

С высоким разрешением измерены спектр поглощения молекулы хлора в вакуумной УФ-области (73 000—81 000 см<sup>-1</sup>), спектр возбуждения флуоресценции (71 500—76 000 см<sup>-1</sup>) и спектр флуоресценции (50 000—75 000 см<sup>-1</sup>). В спектре поглощения выделены прогрессивные полосы, связанных со следующими переходами: 2<sup>1</sup>Π<sub>u</sub> — X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> (ν(0—0) = 74 443 см<sup>-1</sup>, ν'' = 0 — ν' = 0—4, ω<sub>e</sub>' = 634 см<sup>-1</sup>, ω<sub>e</sub>'x<sub>e</sub>' = 4 см<sup>-1</sup>, r<sub>0</sub>' = 1,91 Å); 2<sup>3</sup>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>) — X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> (ν(0—0) = 74 283, ν'' = 0 — ν' = 0—3, ω<sub>e</sub>' = 653, ω<sub>e</sub>'x<sub>e</sub>' = 4,5); 2<sup>3</sup>Π(1<sub>u</sub>) — X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> (ν(0—0) = 15 532, ν'' = 0 — ν' = 0—3), ω<sub>e</sub>' = 620, ω<sub>e</sub>'x<sub>e</sub>' = 2,5); 1<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> — X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> (для ν' ≤ 35 ω<sub>e</sub>' = 243, ω<sub>e</sub>'x<sub>e</sub>' = 0,33); 2<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> — X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> [ν(0—0) = 78 135, ω<sub>e</sub>' = 1040, ω<sub>e</sub>'x<sub>e</sub>' = 42] и неотнесенный

переход (полосы 77 450, 78 020, 78 662, 79 833  $\text{см}^{-1}$ ) (данные для  $^{35}\text{Cl}_2$ ). В спектрах флуоресценции с уровней  $v'=37$  и 38 состояния  $1^1\Sigma_u^+$  ( $\nu_{\text{возб.}}$  соотв. 73 440 и 73 560  $\text{см}^{-1}$ ) наблюдались развитые прогрессии полос  $v'-v_x''$ . Полученные  $\omega_e''$  и  $\omega_e''x_e''$  хорошо согласуются с известными значениями. Детально рассмотрен вклад перехода  $1^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  в спектры поглощения, возбуждения и флуоресценции. Потенциальная кривая состояния  $1^1\Sigma_u^+$  характеризуется наличием двух минимумов, что обуславливает нерегулярность колебательной структуры в спектре поглощения в области 73 000—74 500  $\text{см}^{-1}$ . Максимум потенциального барьера при  $v' < 40$ . С использованием результатов неэмпирич. расчетов потенциальных кривых молекулы  $\text{Cl}_2$  («Chem. Phys.», 1981, 57, 279) проведены модельные расчеты факторов Франка—Кондона для переходов  $1^1\Sigma_u^+(v') - X^1\Sigma_g^+(v'')$  в области 50 000—73 000  $\text{см}^{-1}$ . Приведены аналитические выражения и значения параметров для потенциальных кривых обоих состояний.

В. М. Ковба

Cl<sub>2</sub>

1983

3 Л489. Анализ структурных спектров флуоресценции молекулы Cl<sub>2</sub>, селективно возбуждаемой синхротронным излучением. Analysis of structured fluorescence spectra of Cl<sub>2</sub> molecule excited selectively with synchrotron radiation. Moeller T., Jordan B., Gürtler P., Zimmerer G., Haaks D., Le Calvé J., Castex M. C. «Spectral Line Shapes. Vol. 2. Proc. 6 Int. Conf., Boulder, Colo, July 12—16, 1982». Berlin; New York, 1983, 597—612 (англ.)

В области 140—310 нм получены спектры флуоресценции паров Cl<sub>2</sub>. Возбуждение осуществлялось монохроматизированным синхротронным излучением в области 105—200 нм. Спектральная ширина возбуждающего излучения не превышала 0,05 нм, а разрешающая

Спектр

фр. 1985, 18, №3

способность монохроматора в канале регистрации флуоресценции — 0,5 нм. Широкие полосы в области 190—200 нм интерпретированы с привлечением модели квантовой интерференции в системе связано-свободных переходов из возбужденного состояния  $^1\Sigma_u^+$  ионного типа в область континуума основного состояния. Выполнено предварительное отождествление трех систем переходов в областях 200—260 нм и ~305 нм. Библ. 29.

М. Т.

Cl<sub>2</sub>

1983

4 Б1182. Анализ структуры спектров флуоресценции молекулы Cl<sub>2</sub> селективно возбуждаемых синхротронным излучением. Analysis of structured fluorescence spectra Cl<sub>2</sub> molecule excited selectively with synchrotron radiation. Moeller T., Jordan B., Gürtler P., Zimmerer G., Haaks D., Calvé J. Le. «Spectral Line Shapes. Vol. 2. Proc. 6 th Int. Conf., Boulder, Colo. July 12—16, 1982». Berlin; New York, 1983, 597—612 (англ.)

В области 1400—3100 Å измерены спектры Фл молекулы Cl<sub>2</sub> возбуждаемые монохроматизированным синхротронным излучением (ширина полосы возбуждения 0,5 Å). Спектры в основном измерялись при  $\lambda_{\text{возб}} = 1350$  Å и низких давлениях хлора исключающих процессы релаксации и взаимодействия состояний при столкновениях молекул. В спектрах Фл получено несколько групп полос отнесенных к  $u \rightarrow g$ -переходам. При добавлении Ar или Kr наблюдалось резкое усиление.

спектр, М.П.

X. 1985, 19, N 4

ние испускания при 2580 А и тушение остальных полос Фл. Проанализирована временная зависимость интенсивности сигнала в области 2580 А и сделан вывод, что эта полоса связана с переходом  ${}^3\Pi_{2g} \rightarrow {}^3\Pi_{2u}$  ( $\tau = 16$  нс). Для полос 2550, 2200 и 1990 А значения  $\tau$  значительно меньше (соотв. 8, 5,5 и 3 нс). С целью идентификации верхних состояний и отнесения полос рассмотрены данные по спектрам поглощения хлора (переходы  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow 1^1\Sigma_u^+$ ,  $2^1\Sigma_u^+$ ,  ${}^4\Pi(0_u^+)$ ,  ${}^3\Pi_{1u}$ ,  ${}^1\Pi_{1u}$ ), результаты теор. расчетов потенциальных кривых этих электронных состояний, спектры возбуждения полной Фл, построены модельные спектры. Широкие полосы в диапазоне 1900—2000 А интерпретированы как переходы из внешней ямы (ионного типа) связанного состояния  $1^1\Sigma_u^+$  (характеризующегося потенц. кривой с двойным минимумом) в область континуума основного электронного состояния. Остальные полосы в диапазоне 2000—3100 А предварительно отнесены к переходам  ${}^3\Pi(0_u^+) \rightarrow {}^3\Pi(0_g^+)$ ,  ${}^3\Pi(0_u^+) \rightarrow 1^1\Sigma_g^+$ ,  $1^1\Sigma_u^+ \rightarrow 1^1\Sigma_g^+$  (состояние  $1^1\Sigma_g^+$  отталкивательное, коррелирует с двумя атомами хлора в состоянии  ${}^2P_{1/2}$ ). В. М. Ковба

Cl<sub>2</sub>

1983

100: 76771f Analysis of structured fluorescence spectra of the chlorine molecule excited selectively with synchrotron radiation.

Moeller, T.; Jordan, B.; Guertler, P.; Zimmerer, G.; Haaks, D.; Le Calve, J.; Castex, M. C. (II. Inst. Experimentalphys., Univ. Hamburg, Hamburg, Fed. Rep. Ger.). *Spectral Line Shapes, Proc. Int. Conf., 6th 1982* (Pub. 1983), 597-612 (Eng). Edited by Burnett, Keith. de Gruyter: Berlin, Fed. Rep. Ger. An anal. was made of fluorescence band of Cl<sub>2</sub> between 1400 and 3100 Å to yield information on upper states. A series of broad bands, in the region 1900-2000 Å, are interpreted in terms of quantum interference assocd. with bound-free transitions from the outer well (ionic type) of the  $^1\Sigma_u^+$  upper state towards the continuum of the ground state. Bound-free calcn. corroborates this assignment and verifies the reliability of the double well  $^1\Sigma_u^+$  potential curve proposed previously. Only slight modifications of the ab initio potential calcd. by S. D. Peyerimhoff (1981) were necessary to reach optimal agreement between exptl. and simulated spectra. The bands between 2000 and 2600 Å might be attributed to  $^3\Pi_{ou}^+ (T_e = 59927 \text{ cm}^{-1}) \rightarrow ^3\Pi_{og}^+$  and  $^3\Pi_{ou}^+ \rightarrow ^1\Sigma_g^+$  transitions, whereas the isolated band at 3050 Å might be assigned to  $^1\Sigma_u^+ \rightarrow ^1\Sigma_g^+$  repulsive state dissocg. in  $^2P_{1/2} + ^2P_{1/2}$

'atoms.

флуоресценция

М.А.

C.A. 1984, 100, N10



Cl<sub>2</sub>

Om. 16693

1983

98: 224583d Spectroscopic investigation of the electronic structure of the chlorine molecule in the VUV. Moeller, Thomas; Jordan, Bernhard; Guertler, Peter; Zimmerer, Georg; Haaks, Dieter; Le Calve, Jacques; Castex, Marie Claude (Inst. Experimentalphys., Univ. Hamburg, D-2000 Hamburg, 50 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1983, 76(2), 295-306 (Eng). Vacuum UV absorption spectroscopy and fluorescence anal. under selective optical excitation were combined to deduce the electronic structure of Cl<sub>2</sub>. Between 73,000 and 81,000 cm<sup>-1</sup>, 5 bound electronic states could be analyzed. Some of them are affected by pronounced Rydberg-valence mixing. Esp. the 1 <sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> state clearly yields a double-well structure which results from an avoided crossing between an ionic valence and a Rydberg state. The double-wall structure is responsible for an irregular vibrational sequence between 73,000 and 74,500 cm<sup>-1</sup> which either prevented an anal. in earlier investigations or lead to wrong assignments. The Franck-Condon factors of the 1 <sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> fluorescence with its bound-bound and bound-free contributions between ~ 73,000 and 50,000 cm<sup>-1</sup> are also severely affected by the double-well structure. The results are compared with the 1st ab initio calcns. of the electronic structure of Cl<sub>2</sub>. In general, excellent agreement was found.

Информ.

Служба

©. A. 1983, 98, N 26

Cl<sub>2</sub>

[ Om. 16943 ]

1983

Römel't J. B.,

meop.  
papier

Phys. Bl., 1983, 39, N 7,  
226-232.

1983

Cl<sub>2</sub>

99: 221346p Identification of new ion-pair states of molecular chlorine. Ishiwata, Takashi; Fujiwara, Ichiro; Shinzawa, Tsutomu; Tanaka, Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(10), 4779-87 (Eng). Three new ion-pair states of mol. Cl were identified by the double resonance method utilizing a sequential 3-photon absorption. Two independently tunable dye lasers were used to excite the Cl mols. into a specific rovibronic level of the  $B^3\Pi_{0_u^+}$  state, and subsequently into levels of ungerade excited states by a simultaneous 2-photon transition. The method enabled observing transitions to the low vibrational levels of ion-pair states in the energy range 7.3-7.7 eV, which were directly inaccessible from the ground state due to the small Franck-Condon factors. Their spectroscopic parameters were derived from the vibrational and rotational analyses of 2 sep. isotope species,  $^{35}\text{Cl}$ - $^{35}\text{Cl}$  and  $^{35}\text{Cl}$ - $^{37}\text{Cl}$ . The 2-photon transitions from the  $B^3\Pi_{0_u^+}$  state to ion-pair ones consisted of simple O, Q, and S branches. The polarization effect on their transition probability established that the symmetry of 3 ion-pair states was  $O_u^+$  in the Hund's case c notation. The properties of these ion-pair states are discussed in terms of the electron configuration.

(u.n.)

C.A. 1983, 99, N 26

Cl<sub>2</sub>

1983

Pitzer K. S.

Pracem  
ser. 12.

Relativistic Eff. Atoms,  
Mol., and Solids. Proc.

NATO Adv. Study Inst., Van-  
couver, 10-21 Aug., 1981. New  
York; London, 1983, 403-  
-420. (ser. F2; III)

Cl<sub>2</sub>

1983

98: 170286p Multiphoton dissociation of phosgene at 193 nm: formation of electronically excited diatomic chlorine. Wilson, M. W.; Rothschild, M.; Rhodes, C. K. (Dep. Phys., Univ. Illinois, Chicago, IL 60680 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(6, Pt. 2), 3779-84 (Eng). Two quantum excitation of OCl<sub>2</sub> with 193 nm radiation, although corresponding to an energy above the ionization limit, is obsd. to produce a yield upon disocn. into excited neutral fragments; namely, CO in the  $\nu = 7$  of its  $X^1\Sigma^+$  state and Cl<sub>2</sub> in the first electronically excited  $^3\Pi_g$  and  $^1\Sigma_u^+$  states of ionic character. Strong emissions originating from Cl<sub>2</sub><sup>\*</sup> were obsd. at 199 and 258 nm together with a weaker band at 244 nm. The radiative lifetime  $t_r$  of the Cl<sub>2</sub>( $^3\Pi_g$ ) state was detd. to be  $t_r = 23 \pm 2$  ns. Quenching rate consts. of the Cl<sub>2</sub>( $^1\Sigma_u^+$ ) level by rare gases were also measured. Strong enhancement of the 258 nm radiation was obsd. in the presence of He and Ne, while intense emissions from KrCl<sup>\*</sup> and XeCl<sup>\*</sup> indicate the role of at. displacement reactions of the type Cl<sub>2</sub><sup>\*</sup> + (Kr/Xe) → (Kr/Xe)Cl<sup>\*</sup> + Cl.

(2)

C. A. 1983, 98, N 20.

Cl<sub>2</sub>

1984

З Б4450. Квантовые выходы люминесценции Cl<sub>2</sub> в смеси с буферными газами. Бибинов Н. К., Виноградов И. П. «Химия высок. энергий», 1984, 18, № 5, 448—450

Получены квантовые выходы люминесценции для электронных переходов Cl<sub>2</sub>(D'→A'), XeCl(B→X), XeCl(B→A), Xe<sub>2</sub>Cl\* и Kr<sub>2</sub>Cl\* при фотовозбуждении Cl<sub>2</sub> в смеси с инертными газами светом с длиной волны 137 нм.

Автореферат

(+2)  1) XeCl, Xe<sub>2</sub>Cl    2) Kr<sub>2</sub>Cl

X. 1985, 19, №3.

Cl<sub>2</sub>

[Om. 20765]

1984

Burdett J.K., Lawrence N.J.,  
et al.,

Inorg. Chem., 1984, 23,  
N16, 2419-2428.

Электро-  
отрицат.;  
структура  
4  
св. 336 в  
мод-лах.

Cl<sub>2</sub>

1984

24 B1161. Исследование электронных спектров комбинационного рассеяния атомарного хлора, возбуждаемых аргоновым лазером. Studies of the electronic Raman spectra of atomic chlorine excited by an argon ion laser. Chang Hua, Ming Hong, Hwang Mei Hua. «J. Raman Spectrosc.», 1984, 15, № 3, 205—210 (англ.)

Измерены спектры электронного КР атомов Cl, возбуждаемые Ar<sup>+</sup>-лазером (4579, 4765, 4880, 5145 Å) в ячейке, содержащей чистый хлор при давл. 150, 300, 600, 1000, 1400 и более 2500 мм. В спектрах обнаружена полоса 882 см<sup>-1</sup>, связанная с электронным переходом между состояниями <sup>2</sup>P<sub>3/2</sub> и <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub> атомов хлора. Интенсивность этой полосы на два порядка меньше, чем полосы КР 560 см<sup>-1</sup> молекул хлора, а степень деполяризации составляет 0,77. Изучена зависимость интенсивности полосы от длины волны возбуждающей линии и мощности лазера. Показано, что интенсивность увеличивается с ростом частоты лазера и квадратич-

спектр

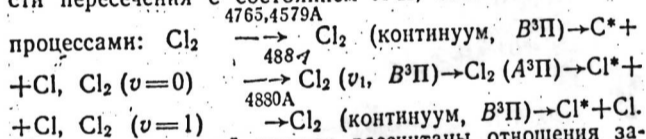
(H) 10

X. 1984, 19, № 24

Cl



но зависит от его мощности. Это свидетельствует об однофотонном процессе образования Cl. На основании измерений отношений интенсивностей стоксовых и антистоксовых линий определены так же зависящие от мощности лазера спектроскопич. т-ры для Cl и Cl<sub>2</sub>. Предложена модель фотодиссоциации при возбуждении в область континуума состояния B<sup>3</sup>ΠCl<sub>2</sub> и преддиссоциации колебательных уровней состояния B в области пересечения с состоянием A<sup>3</sup>Π, описываемая след.



На основании этой модели рассчитаны отношения заселенностей состояний <sup>2</sup>P<sub>1/2</sub> и <sup>2</sup>P<sub>3/2</sub> (Cl\*/Cl), к-рые хорошо согласуются с эксперим. данными. С. Б. Осин

Cl<sub>2</sub>

от 19655 1984

№12 Д254. Прилипание электронов к Cl<sub>2</sub>. Electron attachment to Cl<sub>2</sub>. McCorkle D. L., Christodoulides A. A., Christophorou L. G. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 109, № 3, 276—279 (англ.)

С помощью метода роя (Christophorou L. G. Atomic and molecular radiation physics. N. Y., 1971) определены зависимости констант скорости прилипания электронов к Cl<sub>2</sub> от средней энергии электронов, дрейфующих в смеси Cl<sub>2</sub> и N<sub>2</sub> при  $T$ -рах в интервале 213—323 К и энергиях электронов в интервале 0,04—0,78 эВ. Величина константы скорости увеличивается с  $T$ , и положение максимума зависимости константы скорости от энергии электронов смещается от 0,1 эВ при 213 К до ~0,07 эВ при 298 К. Прилипание электронов происходит из основного состояния молекулы  $^1\Sigma_g^+Cl_2$  по диссоциативному механизму через основное состояние иона  $^2\Sigma_u^+Cl_2^-$ . Термические константы скорости прилипания в исследованном интервале  $T$  монотонно увеличиваются от  $1,22 \cdot 10^{-9}$  до  $2,14 \cdot 10^{-9}$  см<sup>3</sup>/с. Г. К.

Ac;

Ф. 1984, 18, N12

$\text{Cl}_2$

1984

Dyke J. M., Josland G. D.  
et al.

Chem. Phys., 1984,  
91, N 3, 419-424.

раєїїїїї  
єр. н.,  
Г;

● (сєт.  $\text{F}_2$ ; III)

Cl<sub>2</sub>

1984

Зеринский А. П.,

Теор. и экперим. химия,  
1984, 20, N 2, 212-215.

расчет  
Ze;

● (см. N<sub>2</sub>, III)

$Cl_2$

1984

8 Л145. Неэмпирические расчеты силы осциллятора спин-запрещенного перехода  $Cl_2(2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+)$ . Ab initio studies on the oscillator strength of the  $2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  spin-forbidden transition in  $Cl_2$ . Grein Friedrich, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1928—1932. (англ.; рез. фр.)

Теоретически исследован спин-запрещенный переход  $2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  молекулы  $Cl_2$ . Выполнены неэмпирич. расчеты спин-орбитального взаимодействия в  $Cl_2$  при равновесном межъядерном расстоянии основного состояния, учитывающие взаимодействие всех возбужденных состояний вплоть до  $90\,000\text{ см}^{-1}$ . Установлено, что существенным является лишь взаимодействие состояний  $2^1\Pi_u$  и  $2^3\Pi_u$ . Для силы осциллятора перехода  $2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  получено значение 0,0084, которое всего в 8,3 раза меньше силы осциллятора перехода  $2^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ .

В. С. Иванов

Вероятность  
переходов,

млн.

фр. 1985, 18, № 8

Cl<sub>2</sub>

1984

102: 86618s Ab initio studies on the oscillator strength of the  $2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  spin-forbidden transition in molecular chlorine. Grein, Friedrich; Peyerimhoff, Sigrid D.; Buenker, Robert J. (Dep. Chem., Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 6E2). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1928-32 (Eng). A relatively strong absorption corresponding to the spin-forbidden transition  $2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  of Cl<sub>2</sub> was obsd. earlier. Ab initio spin-orbit studies at the ground state equil. distance were performed, allowing for the coupling of all excited states up to 90,000 cm<sup>-1</sup>. Only 2  $^1\Pi_u$  couples with  $2^3\Pi_u$  to any significant extent. The oscillator strength for  $2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  was 0.0084, a factor of 8.3 smaller than the oscillator strength for  $2^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ .

$2^3\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$

ab initio

param

считается

с.А.1985, 102, N10

Cl<sub>2</sub>

Ом. 19294 1984

22 Б1175. Ступенчатое двухфотонное возбуждение Cl<sub>2</sub> в ионно-парное состояние E(0<sub>g</sub><sup>+</sup>). Stepwise two-photon excitation of Cl<sub>2</sub> to the E(0<sub>g</sub><sup>+</sup>) ion-pair state. Ishiwata Takashi, Tanaka Ikuzo. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 107, № 4—5, 434—437 (англ.)

Исследовано возбужденное ионно-парное электронное состояние E(0<sub>g</sub><sup>+</sup>) молекулы Cl<sub>2</sub>. Измерена и проанализирована колебательно-вращательная структура спектров испускания хлора возбуждаемых в результате последовательного ступенчатого двухфотонного поглощения через уровни состояния B<sub>3</sub>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>). Дан перечень возбуждаемых по схеме X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>(v'', J'') → B<sup>3</sup>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>)(v, J) → E0<sub>g</sub><sup>+</sup>(v', J') переходов. Значения мол. постоянных <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub>(E) (в см<sup>-1</sup>, r<sub>e</sub> в Å): T<sub>e</sub> = 57819,7, ω<sub>e</sub> = 250,3, ω<sub>e</sub>x<sub>e</sub> = 0,82, B<sub>e</sub> = 0,1157, α<sub>e</sub> = 5,4 · 10<sup>-4</sup>, D = 1,0 · 10<sup>-7</sup>, r<sub>e</sub> = 2,887. Вычислены и сопоставляются с эксперим. интенсивностями полос факторы Франка — Кондона для перехода E0<sub>g</sub><sup>+</sup>, v' — B<sub>3</sub>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>)(v). При

И. П.

X. 1984, 19, № 22

расчете факторов ФК использовался потенциал РКР для состояния  $B$  и потенциал Морзе для состояния  $E$ . Состояние  $E$  лежит на  $\sim 700$   $\text{см}^{-1}$  ниже чем два других состояния  $0_g^+$  коррелирующих с парой  $\text{Cl}^-(^1S) + \text{Cl}^+(^3P)$  («J. Chem. Phys.», 1983, 79, 4779).

В. М. Ковба





Cl<sub>2</sub>

От 19294

1984

11 Л290. Ступенчатое двухфотонное возбуждение Cl<sub>2</sub> в парно-ионное состояние  $E(0_g^+)$ . Stepwise two-photon excitation of Cl<sub>2</sub> to the  $E(0_g^+)$  ion-pair state. Ishiwata Takashi, Tanaka Ikuzo. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 107, № 4—5, 434—437 (англ.)

Предварительное сообщение о спектроскопическом исследовании парно-ионного состояния  $E(0_g^+)$  молекулы Cl<sub>2</sub>. Путем двухфотонного ступенчатого возбуждения через состояние  $B^3\Pi(0_u^+)$  получен эмиссионный спектр с разрешенной колебательно-вращательной структурой  $E-B$ -перехода. Проведен анализ спектра в зависимости от длины волны возбуждающего света и определены спектроскопич. константы состояния  $E$ . Е. С.

М.П.

ср. 1984, 18, №11

Cl<sub>2</sub>

(Om. 19294)

1984

/ 101:45770w Stepwise two-photon excitation of molecular chlorine to the  $E(0_g^+)$  ion-pair state. Ishiwata, Takashi; Tanaka,

Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 107(4-5), 434-7 (Eng). The  $E(0_g^+)$  ion-pair state of Cl<sub>2</sub> was investigated by stepwise 2-photon excitation through the  $B^3\pi(0_u^+)$  state. The method yields rovibronically resolved E-B emission spectra, which are analyzed as a function of excitation wavelength. The  $E(0_g^+)$  state was identified as lying at  $T_e = 57,820 \text{ cm}^{-1}$  and is characterized by  $\omega_e = 250 \text{ cm}^{-1}$  and  $r_e = 2.89 \text{ \AA}$ .

( $E(0_g^+)$ ,  $T_e = 57820$ )  
u.n.

c. A. 1984, 101, N 6

Cl<sub>2</sub>

1984

Kawasaki Masahiro,  
Kasatani Kazuo, et al.

Спектр

Chem. Phys., 1984,  
91, N 2, 285-291.

(ср. Cl<sub>2</sub> 50; III)

Cl<sub>2</sub>

1984

Leasure S. C., Martin T. P.,  
et al.

meop. —  
paereen J. Chem. Phys. 1984,  
80(3), 1186-1200.

(cur. Naz; III)

Cl<sub>2</sub>

1984

Zonkhuyzen H., De Lange  
C. A.

u. n.

Chem. Phys., 1984, 89,  
N2, 313 - 322.

● (ver. F<sub>2</sub>; III)


Cl<sub>2</sub>

1984

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

meop.  
paccietti

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

( cel. Al<sub>2</sub><sup>+</sup>; III)

Cl<sub>2</sub>

1984

23 B1147. Фотодиссоциация Cl<sub>2</sub><sup>+</sup>, Br<sub>2</sub><sup>+</sup> и J<sub>2</sub><sup>+</sup>. Photo-dissociation of Cl<sub>2</sub><sup>+</sup>, Br<sub>2</sub><sup>+</sup> and J<sub>2</sub><sup>+</sup>. McLoughlin R. G., Morrison J. D., Smith D. L. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.», 1984, 58: Fundam. Aspects Gas Phase Ion Processes. Collect. Invited Pap. Dedicated Mem. H. M. Rosenstock (1928—1982), 201—215 (англ.)

С использованием масс-спектрометра измерены спектры индуцированной лазером фотодиссоциации Cl<sub>2</sub><sup>+</sup>, Br<sub>2</sub><sup>+</sup> и J<sub>2</sub><sup>+</sup> в области 1,80—2,55 эВ. Ионизация осуществлялась при энергиях электронов, превышающих на 1—2 эВ необходимые для образования первых возбужденных состояний A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub> каждого иона галогена. В спектрах разрешена колебательная структура переходов A—X и на основании ее анализа, а также рассмотрения кривых потенциальной энергии Cl<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub> и J<sub>2</sub> предложен вероятный механизм преддиссоциации исследуемых ионов. Предполагается, что 1-ой ступенью процесса является заселение колебательных уровней состояния B<sup>2</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> посредст-

Кривая потерь.  
Жерми

15

X. 1984, 19, N 23

Br<sub>2</sub>, J<sub>2</sub> (кривая потерь Жерми)

вом фотоиндуцированных переходов из колебательных уровней состояния  $A^2\Pi_u$ , к-рые в свою очередь заселяются при ионизации под действием электронного удара в источнике ионов масс-спектрометра. Второй ступенью является преддиссоциация уровней  $B^2\Sigma_g^+$ , вызванная взаимодействием с др. близлежащим электронным состоянием, с образованием продуктов в основном состоянии  $X^+(^3P) + X(^2P^0)$ . Обсуждены возможные типы электронных состояний  $X_2^+$  (дублетные или кватетные), к-рые могут вызывать преддиссоциацию состояния  $B$ . В предположении дублетного механизма оценено время жизни состояния  $A$  (1—10 мкс). С. Б. Осип

$Cl_2^+$ ,  $Br_2^+$ ,  $I_2^+$  (фотоиониз.)

обра  
хол.



Cl<sub>2</sub>

1984

/100: 218280w VUV absorption and fluorescence of the chlorine molecule. Moeller, T.; LeCalve, J.; Castex, M. C.; Hanks, D.; Jordan, B.; Guertier, P.; Zimmerer, G. (Inst. Exp. Phys., Univ. Hamburg, 2000 Hamburg, 50 Fed. Rep. Ger.). *Ann. Isr. Phys. Soc.* 1984, 6, 374-6 (Eng). The 1st Rydberg states of the Cl<sub>2</sub> mol. are strongly perturbed by valence states. A study of vacuum UV (VUV)-absorption and fluorescence shows that the absorption spectra can be interpreted in the adiabatic approxn., whereas the fluorescence spectra are partly better explained in the diabatic approxn.

Pugden. com

C.A. 1984, 100, N26

1984

U<sub>2</sub> Peiermkoff Sigrid D.,  
Gohmann Helmut, et al.

SASP'84: Symp. Atom. and  
Surface Phys., Maria Alm,  
Salzburg, 29 Jan-4 Febr.,  
1984. Contrib. Innsbruck,  
S. A., 9-15.

(Ser. Na. Mg<sup>+</sup>; III)

Работы  
экспедиции,  
с. 12.,  
по теме  
кривых

Cl<sub>2</sub>

(DM-20786)

1984

Powell B. M., Meale K. M.,  
et al.

Mol. Phys., 1984, 53, N 4,  
929-939.



(2)

Cl<sub>2</sub>

[Om. 20766]

1984

Ravenek W., Baerends E. J.,

meop. pacem  
re, de, Cl<sub>2</sub>

J. Chem. Phys., 1984, 81,  
N2, 865-875.

Cl<sub>2</sub>

1984

11 B1038. Исследование молекулы Cl<sub>2</sub> с помощью вариационного метода ячеек. Study of the Cl<sub>2</sub> molecule by the variational cellular method. Rosato Abel, Lima Marco A. P. «Rev. bras. fis.», 1984, 14, № 1, 93—102 (англ.; рез. порт.)

Вариационным методом ячеек («Phys. Rev. Lett.», 1978, 40, 49) рассчитано электронное строение молекулы Cl<sub>2</sub> в основном (<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>) и первом возбужденном (<sup>1</sup>Π<sub>u</sub>) состоянии. Для обоих состояний вычислены потенциальные кривые и соотв. спектроскопич. постоянные. Спектроскопич. постоянные основного состояния  $R_e=3,90$  ат. ед.,  $D_e=3,15$  эВ,  $\omega_e=490$  см<sup>-1</sup> согласуются с эксперим. величинами  $R_e=3,757$  ат. ед.,  $D_e=$

М. Л., 9;

X. 1985, 19, N 11

$=2,5139$  эВ,  $\omega_c=559,71$  см<sup>-1</sup> и с данными неэмпирич. расчетов. Для возбужденного состояния  ${}^1\Pi_u$  величина  $R_c=4,50$  ат. ед. хорошо согласуется с эксперим. значением  $R_c=4,52$ , однако величина  $\omega_c=382$  см<sup>-1</sup> существенно превышает наблюдаемое значение  $\omega_c=261,9$ . Наибольшее расхождение обнаружено для энергии возбуждения  $T_c({}^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1\Pi_u)$ : эксперим. величина  $18310,5$  см<sup>-1</sup> более, чем в 2 раза превышает вычисл. значение  $8888$  см<sup>-1</sup>. Эти расхождения объяснены неадекватностью одного и того же базиса для основного и возбужденного состояний. В приближениях переходного состояния и  $\Delta$ ССП рассчитаны вертикальные потенциалы ионизации с МО  $5\sigma_g$ ,  $2\pi_u$  и  $2\pi_g$ . Установлено, что потенциалы, рассчитанные в приближении переходного состояния, лучше согласуются с экспериментом, чем вычисленные в приближении  $\Delta$ ССП, хотя оба приближения и не приводят к существенным отличиям от того, что дает теорема Купманса.

И. А. Тополь

Cl<sub>2</sub>

1984

6 Д117. Изучение молекулы Cl<sub>2</sub> вариационным методом ячеек. Study of the Cl<sub>2</sub> molecule by the variational cellular method. Rosato Abel, Lima Marco A. P. «Rev. bras. fis.», 1984, 14, № 1, 93—102 (англ.; рез. порт.)

Для основного  $^1\Sigma_g^+$  и первого возбужденного  $^1\Pi_u$  электронных состояний молекулы Cl<sub>2</sub> вариационным методом ячеек рассчитаны потенц. кривые и спектроскопич. постоянные. Спектроскопич. постоянные основного состояния (в скобках указаны эксперим. значения):  $R_e = 3,90$  (3,757) ат. ед.,  $D_e = 3,15$  (2,5139) эВ и  $\omega_e = 490$  (559) см<sup>-1</sup> хорошо согласуются с эксперим. величинами. Для состояния  $^2\Pi$  рассчитанная величина  $R_e = 4,50$  ат. ед. практически совпадает с эксперим. значением 4,52 ат. ед., однако теоретич. значение  $\omega_e = 261$  см<sup>-1</sup> существенно превышает наблюдаемое значение 260 см<sup>-1</sup>. Отмечено также большое расхождение (более чем в 2 раза) между рассчитанным и эксперим.

М.П., З;

ср. 1985, 18, № 6

значениями энергии перехода  ${}^1\Sigma_g^+ - {}^1\Pi_u$ , что объясняется использованием одного и того же базиса в расчетах основного и возбужденного состояний. С использованием приближения переходного состояния, а также по разностям хартри-фоковских энергий рассчитаны вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) с МО  $5\pi_g$ ,  $2\pi_u$  и  $2\pi_g$  в основном состоянии. Значения ПИ, полученные в первом из упомянутых приближений, лучше согласуются с экспериментом.

А. И. Дементьев



Cl<sub>2</sub>

От. 19225

1984

19 B1031. Коэффициенты взаимодействия на больших расстояниях  $C_5$  и  $C_6$  для 23 молекулярных состояний Cl<sub>2</sub> и Br<sub>2</sub>. Coefficients d'interaction à grande distance  $C_5$  et  $C_6$  pour les 23 états moléculaires de Cl<sub>2</sub> et de Br<sub>2</sub>. Saute M., Busseray B., Aubert-Frèçon M. «Mol. Phys.», 1984, 51, № 6, 1459—1474 (фр.; рез. англ.)

На основе кривых РКР для состояния  $VO_u^+$  молекул Cl<sub>2</sub> и Br<sub>2</sub> определены полуэмпирически коэф.  $C_5$  и  $C_6$  взаимодействия на больших расстояниях ( $\geq 5$  А) для основного и 22 возбужденных состояний этих молекул. Выписаны ф-лы и табулированы значения матричных элементов квадрупольного взаимодействия и взаимодействия индуцированный диполь — индуцированный диполь. Найдено, что коэф.  $C_5$  обеих молекул ме-

спектр, м.п.

(4) Br<sub>2</sub>

X. 1984, 19, N 19

няются от состояния к состоянию как по величине, так и по знаку, тогда как коэф.  $C_6$  почти не меняются (разброс  $\sim 3\%$ ). Даны оценки нек-рых матричных элементов дипольной динамич. поляризуемости атомов  $Si$  и  $Bg$ ; а также их статич. дипольной поляризуемости.

В. Я. Беспалов

Cl<sub>2</sub>

От.

19225 1984

11 Д261. Коэффициенты взаимодействия для больших расстояний,  $C_5$  и  $C_6$ , для 23 молекулярных состояний  $Cl_2$  и  $Br_2$ . Coefficients d'interaction à grande distance  $C_5$  et  $C_6$  pour les 23 états moléculaires de  $Cl_2$  et de  $Br_2$ . Saute M., Busseray B., Aubert-Frécon M. «Mol. Phys.», 1984, 51, № 6, 1459—1474 (фр.; рез. англ.)

Развитый ранее на примере молекулы  $J_2$  метод определения коэф.  $C_5$  и  $C_6$  для группы молекулярных состояний («J. Chem. Phys. 1982, 77, 5639) применен к молекулам  $Cl_2$  и  $Br_2$ . На основании потенциальных кривых для состояний  $V 0^+$  молекул  $Cl_2$  и  $Br_2$  найдены коэффициенты мультипольного разложения  $C_5$  и  $C_6$  для 22 других молекулярных состояний. Найдены также статические и динамич. поляризуемости атомов хлора и брома, которые удовлетворительно согласуются с известными величинами. Е. А. Ж.

☒

④

фр. 1984, 18, N 11



$Br_2$

Cl<sub>2</sub>

1984

Shattacharjee S.,  
Sannigrahi A. B.

геометрия,  
струк-  
тура

Indian J. Chem., 1984,  
23, N4, 285-291.

(с.с. F<sup>±</sup>; III)

Cl<sub>2</sub>

10m. 18348

1984

Р-иэ

Распределен.  
вероятностей.

Spiridonov V. P., Butayev  
B. S., et al.,

Chem. Phys. Lett., 1984,  
103, N5, 363-368.

Cl<sub>2</sub>

DM 19516 1984

23 B1110. Электронная структура Cl<sub>2</sub> в области от 5 до 15 эВ по спектрам потерь энергии электронов. Electronic structure of Cl<sub>2</sub> from 5 to 15 eV by electron energy loss spectroscopy. Spence D., Huebner R. H., Tanaka H., Dillon M. A., Wang R.-G. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 7, 2989—2996 (англ.)

. С высоким разрешением 50—60 мэВ измерены спектры потерь энергии электронов (СПЭЭ) в области  $\Delta E$  от 5,5 до 14,5 эВ для молекул Cl<sub>2</sub>. Спектры измерены при значении энергии перв. пучка 200 эВ и углах рассеяния  $\theta = 3^\circ$  и  $9^\circ$ . Т-ра исследуемого газа изменялась от комнатной до  $150^\circ\text{C}$ . Полученные при  $\theta = 3^\circ$  СПЭЭ близки к спектрам оптич. поглощения (СОП) Cl<sub>2</sub> и наиболее интенсивные полосы в них связаны с возбуждением разрешенных дипольными правилами отбора (ДПО) переходов на ридберговские уровни. Вместе с тем в СПЭЭ наблюдается слабая полоса при  $\Delta E \approx 8$  эВ, к-рая объяснена запрещенным ДПО по четности возбуждением  $4s\sigma_g^1\Pi_g$  состояния. С увеличением  $\theta$  относ. интенсивность этой полосы резко возрастает и, кро-

комментарии,  
структура

х. 1984, 19, № 23

ме того, в СПЭЭ появляются дополнительные линии, связанные с запрещенными ДПО переходами (в том числе ранее не наблюдавшиеся). Особенности в области  $\Delta E \approx 10$  эВ объяснены возбуждением  $4d\sigma$  или  $4d\delta^1\Pi_g$  состояний. Из сопоставления измеренных при различных т-рах СПЭЭ с лит. спектрами пороговых электронов (СПЭ) заключено, что часть линий в последних связана с переходами из колебательно-возбужденных уровней основного состояния  $Cl_2(^1\Sigma_g)$ . На основе полученных результатов предложена новая нумерация последовательности пиков в колебательной структуре полосы, соотв-щей возбуждению  $4s\sigma^1\Pi_g$  состояния. Полоса в СПЭЭ с началом при  $\Delta E = 9,7$  эВ объяснена перекрывающимися колебательными структурами  $2^3\Pi_u$  и  $2^1\Sigma^+_u$  состояний, интенсивности к-рых преобладают при  $\theta = 9^\circ$  и  $3^\circ$  соотв. Сильные различия в относит. интенсивностях энергетически совпадающих компонент колебательной структуры, наблюдающейся в СОП и СПЭ при 9,7 эВ, объяснены тем, что в первом случае возбуждается  $2^1\Sigma^+_u$  состояние, а во втором —  $2^3\Pi_u$ .

О. А. Басченко

Cl<sub>2</sub>

От - 19516 1984

1 Д210. Электронная структура Cl<sub>2</sub>, изученная методом спектроскопии энергетических потерь электронов в интервале (5—15) эВ. Electronic structure of Cl<sub>2</sub> from 5 to 15 eV by electron energy loss spectroscopy. Spence David, Huebner R. H., Tanaka H., Dillon M. A., Wang R.-G. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 7, 2989—2996 (англ.)

В интервале энергетич. потерь (5,5—14,5) эВ при углах рассеяния (3—9)° и энергии налетающих электронов 200 эВ получены спектры энергетич. потерь электронов высокого разрешения для молекул Cl<sub>2</sub>. При малых углах рассеяния спектры хорошо согласуются со спектрами оптич. поглощения. Наблюдаемые спектры обусловлены в основном оптически разрешенными ридберговыми состояниями; некоторые слабые максимумы обусловлены возбуждением запрещенных состояний. При больших углах рассеяния в спектрах обнаружены

Электронная  
структура

СФ. 1985, 18, N1.



дополнительные структуры, соответствующие возбуждению других возбужденных состояний. При этом обнаружена полоса, ранее не наблюдавшаяся. Анализ полученных результатов позволил объяснить различия между ранее измеренными спектрами фотопоглощения синхротронного излучения и спектрами порогового возбуждения электронным ударом. Н. В. В.



Cl<sub>2</sub>

(Om. 19516)

1984

100: 182652c ~~Electronic structure of diatomic chlorine from 5 to 15 eV by electron energy.~~ Spence, David; Huebner, R. H.; Tanaka, H.; Dillon, M. A.; Wang, R. G. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(7), 2989-96 (Eng). The 1st high resolu. electron energy loss spectra were obtained for Cl<sub>2</sub> over the extended energy-loss range 5.5-14.5 eV at scattering angles between 3 and 9° for an incident electron energy of 200 eV. Spectra obtained at small scattering angles correspond closely to optical absorption spectra, the most prominent features arising from excitation of optically allowed Rydberg states, with other smaller features due to excitation of forbidden states. The larger angle spectra show addnl. structures corresponding to excitation of other forbidden states and reveal a previously unobsd. band. These angular scattering measurements explain some apparent differences between synchrotron radiation photoabsorption and threshold electron impact excitation spectra, and indicate some structures in the latter measurements to be mislabeled due to the presence of hot bands.

CHEM

C:A 1984, 100, N 22

Cl<sub>2</sub>

1984

Ravenek W., Baerends E. J.

раствор  
ст. н.

J. Chem. Phys., 1984, 81,  
N 2, 865 - 875.

● (с.с. CO; III)

Cl<sub>2</sub>

1984

Stevens Walter J.,  
Basch Harold, et al.

Рачеѝм  
д. н.,  
рочемп,  
снрुकм.

J. Chem. Phys., 1984,  
81, N 12, Pt 2, 6026 -  
- 6033.

(см. СН<sub>4</sub>; III)

Cl<sub>2</sub>

UM d.d. 339

1985

6 Б1033. Влияние базисных наборов высших поляризованных функций на результаты молекулярных неэмпирических расчетов. III. Основное состояние Cl<sub>2</sub> в сравнении с другими двухатомными молекулами. The impact of higher polarization basis sets on molecular ab initio results. III. The ground state of Cl<sub>2</sub> in comparison with other diatomics. Becherer Ralf, Ahlrichs Reinhart. «Chem. Phys.», 1985, 99, № 3, 389—395 (англ.)

Методами конфигурац. взаимодействия (КВ), одно- и многоконфигурац. методами ССП и в приближении функционала связанных пар рассчитаны полная энергия, энергия диссоциации и равновесное расстояние для основного состояния молекулы Cl<sub>2</sub>. Большое внимание уделено сходимости результатов по отношению к базисному набору функциями s-, p-, d-, f-, и g-типа.

А. В. Немухин

расчет М.П.  
До

х. 1986, 19, № 6.

Cl<sub>2</sub>

DM 22339 1985

/ 104: 10832c The impact of higher polarization basis sets on molecular ab initio results. III. The ground state of molecular chlorine in comparison with other diatomics. Becherer, Ralf; Ahlrichs, Reinhart (Inst. Phys. Chem. Elektrochem., Univ. Karlsruhe, 7500 Karlsruhe, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1985, 99(3), 389-95 (Eng). The ground-state potential curve of Cl<sub>2</sub> near the equilibrium internuclear distance ( $R_e$ ) was calcd. by means of the SCF, MC-SCF, CI(SD), and the recently proposed (A., et al., 1985) coupled-approx. functional (CPF) methods. The convergence of the total energy, dissoen. energy ( $D_e$ ), and  $R_e$  studied with various basis sets that included up to three  $d$ , two  $f$ , and one  $g$  set. Higher polarization functions had a larger effect than for F<sub>2</sub> (K. Jankowski, et al., 1985) for all methods; the  $g$  set affected  $D_e$  by 0.15 eV and  $R_e$  by 0.02  $a_0$  on the CPF level. The most elaborate calcn., on the CPF [7,4,3,2,1] level, yielded  $D_e$  and  $R_e$  with an accuracy of 0.08 eV and 0.02  $a_0$ . The same accuracy was obtained for the MC-178 (complete active space)-SCF treatment employing a 2d1f polarization basis set. The order of the polarization functions according to their relative importance was:  $d^{(1)} > f^{(1)} > d^{(2)} > f^{(2)} \approx d^{(3)} > g^{(1)}$  for the SCF, and  $d^{(1)} > f^{(1)} > d^{(2)} > g^{(1)} > f^{(2)} \approx d^{(3)}$  for methods including external correlation, CI(SD), or CPF. A comparison of the results for N<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>, P<sub>2</sub> (A., et al., 1985), and Cl<sub>2</sub> showed the higher polarization functions  $d^{(3)}$ ,  $f^{(2)}$ ,  $g^{(1)}$  to contribute 0.1 (F<sub>2</sub>) to 0.3 eV (F<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>) to  $D_e$ , and affect  $R_e$  by 0.005  $a_0$  (N<sub>2</sub>) to 0.017  $a_0$  (P<sub>2</sub>).

nomeru. p-141,  
meop. pacem

e. A. 1986, 104, N2

Cl<sub>2</sub>

Bieger W., Seifert G., et al.

1985

Расчет  
энергии  
ионизации,  
M

Z. phys. Chem. (DDR),  
1985, 266, N4, 751-763.

• (ср. CO; III)

Cl<sub>2</sub>

1985

Dannenberg J. J.,

Rayer J. C., et al.

Do; THEOCHEM 1985, 24

(3-4), 343-59.

(see. M<sub>2</sub>; III)



Cl<sub>2</sub>

1985

2 Л473. Фотолиз УФ-излучением и внутренняя динамика молекулы Cl<sub>2</sub> в аргоновой матрице при температуре 4,2 К. Ultraviolet photolysis and internal dynamics of Cl<sub>2</sub> in an argon matrix at 4,2 K. Fournier J., Salama F., Le Roy R. J. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 16, 3550—3534 (англ.)

Получены и интерпретированы спектры испускания молекул Cl<sub>2</sub> в Ar-матрице при низкой конц-ии Cl<sub>2</sub> (0,001 моль). Спектры возбуждались импульсными резонансными лампами с энергиями излучения 6,0; 8,4; 10,0 эВ. Наряду с дискретными спектрами, соответствующими переходам в основное состояние, наблюдался

спектр

ср. 1986, 18, № 2



широкий пик с центром около 4 эВ, который интерпретирован авторами, как переход со дна внешнего минимума потенц. кривой состояния ионной пары  ${}^3\Pi_g$ , имеющего два минимума, в отталкивательное состояние  ${}^3\Sigma_u^+$ , которое диссоциирует на атомы в основном состоянии. Динамика излучения второго типа свидетельствует о том, что в механизме заселения излучающего уровня доминирующую роль играет туннелирование между внутренним и внешним минимумами состояния  ${}^3\Pi_g$ . Отмечены существенные различия между расчетными и эксперим. свойствами излучения из состояния ионной пары.

М. А.

Cl<sub>2</sub>

1985

20 Б4377. Первое наблюдение ионо-парного состояния  $f(0_g^+)Cl_2$  методом оптико-оптического двойного резонанса. First observation of the  $f(0_g^+)$  ion-pair state of  $Cl_2$  by optical-optical double resonance. Ishiwata Takashi, Shinzawa Tsutomu, Kusayanagi Tatsuo, Tanaka Ikuzo. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 4, 1788—1791 (англ.)

Впервые зарегистрирован спектр двухфотонного возбуждения флуоресценции (Фл)  $Cl_2$  в области энергии  $h\nu=7$  эВ с использованием двух импульсных перестраиваемых лазеров на красителе. Молекулу  $Cl_2$  из основного состояния  $X^1\Sigma_g^+$  сначала возбуждали в состояние  $B^3\Pi(0_u^+)$  лазером накачки в видимой области (500—520 нм), а затем — зондирующим лазером в области 230—255 нм — в ионо-парное состояние  $f(0_g^+)$ , коррелирующее с  $Cl^-(^1S) + Cl^+(^3P_0)$  у порога диссоциации. Двухфотонное возбуждение через промежуток состояние обеспечивает большой франк-кондо-

И.П.  
Колото и Врасс.

Х. 1985, 19, № 20

новский сдвиг, к-рый требуется для перехода из основного состояния  $Cl_2$  в ионо-парное, и обеспечивает выполнение правила отбора по четности, к-рое для многофотонных переходов отличается от правил отбора для однофотонного перехода. По спектру Фл  $Cl_2$  в переходе  $f(0_g^+) - B^3\Pi(0_u^+)$  произведено отождествление колебат. уровней состояния  $f(0_u^+)$ . Определены молек. константы этого состояния ( $cm^{-1}$ ) (в скобках указаны величины  $3\sigma$ ):  $T_e$  59356,124(41);  $\omega_e$  256,981(30);  $\omega_e x_e$  1,2032(83);  $\omega_e y_e$  0,00369(47);  $B_e$  0,11503(10);  $\alpha_e$   $7,58(17) \cdot 10^{-4}$ ;  $D$   $1,44(68) \cdot 10^{-7}$ .

В. Е. Скурат



$\text{Cl}_2$

1985

Gené F., Brandt B.A.

Кривые  
потемн.  
энергии  
основн.  
состоян.

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

● (см. MgCe; III)

Cl<sub>2</sub>

1985

10 Л420. Кинетика интенсивной люминесценции хлора в сверхзвуковом сопле. Kinetics of the intense chlorine chemiluminescence in a supersonic nozzle. Kerpashitskii L. A., Nosenko V. E., Naumov V. V., Kochelap V. A., Izmailov I. A. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 116, № 2—3, 197—201 (англ.)

С использованием техники сверхзвуковых молекулярных пучков исследована кинетика интенсивной хемилюминесценции, сопровождающей рекомбинацию атомов хлора. Образование атомов хлора происходило в ударной волне перед соплом. Измерения проводились в широкой спектральной области: 1008—400 нм, в которой расположены системы электронных переходов:  $^1\Pi_{1u} \rightarrow ^1\Sigma_g^+$  и  $^3\Pi_{0+u} \rightarrow ^1\Sigma_g^+$  молекулы Cl<sub>2</sub>. В конструкции эксперим. установки была предусмотрена возможность абс. измерения люминесценции в различных точках

Спектр

ф. 1985, 18, N 10

струн: перед входной и отражающей диафрагмами. Отмечена высокая величина энергетич. потока в полосе  $B-X$  ( $\sim 0,1$  Вт/см<sup>2</sup>) при неравновесных конц-ях атомов хлора  $\sim 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Для исследованных систем переходов определены величины моментов. Обсуждены особенности абс. измерений интенсивности хемилюминесценции в сверхзвуковом сопле.

М. Т.

Cl<sub>2</sub>

1985

11 Л445. Кинетика интенсивного рекомбинационного излучения Cl<sub>2</sub> в сверхзвуковых потоках. Кернажицкий Л. А., Носенко В. Е., Наумов В. В., Измайлов И. А., Кочелап В. А. «Хим. физ.», 1985, 4, № 8, 1120—1130

Измерена излучательная и поглощательная способность диссоциированного хлора в падающей и отраженной ударных волнах, позволившие проверить правильность диагностики параметров газа в ударной трубе и определить радиационные характеристики фотопереходов  $^1\Pi_{1u} \rightarrow ^1\Sigma_g^+$  и  $^3\Pi_{0+u} \rightarrow ^1\Sigma_g^+$  молекулы Cl<sub>2</sub>. Измерено пространственное распределение интенсивности ИК-хемилюминесценции в потоке рекомбинирующего хлора (чистого и в смеси с аргоном) при неравновесном газодинамич. охлаждении в сверхзвуковом сопле. Путем численного эксперимента определены характеристики электронно-химич. кинетики Cl<sub>2</sub> в условиях интенсивной рекомбинационной накачки.

Резюме

ср. 1985, 18, N 11



1985

Cl<sub>2</sub>

Kryachko Eugene S.

ref. 12.

Chem. Phys. Lett., 1985,  
116, N5, 411-414.

(see ZnH; III)

Cl<sub>2</sub>

1985

9 Б1153. Спектроскопическое исследование состояния  $E(0_g^+)Cl_2$  методом двойного оптического резонанса. A spectroscopic study of the  $E(0_g^+)$  state of  $Cl_2$  by optical-optical double resonance. Shinzawa Tsutomu, Tokunaga Atsuto, Ishiwata Takashi, Tanaka Ikuzo. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 11, 5407—5412 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом двойного оптич. резонанса (через промежут. состояние  $B^3\Pi(0_u^+)$ ,  $v=8$ ,  $J=30$ ) исследовано ионно-парное возбужденное электронное состояние молекулы  $Cl_2$ , коррелирующее с  $Cl(^1S) + Cl(^3P_2)$ . Возбуждение осуществлялось двумя независимо, перестраиваемыми импульсными лазерами с общей накачкой от эксимерного  $XeCl$  лазера (500—520 нм,  $B \leftarrow X$  и 230—265 нм,  $E \leftarrow B$ ). Регистрировалась УФ-флуоресценция (переход  $E \rightarrow B$ ). Абс. нумерация переходов по  $v_E$  устанавливалась на основании результатов расчета

М.П.

X. 1987, 19, № 9

факторов Франка — Кондона в переходе  $E-B$ . Приве-  
 дены значения  $T_v$  и  $B_v$  для уровней  $v_E=0-23$ . Зна-  
 чения коэф. Данхема (в  $\text{см}^{-1}$ ) для  $^{35}\text{Cl}_2 (E 0_g^+)$ :  $Y_{00} =$   
 $= 57819,37$ ,  $Y_{10} = 251,954$ ,  $Y_{20} = -1,032$ ,  $Y_{30} = 2,24 \cdot 10^{-3}$ ,  
 $Y_{01} = 0,11656$ ,  $Y_{11} = 6,40 \cdot 10^{-4}$ ,  $Y_{02} = 4,8 \cdot 10^{-8}$ ,  $R_I =$   
 $= 2,876$  А. Рассчитана потенциальная кривая РКР для  
 состояния  $E 0_g^+ (v=0-23)$  [приведены значения  
 $G(v)$ ,  $R_{\text{мин}}$ ,  $R_{\text{макс}}$ ].

В. М. Ковба



Cl<sub>2</sub>

(Om. 22351) 1985

103: 169168s Determination of the lowest bound ionic state threshold of molecular chlorine trapped in solid argon at 4.5 K using synchrotron radiation. Salama, F.; Fournier, J. (Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 120(1), 35-40 (Eng). The Cl<sub>2</sub> excitation spectrum of the double-well 2<sup>11</sup><sub>g</sub> state was investigated by using synchrotron radiation and leads to a threshold at 8.266 eV. The processes of relaxation and tunneling between the inner and outer wells were calcd. and a proposed mechanism for the resulting UV emission is discussed.

(2317g)

C.A. 1985, 103, N20

Cl<sub>2</sub>

DM. 21886 1985

2 Л240. Исследование Cl<sub>2</sub> методом характеристических энергетических потерь электронов с использованием многодетекторного электронного спектрометра с пространственной чувствительностью. Electron energy loss studies of Cl<sub>2</sub> using a position-sensitive multidetector electron spectrometer. Stubbs Richard J., York Trevor A., Comer John. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1985, 18, № 15, 3229—3243 (англ.)

Спектр молекулярного хлора в области энергий вплоть до второго ионизационного потенциала  $A^2\Pi_u$  получен с помощью электронного спектрометра с пространственной чувствительностью. Спектр возбуждался в молекулярном пучке Cl<sub>2</sub> электронным ударом с углом пересечения пучков от 10° до 90°, энергией электронов 10—120 эВ. Достигнуто энергетич. разрешение 18 мэВ, что существенно лучше, чем в предшествующих работах. Впервые экспериментально обнаружены переходы с

спектр,  
М.Л.

ср. 1986, 18, № 2

энергиями выше 11,3 эВ. Зарегистрировано около 70 новых переходов. Эти переходы и ряд идентифицированных в предшествующих работах образуют три ридберговские серии и восемь колебательных прогрессий. Пять из восьми прогрессий связаны с дипольными правилами отбора, и три со спиновыми. С точностью 5 МэВ определены параметры  $T_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$  идентифицированных состояний. Оказалось, что константы ангармоничности  $\omega_e x_e$  близки к нулю для всех состояний.

М. А.

Cl<sub>2</sub>

1985

Chas F. T. McDowell

C. A.

Chem. Revs.,

J. Mol. Struct.

7, 2e;

1985, 129(1-2),

169-73.

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

Cl<sub>2</sub>

Um. 22314

1985

Fournier J., Salama F.,  
et al.,

пример  
&

J. Phys. Chem. 1985, 89,  
N 16, 3530 - 3534.

лампине,  
крупные  
номереел.  
Ферриси





Cl<sub>2</sub>

DM. 21519

1985

~~102-175256q~~ First observation of the  $f(0_g^+)$  ion-pair state of molecular chlorine by optical-optical double resonance. Ishiwata, Takashi; Shinzawa, Tautomu; Kusayanagi, Tatsuo; Tanaka, Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(4), 1788-91 (Eng). The 2-photon excitation spectrum of Cl<sub>2</sub> using 2 tunable dye lasers was studied in the 7-eV energy range. The  $f(0_g^+)$  ion-pair state correlating with Cl(<sup>1</sup>S) + Cl(<sup>3</sup>P<sub>0</sub>) at the dissociation limit appeared in the spectrum resulting from an optical-optical double resonance transition though the  $B^3\Pi(0_u^+)$  state. The vibrational numbering of the  $f(0_g^+)$  state was established by direct observation of the  $f(0_g^+) - B^3\Pi(0_u^+)$  fluorescence. The molecular constants for the Cl<sub>2</sub>  $f(0_g^+)$  state are derived (in cm<sup>-1</sup> and 3σ in parenthesis):  $T_e = 59\,356.124(41)$ ,  $\omega_e = 256.981(30)$ ,  $\omega_e x_e = 1.2032(83)$ ,  $\omega_e y_e = 0.0003\,69(47)$ ,  $B_e = 0.115\,03(10)$ ,  $\alpha_e = 7.58(17) \times 10^{-4}$ , and  $D = 1.44(68) \times 10^{-7}$ .

M.N.,  $f(0_g^+)$

C.A. 1985, 102, N20

Cl<sub>2</sub>

1985

6 Д67 ДЕП. Определение потенциальной кривой диссоциирующего состояния двухатомной молекулы методом моментов. Иванов В. С., Лавровская Н. П.; Ред. ж. «Вестн. ЛГУ. Физ., хим.». Л., 1985. 7 с. Библиогр. 10 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 5 марта 1985 г., № 1682—85 Деп.)

Предложен метод определения параметров отталкивательной потенц. кривой молекулы на основе анализа контура электронной полосы поглощения. Рассмотрены вопросы расчета спектральных моментов, распределения плотности вероятности по колебательной координате. Метод применим как для двухатомных, так и для многоатомных молекул. Определены параметры потенц. кривой молекулы Cl<sub>2</sub> в состоянии <sup>1</sup>Π<sub>1u</sub>. Автореферат

потенц. крив

ср. 1985, 18, № 6

Cl<sub>2</sub>

1985

↘ 3 Л176. Определение с помощью синхротронного излучения пороговой энергии низшего связанного ионного состояния молекул Cl<sub>2</sub> в аргоновой матрице при 4,5 К. Determination of the lowest bound ionic state threshold of Cl<sub>2</sub> trapped in solid argon at 4,5 K using synchrotron radiation. Salama F., Fournier J. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 120, № 1, 35—40 (англ.)

↘ Исследован спектр возбуждения Cl<sub>2</sub> в состоянии с двумя минимумами потенц. кривой (2<sup>3</sup>Π<sub>g</sub>). Определена пороговая энергия возбуждения (8,266 эВ). Обсуждены процессы релаксации и туннелирования между внутренним и внешним минимумами потенц. кривой, а также предполагаемый механизм возникновения УФ-излучения (в области 4 эВ).  
М. А.

(М. А.)

ф. 1987, 18, № 3

Cl<sub>2</sub>

(Om. 23919)

1985

104: 42157c A spectroscopic study of the  $E(0_g^+)$  state of chlorine molecule by optical-optical double resonance. Shinzawa, Tsutomu; Tokunaga, Atsuto; Ishiwata, Takashi; Tanaka, Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(11), 5407-12 (Eng). An optical-OODR technique was used to study the  $E(0_g^+)$  ion-pair state of Cl<sub>2</sub> correlating with Cl-(1S) + Cl+(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>). Observations were made on the  $v' = 0$  through  $v' = 23$  levels of the <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> isotope species. A set of Dunham mol. consts. was derived by a global weighted least squares fit of 474 transitions (all in cm<sup>-1</sup> and 3σ in parentheses):  $Y_{00} = 57819.366(38)$ ,  $Y_{10} = 251.954(15)$ ,  $Y_{20} = -1.0318(19)$ ,  $Y_{30} = 2.235(64) \times 10^{-3}$ ,  $Y_{01} = 0.116556(62)$ ,  $Y_{11} = -6.403(56) \times 10^{-4}$ , and  $Y_{02} = -4.8(37) \times 10^{-8}$ . The emission spectra of the  $E(0_g^+)$ -B<sup>3</sup>Π(0<sub>u</sub><sup>+</sup>) system obsd. in the ODR expts. were interpreted on the basis of Franck-Condon factor calcns., which established the abs.  $v'$  numbering of the  $E(0_g^+)$  ion-pair state.

(u.n.)

C.A. 1986, 104, N6

Cl<sub>2</sub>

1985

106: 128383b Three photon spectroscopy of the lowest Rydberg and valence states of the chlorine molecule. Swertz, M.; Haaks, D. (Univ. G. H. Wuppertal, 5600 Wuppertal, 1 Fed. Rep. Ger.). *Methods Laser Spectrosc.*, [Proc. Fritz Haber Int. Symp. *Methods Laser Spectrosc.*] 1985 (Pub. 1986), 463-8 (Eng). Edited by Prior, Yehiam; Ben-Reuven, Abraham; Rosenbluh, Michael. Plenum: New York, N. Y. Fluorescence studies are reported on the 1st Rydberg series of Cl<sub>2</sub> at 70,000-80,000 cm<sup>-1</sup> using 3-photon laser excitation. A strong increase of the fluorescence intensity with pressure of added He or Ne indicates that the population of the emitting valence states is caused by collisionally induced interstate transfer processes from the primary excited Rydberg states. A variety of potential curve crossings are responsible for these processes.

Рядовые  
состояние

C. A. 1987, 106, N 16.

Cl<sub>2</sub>

[OM. 21274]

1985

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

геометрия,  
символы  
постоянные,  
расчет.

Theor. Chim. acta;  
1985, 67, N3, 175-185.

Cl<sub>2</sub>

1985

Wadt W. R., May P. J.

котену.  
креево

J. Chem. Phys., 1985,  
82, N1, 284-298.

(see NaF; III)

Cl<sub>2</sub>

1986

5-6 Б1242. Комбинированное полиномиальное и  
вблизи-диссоционное представления спектральных дан-  
ных по двухатомным молекулам: Cl<sub>2</sub>(X) и J<sub>2</sub>(X). Com-  
bined polynomial and near-dissociation representations  
for diatomic spectral data: Cl<sub>2</sub>(X) and J<sub>2</sub>(X). A shmo-  
re J. Gail, Tellinghuisen Joel. «J. Mol. Spectrosc.»,  
1986, 119, № 1, 68—82 (англ.) Место хранения ГПНТБ  
СССР

Продолжена разработка предложенного ранее авто-  
рами метода описания системы колебательно-вращат.  
уровней двухатомных молекул, объединяющего как тра-  
диционное полиномиальное описание, так и метод  
вблизи-диссоционного разложения (Ле Рой и др.), одна-  
ко с меньшим числом варьируемых параметров («Chem.  
Phys. Lett.», 1983, 102, 10). Теорет. модель применена  
для описания уровней молекул Cl<sub>2</sub> и J<sub>2</sub> в основном  
электронном состоянии. Результаты сопоставлены с  
эксперим. прецизионными данными. В. М. Ковба

(М.П.)

(4)

X. 1987, 19, № 6



Cl<sub>2</sub>

[Om. 25677]

1986

Ashmore I. I., Tellinghuisen I.,

д. н. в.  
основн.  
состоян.

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

Cl<sub>2</sub>

1986

105: 123386z. Combined polynomial and near-dissociation representations for diatomic spectral data: diatomic chlorine (X) and diatomic iodine (X). Ashmore, J. Gail; Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(1), 68-82 (Eng). Fluorescence data which sample virtually the entire ground state potential wells for Cl<sub>2</sub> and I<sub>2</sub> were least-squares analyzed in terms of mixed representations-polynomials in  $v + 1/2$  at low  $v$  and near-dissocn. expansions at high  $v$ . Smooth functional expressions for the vibrational energy and rotational const. were obtained by means of exact constraints introduced into the fits by Lagrange's method of undetd. multipliers. The resulting least-squares equations are less ill-conditioned than those often encountered in fitting to high-order polynomials, and the smoothness constraints are satisfied with negligible statistical penalty. The results of the fits were examd. for their extrapolating ability and their sensitivity to changes in the orders of the component functions and in the low- $v$  to high- $v$  switchover point.

(M.A.)

(H)  $\otimes$  I<sub>2</sub>

C.A. 1986, 105, N14

Cl<sub>2</sub>

1986

Becke A. D.,

Phys. Rev. A: Gen. Phys.  
1986; 33 (4), 2786-8.

теор.  
расчет  
Ze, We, De  
осн.  
свойств.

(см. M<sub>2</sub>; III)

Cl<sub>2</sub>

[ Am. 25424 ]

1986

Calvé J. Chergui M;

спектр  
(в Ar лампе)  
потенц.  
кривые

Chem. Phys. Lett.,  
1986, 132, N 3, 256-260

○

Cl<sub>2</sub>

1987

Evard Dwight D.,  
Thommen Fritz,  
et al.

(B<sup>3</sup>Π<sub>u</sub><sup>+</sup> - X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>)

J. Phys. Chem. 1987,

91 (10), 2508-12.

(see NeCl<sub>2</sub>; III)

Cl<sub>2</sub>

1986

Edward Dwight D.,  
Thommen Fritz, et al.

лазер-  
возбужд.  
флуорес.

J. Chem. Phys. 1986,  
84(7), 3630-3.

(сир. NeCl<sub>2</sub>; III)

Cl<sub>2</sub>

1986

Иванов В. С., Лавров-  
ская М. П. и др.

м.п. - Оптика и спектроско-  
пия, 1986, 60, N 4, 716-  
-721.

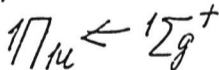
(ссылка на III)

Cl<sub>2</sub>

1986

105: 50985g Method of moments. Determination of potential curve of a diatomic molecule dissociation state. Ivanov, V. S.; Lavrovskaya, N. P. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1986, 60(4), 716-21 (Russ). A method is offered to det. the potential curve of repulsive states based on the use of spectral band moments and permitting direct extension to the case of multiat. mols. as an illustration and anal. was made of the  ${}^1\Pi_{1u} \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$  band contour of Cl<sub>2</sub>.

(romanus.  
spektrel)



C.A. 1986, 105, N 6



Cl<sub>2</sub>

1986

18 Б1017. Метод моментов. Определение потенциальной кривой диссоциирующего состояния двухатомной молекулы. Иванов В. С., Лавровская Н. П. «Оптика и спектроскопия», 1986, 60, № 4, 716—721

Предложен способ определения потенциальной кривой отталкиват. состояния, основанный на использовании спектральных моментов полос и допускающий прямое распространение на случай многоатомных молекул. В кач-ве иллюстрации проанализирован контур полосы  ${}^1\Pi_{1u} \leftarrow {}^1\Sigma_g^+$  молекулы Cl<sub>2</sub>. Резюме

(М.П.)

Х. 1986; 19, N 18

Cl<sub>2</sub>

1986

107: 48364b Excited states of halogen molecules by optical-optical double resonance technique. Ishiwata, Takashi (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Bunko Kenkyu* 1986, 35(5), 415-18 (Japan). A review with 11 refs. is given on the electronic structure of ion pair state of Cl<sub>2</sub>.  
A. Inaba

(copy)

C.A. 1987, 107, N 6

Cl<sub>2</sub>

[Om. 25951]

1986

Kenner R.D., Haak H.K.,  
Stuhl F.,

кривые  
потенци-  
альной

J. Chem. Phys., 1986,  
85, N 4, 1915-1923.

1986

Cl<sub>2</sub>

№1 Л222. Количественная ВУФ спектроскопия Cl<sub>2</sub>.  
 Quantitative VUV spectroscopy of Cl<sub>2</sub>. Lee L. C., Suto  
 Masako, Tang K. Y. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 10,  
 5277—5283 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Сечения фотопоглощения и возбуждения флуоресценции Cl<sub>2</sub> измерены в области 105—145 нм с использованием синхротронного излучения. По результатам измерений рассчитаны силы осцилляторов для основных полос поглощения. Силы осцилляторов для переходов 2<sup>3</sup>Π<sub>u</sub> и 2<sup>1</sup>Π<sub>u</sub> — X<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> хорошо согласуются с теоретич. значениями. Классифицированы ридберговские серии, сходящиеся к первому и второму потенциалам ионизации. В спектре возбуждения флуоресценции зарегистрирована колебательная структура состояния 2<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> вплоть до v' = 15. Обнаружено, что в полосе с максимумом при 108,3 нм возбуждается лишь ВУФ флуоресценция, а УФ флуоресценция при этом появляется за счет вторичных процессов. Библ. 19. В. С. Иванов

(М.П.)

фр. 1987, 18, №1

Cl<sub>2</sub>

1986

10 Б4390. Альтернативная интерпретация спектроскопии и внутренней динамики возбужденных молекул Cl<sub>2</sub> в аргоновой матрице. An alternative interpretation of the spectroscopy and internal dynamics of excited Cl<sub>2</sub> molecules trapped in an argon matrix. Le Calvé J., Chergui M. «Chem. Phys. Lett.», 1986; 132, № 3, 256—260 (англ.)

Дается новая интерпретация результатов работ J. Fournier, F. Salama, J. Deson, R. J. Le Roy («Photo-physics and photochemistry above GeV», ed. F. Lahmani, Elsevier, Amsterdam, 1985, 439; «J. Phys. Chem.», 1985, 89, 3530; «Chem. Phys. Lett.», 1985, 120, 35) по Фл Cl<sub>2</sub> в аргоновой матрице при 4,5 К. Возбуждение импульсной лампой (8,4—10 эВ) приводит к испусканию фотонов с энергией 4 эВ (310 нм), к-рое относили к переходам Cl<sub>2</sub> ( $a^3\Pi_g - 1^2\Sigma_u^+$ ). По мнению авторов, это испускание обусловлено переходами  $D'_3\Pi(2g) - A'^3\Pi(2u)$  (258 нм в газовой фазе), причем красн. сдвиг объяс-

спектр  
в  
матрице

Х. 1987, 19, N 10

няется взаимодействием с окружением молекулы  $\text{Cl}_2$  и зависит от поляризуемости матрицы. Исключается возможность образования ридберговского  $^3\Pi_g$ -состояния  $\text{Cl}_2$  в акте возбуждения при 8—10 эВ. На основании независимых экспериментов в газовой фазе и неоновой матрице предложен механизм образования излучающего состояния: при Фт сначала возникает  $\text{Cl}_2$  ( $1^1\Sigma_u^+$ ), а затем происходит столкновит. передача возбуждения в  $D'^3\Pi(2g)$ -состояние. Л. Ю. Мельников



Cl<sub>2</sub>

Om - 24691

1986

[105: 14556] Quantitative VUV spectroscopy of molecular chlorine. Lee, L. C.; Suto, Masako; Tang, K. Y. (Dep. Electr. Comput. Eng., San Diego State Univ., San Diego, CA 92182 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(10), 5277-83 (Eng). The photoabsorption and fluorescence cross sections of Cl<sub>2</sub> were measured at 105-145 nm by using synchrotron radiation as a light source. The oscillator strengths for the major absorption bands were calcd. from the measured absorption cross sections. The measured oscillator strengths for the  $2^3\Pi_u$  and  $2^1\Pi_u \leftarrow X^1\Sigma_g^+$  transitions agree with the theor. values. The absorption spectrum was analyzed in accord with the excited electronic states calcd. by S.D. Peyerimhoff and R.J. Buenker (1981). The Rydberg series converging to the 1st and 2nd ionization potentials were classified. The vibrational levels of the  $2^1\Sigma_u^+$  ionic state were detd. for  $v' \leq 15$  from the fluorescence excitation spectrum. A band with peak at 108.3 nm produces vacuum-UV fluorescence, but it produces UV fluorescence only by a collisional excitation process.

(fmm)

C. A. 1986, 105, N 2

Cl<sub>2</sub>

1986

Ma Zhongsun, Dai  
Shuoshan.

М. П.

Химический журнал,  
Chemistry, 1986, N 11,  
35-36.

(См. HF; III)



Cl<sub>2</sub>

1986

2 Б1158. Колебательные изотопические сдвиги в системе  $B-X$  Cl<sub>2</sub>. Vibrational isotope shifts in the  $B-X$  system of Cl<sub>2</sub>. Martinez E. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1986, 35, № 5, 401—405 (англ.)

Измерены спектры лазерного возбуждения молекул <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> и <sup>35</sup>Cl<sup>37</sup>Cl в обл. полос 5—1, 8—2, 12—0, 13—0, 24—0, 25—0, 26—0 перехода  $B^3\Pi(O_u^+) - X^1\Sigma_g^+$  (545—580 нм). Для возбуждения использовали узкополосный (0,03 см<sup>-1</sup>) импульсный лазер на красителе с накачкой от 2- или 3-й гармоники Nd-лазера. Выполнен полный анализ вращат. структуры полос (данные не приведены). Вычисленные колебат. изотопич. сдвиги хорошо согласуются с наблюдаемыми для уровней  $v_B' < 12$  и быстро расходятся для более высоколежащих уровней состояния  $B$ , что, по-видимому, вызвано преддиссоциацией Cl<sub>2</sub>( $B, v' \geq 12$ ) в результате гетерог. взаимодействий между состояниями  $B^3\Pi(O_u^+)$  и  $^1\Pi_u$ . В. М. Ковба

(М.П.)

Х. 1987, 19, № 2

1986

Cl<sub>2</sub>

71 Л468. Колебательные изотопные сдвиги в системе В—Х молекул Cl<sub>2</sub>. Vibrational isotope shifts in the В—Х system of Cl<sub>2</sub>. Martinez E. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1986, 35, № 5, 401—405 (англ.)

С помощью узкополосного ( $\Delta\nu \sim 0,03 \text{ см}^{-1}$ ) лазера на красителе исследованы спектры возбуждения люминесценции Cl<sub>2</sub>[B<sup>3</sup>Π(O<sub>u</sub><sup>+</sup>), v' = 5; 8; 12; 13; 24; 25; 26 → X'<sup>3</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>] при давл. 10<sup>-3</sup>—3,0 мм рт. ст. На основе анализа вращательной структуры спектров выделены системы полос, принадлежащие изотопам <sup>35</sup>Cl<sup>35</sup>Cl и <sup>35</sup>Cl<sup>37</sup>Cl и измерены изотопные сдвиги полос 5—1, 8—2, 12—0, 13—0 и 24—0. Сопоставление полученных эксперим. величин с результатами расчетов, проведенных на основании известных литер. данных, показало хорошее согласие для колебательных уровней v' < 12 и некоторое расхождение для вышележащих уровней. Обсуждены причины последнего, связанные со взаи-

(И.Л.)

фр. 1987, 18, N 1

модействием состояний  $B^3\Pi(O_u^+)$  и  $^1\Pi(1_u)$  и предиссоциацией молекул. Отмечено, что зависимость найденных значений изотопных сдвигов от  $\nu'$  имеет сигмоидный вид, характерный для  $^3\Pi$  — состояний галогенов и интергалогенов. Библ. 22. С. В. Литке



Cl<sub>2</sub>

Om 24455 1986

105: 51348p Vibrational isotope shifts in the B-X system of molecular chlorine. Martinez, E. (Dep. Quim.-Fis., Fac. Cienc., Bilbao, Spain). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1986, 35(5), 401-5 (Eng). Excitation of resolved rovibrational ( $v' = 5, 8, 12, 13, 24, 25$  and  $26$ ) states of Cl<sub>2</sub> B<sup>3</sup> II (O<sup>+</sup><sub>u</sub>) was carried out using a narrow-band ND-YAG pumped dye laser. Excitation spectra for several bands of the B-X system of Cl<sub>2</sub>, showing rotationally resolved lines, were obtained by scanning the frequency of the dye laser. Complete rotational analyses were carried out for the 2 isotopic species <sup>35</sup>Cl and <sup>35</sup>Cl<sup>37</sup>Cl. Vibrational isotope shifts were calcd. and discrepancies with obsd. values, for transitions involving levels above the onset of predissocn., are discussed.

B<sup>3</sup>II (O<sup>+</sup><sub>u</sub>)

спектр возбужд.

транз. атомы

C.A. 1986, 105, N 6

1986

Cl<sub>2</sub>

105: 199603p Time and spectrally resolved fluorescence of chlorine molecule (Cl<sub>2</sub><sup>\*</sup>) and argon monochloride (ArCl<sup>\*</sup>) in chlorine doped argon under state selective pulsed photoexcitation with synchrotron radiation. Moeller, T.; Jordan, B.; Zimmerer, G.; Haaks, D.; Le Calve, J.; Castex, M. C. (II. Inst. Experimentalphys., Univ. Hamburg, D-2000 Hamburg, 50 Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1986, 4(1), 73-87 (Eng). Synchrotron radiation was used to selectively excite Cl<sub>2</sub> and Cl<sub>2</sub>-doped Ar in the vacuum-UV region. Stationary fluorescence and excitation spectra of the 1<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>, 2<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>, and 2<sup>3</sup>Π<sub>g</sub> Cl<sub>2</sub><sup>\*</sup> states and of the ArCl<sup>\*</sup>(B-X) transition were obtained. The excitation threshold of ArCl<sup>\*</sup>(B) in Ar/Cl<sub>2</sub> is at 1285 ± 5 Å and that of ArCl<sup>\*</sup>(C) at ~1260 Å. The formation of ArCl<sup>\*</sup> and Cl<sub>2</sub><sup>\*</sup>(2<sup>3</sup>Π<sub>g</sub>) is discussed in terms of recent potential-curve data. A detailed time-resolved study is reported which allows precise detn. of the radiative lifetime of ArCl<sup>\*</sup>(B) state (5.2 ns) and of numerous kinetic parameters of this system, estn. of the C state energy, and discussion of the relaxation and mixing process of the ArCl<sup>\*</sup>(B) and (C) states. A 2-ladder multilevel kinetic model is described which accounts for the exptl. results and shows the difficulty of studying this particular ArCl<sup>\*</sup> system as compared to the closely related XeCl<sup>\*</sup> and KrCl<sup>\*</sup> ones.

Fr. C. A. 1986

(H)

C. A. 1986, 105, N 22

ArCl

Cl<sub>2</sub>

1986

22 Б4027. Константа скорости реакции Na с Cl<sub>2</sub> при комнатной температуре. Room temperature rate constant for the reaction of Na with Cl<sub>2</sub>. Silver Joel A. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 8, 4718—4720 (англ.)

В условиях потока с использованием ЛИФ детектирования продуктов определена константа скорости р-ции  $\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{NaCl} + \text{Cl}$  при давл. 1,96 Торр и области времен контакта реагентов 2—11 мс. Константа скорости р-ции при 294 К равна  $(6,7 \pm 0,9) \cdot 10^{-10}$  см<sup>3</sup>/(молекула·с). Расчет этой константы в рамках модели, описанной ранее (Gislason E. R., in «Alkali—Halide Vapors: Structure, Spectra and Reaction Dynamic», N. Y. 1979), дает величину  $7,5 \cdot 10^{-10}$  см<sup>3</sup>/(молекула·с) в предположении, что величина сродства к электрону молекулы Cl<sub>2</sub> составляет 1,63 эВ.

Л. Ю. Русин

Ac;

х. 1986, 19, N 22

Cl<sub>2</sub>

1986

7 19 Б1195. Сечения фотоионизации атомов и молекул хлора при 584 А. Photoionisation cross sections of chlorine atoms and molecules at 548 Å. Van der Meer W. J., Butselaar R. J., de Lange C. A. «Austral. J. Phys.», 1986, 39, № 5, 779—788 (англ.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии с использованием модуляции микроволнового разряда в газе из HCl или Cl<sub>2</sub> исследованы сечения фотоионизации  $\sigma$  атомов Cl и молекул Cl<sub>2</sub> излучением с длиной волны 584 А (резонансная линия He-I $\alpha$ ). Сечения получены относительно перехода HCl(X<sup>1</sup> $\Sigma^+$ )—HCl<sup>+</sup>(X<sup>1</sup>P<sub>1/2,3/2</sub>) и приведены в абс. шкале с помощью абс. значения  $\sigma$  для последнего процесса, найденного с помощью (e 2e)-спектроскопии. Получены парциальные сечения  $\sigma$  для конечных ионных состояний Cl<sup>+</sup> <sup>3</sup>P<sub>2,1,0</sub>, <sup>1</sup>D<sub>2</sub>, <sup>1</sup>S<sub>0</sub> и Cl<sub>2</sub><sup>+</sup> X<sup>2</sup>P<sub>g,1/2,3/2</sub>, A<sup>2</sup>P<sub>u,1/2,3/2</sub>, B<sup>2</sup> $\Sigma_g^+$ . Для низших ионных состояний  $\sigma$  равны 19,7±2,5 и 36,7±5,5 Мбарн для Cl и Cl<sub>2</sub>, соотв.

О. А. Басченко

М.П.

X. 1987, 19, N 19

Cl<sub>2</sub>

(M. 26093)

1987

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

empirk-  
nyra,  
neop.  
pochem

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



01.29.193

1987

Cl<sub>2</sub>

† 18 Б1259. Многофотонные спектры и состояния галогенов. Multiphoton spectra and states of halogens.

Brand J. C. D., Hoy A. R. «Appl. Spectrosc. Rev.», 1987, 23, № 3—4, 285—328 (англ.)

Обзор работ в обл. эксперим. и теорет. исследований электронной структуры и спектров молекул галогенов выполненных за последние 10—12 лет. Рассмотрена систематика электронных состояний, инструментальные методы их исследования (помимо классич. методов, метод многофотонного возбуждения, метод маркировки поляризацией). Особое внимание уделено ионно-парным состояниям молекул. Обсуждены также результаты исследований многофотонных переходов с участием валентных состояний, исследований ридберговских состояний и взаимодействие их с ионно-парными состояниями. В приложении дана сводка данных (значения  $T_e$ ,  $D_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $R_e$ ) по ионно-парным состояниям молекул Cl<sub>2</sub>, Br<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>, BrF, IBr, ICl, IF. Библи. 118. В. М. Ковба

М.А.

16

X. 1988, 19, N 18

Cl<sub>2</sub>

1987

Bernusai A.A., Bealbet-  
zo G.M.

J. Raman Spectrosc.

vol. 11.

1987, 18, no. 2. p. 93-95.

● (see Bz<sub>2</sub>i III)

Cl<sub>2</sub>

1987

Г 11 Д110. Нахождение методом спектроскопии электронных импульсов распределений орбитальных импульсов и энергий связи для заполненной валентной оболочки молекулярного хлора. Orbital momentum distributions and binding energies for the complete valence shell of molecular chlorine by electron momentum spectroscopy. Frost L., Grisogono A. M., McCarthy I. E., Weigold E., Brion C. E., Bawagan A. O., Mukherjee P. K., Von Niessen W., Rosi M., Sgamellotti A. «Chem. Phys.», 1987, 113, № 1, 1—18 (англ.)

Методом спектроскопии электронных импульсов и методом ф-ции Грина в варианте алгебраической диаграммной конструкции (АДК) выполнено исследование электронных и энергетич. характеристик молекулярного хлора. Найдены распределения орбитальных импульсов и энергий связи для молекулярных орбиталей, образующих валентную оболочку, построены карты плотности орбитальных моментов. Расчеты в рамках АДК проведены с точностью до четвертого порядка теории возмущений. Обсуждено влияние на результаты расчетов включения в базисный набор поляризационных ф-ций. Библ. 43.

М.А.

ф. 1987, 18, N 11

А. И. К.

1987

Cl<sub>2</sub>

7 Д51. Расчет средних значений степеней межъядерной координаты двухатомной молекулы с использованием гипервириальной теоремы. Иванов В. С., Савков В. Б. «Оптика и спектроскопия», 1987, 62, № 3, 510—513

Описан рекуррентный метод расчета матричных элементов  $\langle v, J | x^k | v, J \rangle$ ,  $k=1, 2, 3, \dots$  оператора линейной координаты  $x = (r - r_e) / r_e$  и собств. значений энергии  $E_{v,J}$  колебательно-вращательных уровней двухатомных молекул, основанный на использовании гипервириальной теоремы. В отличие от аналогичных методов вращательный член в гамильтониане целиком отнесен к возмущению. Проведены расчеты с модельным потенциалом основного электронного состояния молекулы Cl<sub>2</sub>. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что во многих практически важных случаях метод приводит к удовлетворительной точности вычисляемых величин.

Резюме

(М.П.)

ор. 1987, 18, № 7

Cl<sub>2</sub>

[om. 27890]

1987

Карачевцев Г. В.,

(Ac)

И. физ. науки, 1987,  
61, N 8, 2070-2074.

Cl<sub>2</sub>

OM 27951

1987

108: 28933d A photoelectron spectroscopic study of low-lying Rydberg states in molecular chlorine using multiphoton ionization. Koenders, B. G.; Wieringa, D. M.; Drabe, K. E.; De Lange, C. A. (Dep. Phys. Chem., Free Univ. Amsterdam, 1081 HV Amsterdam, Neth.). *Chem. Phys.* 1987, 118(1), 113-21 (Eng). Resonance enhanced multiphoton ionization (REMPI) with kinetic energy resolved electron detection is reported for Cl<sub>2</sub>. Mol. Rydberg states were studied between 73,000 and 79,000 cm<sup>-1</sup> and are accessed by 3-photon absorption. Singlet and triplet 2Π<sub>u</sub> states give rise to qual. very simple Franck-Condon progressions in the photoelectron spectra, indicating predominant Rydberg character. In contrast, the photoelectron spectrum of the 2<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> state shows strong perturbations. Direct evidence for the mixed Rydberg-valence character of this state is apparent from the irregular Franck-Condon progression and from the fact that ionization occurs to both the 2Π<sub>g</sub> and 2Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> ionic states of Cl<sub>2</sub>.

Рудер.  
Сосноет.

C.A. 1988, 108, NY

Cl<sub>2</sub>

DM. 26956 1987

106: 110454r Photodissociation, third harmonic interference, polarization effects, and the MPI spectroscopy of chlorine. L. Leping; Wu, Ming; Johnson, Philip M. (Dep. Chem., State Univ. New York, Stony Brook, NY 11794 USA). *J. Chem. Phys.* 1987, 86(3), 1131-5 (Eng). The multiphoton ionization spectrum of Cl<sub>2</sub> were studied in the region of  $2\ ^1\Pi_u \leftarrow X\ ^1\Sigma_g^+$  (1,0-0) 3-photon resonances. Spectra at various pressures were obtained with different polarizations, and counterpropagating beam expts. were carried out to restore the peaks quenched by 3rd harmonic interference effects. Cl atoms, caused by photodissocn., produce prominent lines in the spectrum and are responsible for 3rd harmonic generation (THG) which in turn excites some spin-forbidden transitions by 1-photon absorption. The change is discussed of polarization behavior in the presence of THG and the resultant effect on the symmetry assignments of the excited states. Third harmonic destructive interference effects in mol. systems are discussed, and total suppression of 3-photon transition to 1-photon allowed states, common in atoms, will not usually occur in mols. although in general changes in polarization behavior should be obsd. at higher pressures. This conclusion is demonstrated in the Cl<sub>2</sub> spectrum.

$2\ ^1\Pi_u \leftarrow X\ ^1\Sigma_g^+$   
многочотон.  
спектр ионизац.

©. A. 1987, 106, N 14

1987

Cl<sub>2</sub>

16 Б1174. Динамика и спектральные проявления двухфотонного поглощения при переходе из связанного в связанное состояние через отвечающее отталкиванию промежуточное состояние. Dynamics and spectroscopic manifestations of two-photon bound-bound absorption through a repulsive intermediate state. Li L., Lippert R. J., Park H., Chupka W. A., Colson S. D. «J. Chem. Phys.», 1987, 87, № 11, 6767—6769 (англ.)

Изучены спектры 2-х фотонного поглощения (обл. ~278—290 нм) газ. Cl<sub>2</sub>. Исследования проводили в свободной струе смеси 1% Cl<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> с использованием времяпролетного масс-спектрометра и перестраиваемого импульсного лазера на красителе. В спектрах наблюдали электронно-колебат. полосы в обл. переходов  $^1\Pi_g \leftarrow \leftarrow X^1\Sigma_g^+$  и  $^3\Pi_g \leftarrow \leftarrow X^1\Sigma_g^+$  ( $v' = 0-15$  для синглетных состояний и  $v' \approx 75-100$  для триплетных. Анализ спектров с учетом зависимости от времени и франк-кондоновского перекрытия показал, что переход из

М.П.

X. 1988, 19, N 16



связанного в связанное состояние происходит через отвечающее отталкиванию промежут. состояние (время жизни состояния  $< 1$  пс). Подчеркивается перспективность использования таких переходов для исследования высоковозбужденных состояний и динамики диссоциирующих молекул.

А. В. Бобров

Cl<sub>2</sub>

1987

⊕18 Б1023. Неэмпирический расчет потенциалов ионизации и постоянных сверхтонкого расщепления для анион-радикалов FCl<sup>-</sup> и Cl<sub>2</sub><sup>-</sup>. Ab initio calculation of the ionization potentials and hyperfine splitting constants of the radical anions FCl<sup>-</sup> and Cl<sub>2</sub><sup>-</sup>. Nguyen Minh Tho, Ha Tae-Kyu. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 136, № 5, 413—417. (англ.)

Методами теории возмущений Меллера—Плессета и конфигурац. взаимодействия в базисах типа 6-31 ГФ, дополненных поляризац. и диффузными ф-циями, рассчитаны энергии молекул Cl<sub>2</sub> и FCl, их анионов, а также сродство к электрону молекул. С полученными волновыми ф-циями вычислены дипольные и квадрупольные моменты, градиент эл. поля, спиновые плотности и постоянные сверхтонкого расщепления (для анион-радикалов FCl<sup>-</sup> и Cl<sub>2</sub><sup>-</sup>). Найдено, что сродство к электрону согласуется для Cl<sub>2</sub> с эксперим. данными в пределах

М.П.

43

X. 1987, 19, N 18

Cl<sub>2</sub>

DM. 26304 1987

3) 16 B1204. Идентификация и анализ перехода  $D' \rightarrow A'$  в спектре испускания Cl<sub>2</sub>. Identification and analysis of the  $D' \rightarrow A'$  transition in the emission spectrum of Cl<sub>2</sub>. Tellinghuisen Joel, Chakraborty Dilip K. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 134, № 6, 565—570 (англ.)

Проведен повторный анализ спектра испускания Cl<sub>2</sub> в Ar возбуждаемого в разрядном источнике Тесла. Использовались изотопически чистые образцы <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> и <sup>37</sup>Cl<sub>2</sub>. Подтверждено отнесение системы полос в области 258 нм к переходу  $D'2_g(^3P_2) \rightarrow A'2_u(^3\Pi)$ . Значения  $\Delta T_e$ ,  $\omega_e'$ ,  $\omega_e''$ ,  $\omega_e'x_e'$ ,  $\omega_e''x_e''$  (в см<sup>-1</sup>),  $R_e'$ ,  $R_e''$  (в Å): 40125,4; 253,17; 257,27; 1,14; 4,86; 2,87; 2,43. Коэф-ты ангармоничности более высоких порядков:  $D' - \nu_3 = 0,009$ ,  $\nu_4 = -0,00011$ ;  $A' - \nu_3 = -0,032$  см<sup>-1</sup>. В том же диапазоне наблюдалась еще одна, более слабая система полос предварительно отнесенная к переходу  $\beta 1_g(^3P_2) \rightarrow A 1_u(^3\Pi)$ . Значения  $\Delta T_e$ ,  $\omega_e'$ ,  $\omega_e''$ ,  $\omega_e'x_e'$ ,  $\omega_e''x_e''$  (в см<sup>-1</sup>): 40127,3; 252,5; 256; 1,0; 5,1;  $\nu_3(A) = -0,044$  см<sup>-1</sup>,  $R_e' = 2,88$ ,  $R_e'' = 2,43$  Å. В. М. Ковба

М.П.

X. 1987, 19, N16

Cl<sub>2</sub>

1987

DM. 26304

106: 223409y Identification and analysis of the D' → A' transition in the emission spectrum of molecular chlorine. Tellinghuisen, Joel; Chakraborty, Dilip K. (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 134(6), 565-70 (Eng). The emission spectrum of Cl<sub>2</sub> in Ar is reexamined using Telsa discharge sources containing isotopically pure <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> and <sup>37</sup>Cl<sub>2</sub>. Earlier speculation that the dominant emission near 2580 Å is due to the D' 2<sub>g</sub>(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>) → A' 2<sub>u</sub>(<sup>3</sup>Π) transition is confirmed, with the following constants (cm<sup>-1</sup>) obtained for these states: ΔT<sub>c</sub> = 40125.4, ω'<sub>e</sub> = 253.17, ω''<sub>E</sub> = 257.27. A weaker band system in the same spectral region is tentatively assigned to β 1<sub>g</sub>(<sup>3</sup>P<sub>2</sub>) → A 1<sub>u</sub>(<sup>3</sup>Π).

(D' → A')

M.A.

C.A. 1987, 106, N26

Cl<sub>2</sub>

1987

Tellinghuisen F. B.

спектр  
испуск.  
помощем,  
флуоресц.;  
ростом  
судам по  
составу.  
пост. центробеж.  
растворе.

Gov. Rep. Announce.

Index. (U.S.) 1987,

87 (16), Abstr. No 734,

694.

(см. T<sub>2</sub>; III)

Cl<sub>2</sub>

OM. 30579

1988

109: 138090c Hyperfine predissociation of the B state of molecular chlorine. Billy, N.; Girard, B.; Gouedard, G.; Vigue, J. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, ENS, 75231 Paris, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(2), 1196-8 (Eng). Hyperfine predissocn. is reported for the 1st time for the B-state of Cl<sub>2</sub>. A dye laser was used to excite the B-X fluorescence in a supersonic beam. Various level lifetimes are discussed.

гипердиссоциация

визуал

B-состояние.



©.A. 1988, 109, N 16.

1988

3 Б1218. Сверхтонкая преддиссоциация  $\text{Cl}_2$  в состоянии  $B$ . Hyperfine predissociation of the  $B$  state of  $\text{Cl}_2$  / Billy N., Girard B., Couédard G., Vigué J. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 2.— С. 1196—1198.— Англ.

Исследована сверхтонкая преддиссоциация молекул  $^{35}\text{Cl}_2$  в состоянии  $B$ . При лазерном возбуждении  $B-X$  перехода в нетурбулентном сверхзвуковом пучке чистого хлора измерены времена жизни ( $\tau$ ) уровней с  $l=0$  для различных колебат. мультиплетов с  $v=12, 13$  и  $24$  электронного состояния  $B$ . Проанализированы кривые затухания Фл. Объяснены наблюдаемые различия во временах жизни Фл с различных колебат. состояний ( $\tau_{v=12}=1200$ ,  $\tau_{v=13}=50$  и  $\tau_{v=24}\cong 150$  мкс). Удлинение  $\tau$  для чисто излучат. перехода с  $v=12$  связано с воздействием сверхтонкой преддиссоциации на времена жизни уровней с  $l=0$ . Проведено сопоставление полученных результатов с известными данными по молекулам  $\text{Br}_2$  и  $\text{I}_2$ .

Н. Н. Морозов

Х. 1989, № 3

М. П.

 $\text{Cl}_2$

Cl<sub>2</sub>

Om 31162

1988

6 Л427. Изотопические сдвиги в системе Cl<sub>2</sub>(B-X).  
Isotope shifts in the Cl<sub>2</sub>B-X system / Gouédard G.,  
Billy N., Girard B., Vigué J. // Can. J. Phys.— 1988.—  
66, № 8.— С. 721—724.— Англ.

С помощью одномодового кольцевого лазера на красителе исследован спектр возбуждения флуоресценции Cl<sub>2</sub>(X, v' = 0 → B, v' ≥ 18) в природной смеси различных изотопов <sup>35-35</sup>Cl<sub>2</sub>, <sup>35-37</sup>Cl<sub>2</sub> и <sup>37-37</sup>Cl<sub>2</sub>. С высокой точностью определены изотопич. сдвиги полос. Показано, что значения изотопич. сдвигов хорошо описываются в рамках локальной интерполяционной процедуры, использующей концепцию редуцированных по массе квантовых чисел. В. С. Иванов

М.А.



ср. 1989, № 6



Cl<sub>2</sub>

OM. 3762

1988

B-X

isomomer  
Cl<sub>2</sub>

110: 47750z. Isotope shifts in the molecular chlorine B-X system. Gouedard, G.; Billy, N.; Girard, B.; Vigue, J. (Lab. Spectrosc. Hertz., Ecole Norm. Super., 75231 Paris, Fr.). *Can. J. Phys.* 1988, 66(8), 721-3 (Eng). The fluorescence excitation was studied of natural Cl<sub>2</sub> induced by a monomode ring dye laser around various X( $v'' = 0$ )  $\rightarrow$  B( $v' \geq 18$ ) bandheads. Contrary to the main <sup>35</sup>-<sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> isotope, the less abundant species <sup>36</sup>-<sup>37</sup>Cl<sub>2</sub> and <sup>37</sup>-<sup>37</sup>Cl<sub>2</sub> were not previously thoroughly investigated in this region. The expt. allowed a precise detn. of a no. of isotope shifts, which are calculable by a local interpolation procedure of J.A. Coxon's (1980) data, using the concept of mass-reduced quantum nos.

C.A. 1989, 110, N6

Cl<sub>2</sub>

AM 29 626

1988

18 Б1273. Спектроскопия и фотофизика ридберговских, ионно-парных состояний  $^1\Pi_g$  и  $^3\Pi_g$  Cl<sub>2</sub>, исследованные методом многофотонной ионизации. Spectroscopy and photophysics of  $^1\Pi_g$  and  $^3\Pi_g$  Rydberg, ion-pair states of Cl<sub>2</sub>, revealed by multiphoton ionization. Li L., Lipert R. J., Park H., Chupka W. A., Colson S. D. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 8, 4608—4613 (англ.)

Методом резонансной многофотонной (2+1) ионизации молекул Cl<sub>2</sub>, охлажденных в сверхзвуковой струе с масс-спектрометрич. регистрацией образующихся ионов, исследованы смешанные ридберговско (4sσ)-ионно-парные состояния  $^1\Pi_g$  и  $^3\Pi_g$ , характеризующиеся наличием двух минимумов на потенциальных кривых. Для возбуждения использовался перестраиваемый лазер на красителе с удвоением частоты и шириной полосы возбуждения 0,3 см<sup>-1</sup>. Согласно теорет. расчетам, состояние  $^1\Pi_g$  имеет сложную природу — ридберговское состояние (( $\Pi_g \rightarrow 4s$ ) $^1\Pi_g$  взаимодействующее при малых межъядерных расстояниях ( $R$ ) с отталкивательным валентным состоянием  $^1\Pi_g(\Pi_u + \sigma_u)$ , а при больших  $R$  взаимодействующее с валентным ионно-парным состоянием. Приведены энергии двухфотонных переходов

М.А.

X. 1988, 19, N 18

из состояния  $X$ ,  $v''=0$  на колебат. уровни ( $v_b'$ ) внутренней потенциальной ямы состояния  $^1\Pi_g$  ( $v_b'=0-15$ ) изотопомеров  $^{35}\text{Cl}_2$ ,  $^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}$  и  $^{37}\text{Cl}_2$  ( $\nu_{00}=67\,027\text{ см}^{-1}$ ) и состояния  $^3\Pi_g$  ( $v_b'=0-9$ )  $^{35}\text{Cl}_2$  ( $\nu_{00}=63\,472\text{ см}^{-1}$ ), а также энергии переходов на уровни, лежащие выше потенциального барьера состояния  $^3\Pi_g$  ( $v_a'=1-30$ ). Энергия соотв. максимуму потенциального барьера составляет  $69\,250 \pm 100\text{ см}^{-1}$ , а высота барьера относительно внутреннего минимума потенциальной кривой равна  $5778\text{ см}^{-1}$ . Обсуждены природа промежут. состояния (отталкивательное состояние  $C^1\Pi_u$  или ридберговское состояние  $(4p\sigma_u)^1\Pi_u$ ) и механизм образования атомных ионов. Наблюдаемое изменение ширины линий в спектрах объясняется преддиссоциацией уровней во внутренней потенциальной яме, обусловленной отталкивательным валентным состоянием. В. М. Ковба

1988

Cl<sub>2</sub>

16 Б1150. Фотоэлектронная спектроскопия молекулярного хлора с возбуждением синхротронным излучением. Photoelectron studies of molecular chlorine using

synchrotron radiation. Reddish T., Cafolla A. A., Comer J. «Chem. Phys.», 1988, 120, № 1, 149—154 (англ.)

С использованием синхротронного излучения с энергией  $E$  от 13,6 до 14,15 эВ в кач-ве источника возбуждения исследованы фотоэлектронные спектры молекул Cl<sub>2</sub>. Измерения проведены на спектрометре с многоканальным детектором (разрешение  $>22$  мэВ) в обл. конечного X<sup>2</sup> П<sub>g</sub> состояния Cl<sub>2</sub><sup>+</sup>. В спектрах идентифицирована структура, отвечающая кол. уравням состояний <sup>2</sup>П<sub>g3/2</sub> и <sup>2</sup>П<sub>g1/2</sub> вплоть до значений кол. квантового числа  $v=34$ . Из анализа положений компонент кол. структуры определены частота колебаний  $\omega_e=79,6\pm 0,3$  мэВ, константа ангармоничности  $\omega_e x_e=0,37\pm 0,05$  мэВ и спин-орбитальное расщепление  $=86,3\pm 0,3$  мэВ. Получе-

М.А.

X. 1988, 19, N 16

ны зависимости от  $E$  сечений ( $\sigma$ ) возбуждения различных кол. уравнений состояния  $X^2\Pi_gCl_2^+$ . В  $\sigma(E)$  найдены три серии особенностей (две из к-рых обнаружены впервые), соотв. автоионизац. кол. уровням ридберговских состояний, сходящихся ко второму  $\Pi$ т ионизации  $A^2\Pi_g$ .

О. А. Басченко

Cl<sub>2</sub>

1988

8 J1343. Исследование молекулярного хлора методом фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения. Photoelectron studies of molecular chlorine using synchrotron radiation. Reddish T., Cafolla A. A., Comer J. «Chem. Phys.», 1988, 120, № 1, 149—154 (англ.)

М.А.

С использованием монохроматизированного синхротронного излучения в области 13,6—14,5 эВ получены фотоэлектронные спектры свободных молекул Cl<sub>2</sub> в области основного электронного состояния иона X<sup>2</sup>Π<sub>g</sub> (11,5—13 эВ). Основное внимание в работе уделено изучению влияния процессов автоионизации на заселе-

ср. 1988, 18, № 8

ние колебат. уровней состояния  $X^2\Pi_g$ . По эксперим.  
данным рассчитаны колебат. константы и постоянная  
спин-орбитального взаимодействия для состояния  $X^2\Pi_g$   
(в мэВ):  $\omega_c = 79,6$ ,  $\omega_c x_e = 0,37$  и  $86,3$  соответственно.  
Отождествлены новые колебат. прогрессии, отнесенные  
авторами к сверхвозбужденным состояниям, через кото-  
рые идет процесс автоионизации.

М. Т.

Cl<sub>2</sub>

1988

108: 121394p The D' → A' transition in chlorine molecule. Tellinghuisen, Patricia C.; Guo, Baochuan; Chakraborty, Dilip K.; Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 128(1), 268-77 (Eng). The emission spectrum of Cl<sub>2</sub> in inert buffer gases is dominated by a band system with peak intensity ~2580 Å. This transition was identified as the D'(2<sub>g</sub><sup>3</sup>P<sub>2</sub>) → A'(2<sub>u</sub><sup>3</sup>Π) system, where the parenthetical entry for the upper state indicates its ion-pair parentage, and the lower state is the lowest excited valence state. A rotational anal. which includes a total of 1300 assigned lines for 7 ν'-ν'' bands in <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> and 10 in <sup>37</sup>Cl<sub>2</sub> yielded the following spectroscopic consts. for <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> (units cm<sup>-1</sup> and Å): ΔT<sub>0</sub> = 40, 126.7(6), ω'<sub>e</sub> = 252.43(1), ω''<sub>e</sub> = 258.5(5), B'<sub>e</sub> = 0.11671(2), B''<sub>e</sub> = 0.16311(8), R'<sub>e</sub> = 2.8742(2), and R''<sub>e</sub> = 2.4313(6). The abs. energies of both states remain uncertain but are estd. from other work to be T<sub>0</sub>' = 57, 300(20) and T<sub>0</sub>' = 17, 170(20) cm<sup>-1</sup>.

(D' → A', u.n.)

C.A. 1988, 108, N14



Cl<sub>2</sub>

1988

8 Л240. Переход  $D' \rightarrow A'$  в молекуле  $\text{Cl}_2$ . The  $D' \rightarrow A'$  transition in  $\text{Cl}_2$ . Tellinghuisen Patricia C., Guo Baochuan, Chakraborty Dilip K., Tellinghuisen Joel. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 268—277 (англ.)

Получены эмиссионные спектры  $^{35}\text{Cl}_2$  и  $^{37}\text{Cl}_2$  в газовой фазе с разрешенной колебательной структурой системы полос  $D' \rightarrow A'$  (2580 Å). Для некоторых полос хорошо разрешена вращательная структура. Построены потенциалы Ридберга—Клейна—Риса и определены основные спектроскопич. постоянные исходного и конечного электронных состояний. Каких-либо аномалий вращательной структуры не обнаружено; имеющиеся в литературе данные о ее искажении вследствие возмущений получены вследствие неправильного определения положения начала полос. Состояние  $A'$  отождествлено с низшим валентным возбужденным состоянием  $^3\Pi_u$ ,  $D'$  - с низшим «ионным» состоянием ( $\text{Cl} + (^3P_2) + \text{Cl} - (^1S)$ ). Библ. 32. А. В. Зайцевский

л. л.

фр. 1988, 18, № 8

Cl<sub>2</sub>

1988

17 Б1231. Переход  $D' \rightarrow A'$  в  $Cl_2$ . The  $D' \rightarrow A'$  transition in  $Cl_2$ . Tellinghuisen P. C., Guo B., Chakraborty D. K., Tellinghuisen J. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 268—277 (англ.)

(М.П.)

Сфотографирована система полос в спектре испускания высокого разрешения молекулы  $Cl_2$ , связанная с переходом из ионно-парного состояния  $D'(2g^3P_2)$  ( $v' = 0-10$ )  $\rightarrow A'(2u^3\Pi)$  ( $v'' = 1-13$ ). Приведено положение и отнесение кантов полос для  $^{35}Cl_2$  и  $^{37}Cl_2$ . Для ряда полос измерена и проанализирована вращательная структура. Значения (в  $cm^{-1}$ )  $T_e$ ,  $D_e$ ,  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $\omega_e y_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $D_e$ ,  $\beta_e$ ,  $H_e$  и  $R_e$  (в А) для  $^{35}Cl_2$ : состояние  $D' - 57\,300$ ;  $38\,800$  (продукты диссоциации —  $Cl^+(^3P_2) + Cl^-(^1S)$ );  $252,427$ ;  $1,018$ ;  $0,00244$ ;  $0,11671$ ;  $6,42 \cdot 10^{-4}$ ;  $9,98 \cdot 10^{-8}$ ;  $2,0 \cdot 10^{-10}$ ;  $1,46 \cdot 10^{-15}$ ;  $2,8742$ ; состояние  $A' - 17\,170$ ;  $3110$ ;  $258,50$ ;  $5,458$ ;  $0,105$  (константы ангармоничности более высокого порядка  $C_{v4} = -0,0132$ ,  $C_{v5} = 4,4 \cdot 10^{-4}$ ;  $0,16311$ ;  $2,492 \cdot 10^{-3}$  (пара-

X. 1988, 19, N 17

метры зависимости  $B$  от  $v$  более высокого порядка  
 $C_{r3} = -3,07 \cdot 10^{-5}$ ;  $C_{r4} = -3,5 \cdot 10^{-6}$ ;  $2,58 \cdot 10^{-7}$ ;  $1,0 \cdot 10^{-8}$ ;  
 $-8,3 \cdot 10^{-13}$  (оценены также параметры зависимости  $D$   
 и  $H$  от  $v$  более высоких порядков);  $2,4313$ ;  $\Delta T_e =$   
 $= 40126,72$ . Рассчитаны параметры потенц. кривой  
 РКР ( $G_v$ ,  $R_{\text{мин.}}$ ,  $R_{\text{макс.}}$ ) и спектроскопич. параметры  
 ( $B_v$ ,  $D_v$ ,  $H_v$ )  $^{35}\text{Cl}_2$  в состояниях  $D'$  ( $v=0-12$ ) и  $A'$   
 ( $v=0-12$ ) и значения факторов Франка—Кондона  
 для переходов  $v_{D'} = 0-5$ — $v_{A'} = 0-15$  в молекулах  
 $^{35}\text{Cl}_2$ ,  $^{35}\text{Cl}^{37}\text{Cl}$  и  $^{37}\text{Cl}_2$  ( $J' = J'' = 0$  и  $50$ ). В. М. Ковба

ДЛ  
 ЗОВАТ  
 ЧС

Cl<sub>2</sub>

1988

110: 47777p VUV and UV fluorescence lifetimes of molecular chlorine. Tsukiyama, Koichi; Kurematsu, Yasumi; Tsukakoshi, Motowo; Misu, Akira; Kasuya, Takahiro (RIKEN, Wako, Japan 351-01). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 152(6), 523-7 (Eng). A spectroscopic study of Cl<sub>2</sub> by vacuum UV (VUV) laser-induced fluorescence is reported. The free jet excitation spectrum at 79,000-80,100 cm<sup>-1</sup> revealed the contribution of some addnl. band systems other than the dominant 2.1Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> ← X 1Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> transition system. The VUV and UV fluorescence lifetimes of ≤1-15 ns depended strongly upon the excitation wavelengths, but little on the fluorescence wavelengths. Possible assignments of the excitation bands are discussed.

(B YQ cramp)

C.A. 1989, 110, N6

Cl<sub>2</sub>

1988

108: 65190e Analysis of bound-free fluorescence and improved characterization of the electronic and spectroscopic properties of the  $1^1\Sigma_u^+$  state of chlorine molecule. Woerner, J.; Moeller, T.; Stapelfeldt, J.; Zimmerer, G.; Haaks, D.; Kampf, S.; Le Calve, J.; Castex, M. C. (Inst. Experimentalphys., Univ. Hamburg, D-2000 Hamburg, 50 Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1988, 7(4), 383-95 (Eng). Synchrotron radiation was used to selectively excite Cl in the vacuum UV spectral range. Stationary fluorescence spectra of the  $1^1\Sigma_u^+$  state were obsd. following primary excitation of  $1^1\Sigma_u^+$  and  $2^1\Sigma_u^+$ . The bound-free part of the spectra was analyzed with the aid of quantum mech. computer simulations. A potential energy curve was constructed which is an approxn. of the adiabatic double well potential energy curve of the  $1^1\Sigma_u^+$  state. The inner well was characterized by  $T_e = 73428 \pm 50 \text{ cm}^{-1}$ ,  $r_e = 1.85 \pm 0.05 \text{ \AA}$ ; for the outer well hold  $T_e = 64631 \pm 50 \text{ cm}^{-1}$ ,  $r_e = 2.57 \pm 0.05 \text{ \AA}$ ,  $\omega_e = 51 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_e x_e = 0.668 \pm 0.01 \text{ cm}^{-1}$  (<sup>35</sup>Cl<sub>2</sub>;  $\delta' < 30$ ). The potential energy curve was checked with fluorescence excitation spectra. Within the error limits, the results of a former synchrotron radiation study were verified. The Cl<sub>2</sub>  $\gamma$ -state recently obsd. with laser spectroscopic methods, cannot be attributed to the outer well of  $1^1\Sigma_u^+$ .

(M.N., BYP)  
(CHKMP)

C.A. 1988, 108, 48

Cl<sub>2</sub>

1988

6 Л445. Анализ связанно-свободных переходов и уточненные характеристики электронных и спектроскопических свойств состояния  $1^1\Sigma_u^+Cl_2$ . Analysis of bound-free fluorescence and improved characterization of the electronic and spectroscopic properties of the  $1^1\Sigma_u^+$  state of  $Cl_2$ . Wörmer J., Möller T., Stapelfeldt J., Zimmerer G., Haaks D., Kampf S., Le Calvé J., Castex M. C. «Z. Phys.», 1988, D7, № 4, 383—395 (англ.)

Получены спектры флуоресценции из  $1^1\Sigma_u^+$  состояния молекулярного хлора с селективным возбуждением синхротронным излучением в ВУФ области состояний  $1^1\Sigma_u^+$  и  $2^1\Sigma_u^+$ . Спектры в области свободно-связанных переходов интерпретированы с применением квантово-механич. численного моделирования. При расчетах использована адиабатич. потенц. кривая состояния  $1^1\Sigma_u^+$  с двумя минимумами, подогапанная по спектру возбуждения флуоресценции. Показано, что неидентифицированное состояние  $\gamma Cl_2$ , наблюдаемое ранее лазерными спектроскопич. методами, может быть отнесено к внешней яме на потенц. кривой  $1^1\Sigma_u^+$ . Библ. 40.

Е. П. Смирнов

М.П.

Ф. 1988, 18, N 6

1988

Cl<sub>2</sub>

/ 19 Б4344. Удобный фотолитический источник состояний  $Cl_2(1^1\Sigma_u^+)$  и  $Cl_2(D'^3\Pi_{2g})$  для кинетических и спектроскопических исследований. Convenient photolysis source of  $Cl_2(1^1\Sigma_u^+)$  and  $Cl_2(D'^3\Pi_{2g})$  states for kinetic and spectroscopic studies. Yu Y. C., Setser D. W. «J. Photochem. and Photobiol.», 1988, A42, № 1, 27—38 (англ.)

В области 140—350 нм зарегистрированы спектры Фл, возбуждаемые при облучении 0,05—0,5 Торр  $Cl_2$  или  $SOCl_2$  в отсутствие и в присутствии буферных газов  $N_2$ ,  $Kr$ ,  $Ar$  (до 200 Торр) и  $He$  (до 2000 Торр) монохроматич. светом 147,0 нм резонансной Хе-лампы с сапфировым окошком. Показано, что при Фт  $Cl_2$  возбуждается единственный переход  $Cl_2(1^1\Sigma_u^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+)$ , а при Фт  $SOCl_2$  — переход  $Cl_2(D'^3\Pi_{2g} \rightarrow A'^3\Pi_{2u})$ . Это указывает на образование ионо-парных состояний  $Cl_2(1^1\Sigma_u^+$  и  $D'^3\Pi_{2g})$  соотв. с высоким

X. 1988, 19, N 19

колебат. возбуждением. В присутствии буферных газов наряду с колебат. релаксацией  $\text{Cl}_2(1^1\Sigma_u^+)$  происходит его превращение в более низкое ионо-парное состояние  $\text{Cl}_2(D^3\Pi_{2g})$ . На основе графиков Штерна — Фольмера определены константы скорости тушения  $\text{Cl}_2(1^1\Sigma_u^+)$  и  $\text{Cl}_2(D^3\Pi_{2g})$  соотв. различными газами ( $10^{-10}$  см<sup>3</sup>/молекула·с): He  $1,6 \pm 0,1$ ;  $< 0,05$ ; Ar  $4,0 \pm 0,1$ ;  $< 0,05$ ; Kr  $6,1 \pm 0,1$ ;  $1,4 \pm 0,1$ ; N<sub>2</sub>  $6,2 \pm 0,1$ ;  $0,89 \pm 0,03$ ; метан —;  $4,9 \pm 0,2$ ; ацетилен —;  $11 \pm 1$ . Для объяснения возбуждения состояния  $\text{Cl}_2(1^1\Sigma_u^+)$  светом 147,0 нм потребовались модифицировать приводимые в лит-ре параметры Пт с двумя минимумами для молекулы  $\text{Cl}_2(1^1\Sigma_u^+)$ .  
Библ. 34. В. Е. Скурат



Ch

10M-32192-1 1989

Bell A. J., Pardon P. R.,  
et al.,

Раман.  
спектр

Mol. Phys., 1989, 67,  
N2, 465-472.

Cl<sub>2</sub>

1989

111: 243168z Resonance fluorescence and resonance Raman spectroscopy of halogen molecules under the irradiation of argon laser. Chang, Hua; Huang, Ta Min (Inst. Chem., Natl. Tsing Hua Univ., Hsinchu, Taiwan). *K'o Hsueh Fa Chan Yueh K'an* 1989, 17(2), 125-41 (Ch). The 488.0, 496.5, and 514.5 nm wavelengths of Ar ion laser rays were used to measure the resonance fluorescence spectra of Cl mol. The laser ray with 457.9, 476.5, and 488.0 nm wavelengths could not measure the resonance Raman spectra but the laser rays with 363.8 and 351.1 nm could measure the resonance Raman spectra of Cl. Three sets of new resonance fluorescence spectra were measured for Br mol. by using 514.5 nm wavelength laser ray. There were resonance Raman spectra under the irradiation of 488.0 nm wavelength laser ray.

спектры  
резонанс.  
флуоресц.,  
М.П.

(4)  Br<sub>2</sub>

C.A. 1989, 111, N26

Cl<sub>2</sub>

10м. 31852 | 1989

19 B1036. Закон масштабирования по  $\omega_v$  вблизи молекулярного диссоциационного предела. Теория и экспериментальная проверка для  $B$ -состояния  $Cl_2$ .  $\omega_v$  Scaling law near a molecular dissociation limit: theory and experimental tests in  $Cl_2$   $B$  state / Gouédard G., Girard B., Billy N., Vigué J. // Chem. Phys.— 1989.— 132, № 3.— С. 385—390.— Англ.

Предложено правило масштабирования для спектроскопич.  $x$ -к двухатомных молекул вблизи диссоциац. предела, согласно к-рому для величин, операторы, к-рых слабо зависят от межъядерного расстояния, предполагается пропорциональность  $x$ -ки величине  $\omega_v$  — локальной колебат. разности уровней. Проверка правила проведена на примере возбужденного  $B$ -состояния молекулы  $Cl_2$ . Рассмотрены факторы Франка—Кондона для  $B-X$  перехода, коэф. гироскопич. преддиссоциации, интенсивность флюоресценции. Во всех случаях продемонстрирована надежность предлагаемого правила.

А. В. Немухин

М.П.

X.1989, N19

Cl<sub>2</sub>

Om 34162

1989

24 B1333. Вакуумная ультрафиолетовая спектроскопия молекулы Cl<sub>2</sub>, изолированной в чистом неоне, чистом аргоне или смешанных неон — аргоновых матрицах. Vacuum ultraviolet spectroscopy of the Cl<sub>2</sub> molecule trapped in pure neon, pure argon, or mixed neon-argon matrices / Gürtler P., Kunz H., Le Calvé J. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 10.— С. 6020—6029.— Англ.

Измерены спектры возбуждения и испускания молекул Cl<sub>2</sub> изолир. в Ne, Ar и смешанных Ne—Ar матрицах (T=5 K). Для возбуждения использован синхротронный источник излучения с монохроматором (область 30—300 нм, разрешение 0,03 нм). Спектры Фл измеряли в области 160—550 нм (разрешение 2 нм). При возбуждении Cl<sub>2</sub> в чистом Ne наблюдался «лазерный» переход  $D'^3\Pi_{2g} (v'=0) \rightarrow A'^3\Pi_{2u} v''$ . Обнаруженное изменение в распределении интенсивности в колебат. структуре по сравнению с газ. фазой (Cl<sub>2</sub>/Ne) объясне-

М-1-

X. 1990, N 24

но изменением межъядерных расстояний верхнего и нижнего электронных состояний (на  $\sim 0,12$  Å при изменении агрегатного состояния). В чистом Ag или смешанных Ne—Ag матрицах в спектре испускания появляются новые широкие полосы в области 4,1; 3,8 и 3,5 эВ, к-рые приписаны частицам Ag (Cl<sup>+</sup>)\* Cl<sup>-</sup> в различных состояниях с переносом заряда. Исследована зависимость их интенсивности от относит. содержания Ag. Спектр возбуждения Cl<sub>2</sub> в Ne матрице показывает, что переход в ридберговское состояние  $^1\Sigma_u^+$  в матрице сильно сдвинут в ВЧ-область. В. М. Ковба

обо.  
и нес

Cl<sub>2</sub>

Om 32519

1989

↓ 2 Б1162. Спектроскопия оптико-оптич. двойного резонанса перехода  $1_g(3P_2) - A^3\Pi(1_u) - X^1\Sigma_g^+ Cl_2$ . Optical-optical double resonance spectroscopy of the  $1_g(3P_2) - A^3\Pi(1_u) X^1\Sigma_g^+$  transition of  $Cl_2$  / Ishiwata T., Ishiguro A., Tanaka I. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 159, № 5—6.— С. 594—598.— Англ.

С использованием двух перестраиваемых импульсных лазеров измерены спектры двойного оптико-оптич. резонанса молекул  $Cl_2$  (давл. 3 Торр). Первый лазер использовали для селективной накачки колебат. уровней промежут. состояния  $A^3\Pi(1_u)$  из основного состояния  $X^1\Sigma_g^+$  (535—595 нм), вторым — зондировали переход  $1_g(3P_2) - A^3\Pi$  (248—259 нм). Регистрировали УФ-испускание в обл. 258 нм со спектральной шириной щели 3 нм. Выполнен анализ колебат. и вращат. структуры восьми полос перехода  $A^3\Pi - X^1\Sigma_g^+$  ( $3 \leq v' \leq 8$ ) и рассчитаны спектроскопич. постоянные для состояния  $A^3\Pi(1_g)$  изотопомера  $^{35}Cl_2$  (см<sup>-1</sup>):  $Y = 17453,24(4)$ ,

М.А.

X. 1990, №2.

$Y_{10} = 252,772(23)$ ,  $Y_{20} = -4,6172(44)$ ,  $Y_{30} = -6,854(27) \cdot 10^{-2}$ ,  
 $Y_{01} = 0,16223(17)$ ,  $Y_{11} = -2,087(67) \cdot 10^{-3}$ ,  $Y_{21} = -1,206(59) \cdot 10^{-4}$ .  
 В спектрах, полученных при фиксированной частоте лазера накачки, наблюдали вращат. структуру перехода  $1_g(^3P_2) - A^3\Pi(1_u)$ . Соотв. значения постоянных для состояния  $1_g(^3P_2)$  составляют ( $\text{см}^{-1}$ ):  
 $Y_{00} = 57572,25(2)$ ,  $Y_{10} = 252,206(12)$ ,  $Y_{20} = -1,0005(18)$ ,  
 $Y_{11} = 0,116656(77)$ ,  $Y_{21} = -6,29(27) \cdot 10^{-4}$ . Отмечено хорошее согласие измеренных положений кантов в системе  $1_g(^3P_2) - A^3\Pi(1_u)$  с лит. данными по спектрам испускания  $\text{Cl}_2$ , возбуждаемым разрядом Тесла.

С. Б. Осин



Cl<sub>2</sub>

Om 32519)

1989

111: 143044p Optical-optical double resonance spectroscopy of the  $1_g(3P_2)$ -A  $3\Pi(1_u)$ -X  $1\Sigma_g^+$  transition of the chlorine molecule. Ishiwata, Takashi; Ishiguro, Atsushi; Obi, Kinichi; Tanaka, Ikuzo (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 159(5-6), 594-8 (Eng). The results are described of optical-ODR spectroscopy of Cl<sub>2</sub> on the  $1_g(3P_2) \leftarrow (h\nu_2)$ -A  $3\Pi(1_u) \leftarrow (h\nu_1)$ -X  $1\Sigma_g^+$  transition. The state-selective transition from the ground state of Cl<sub>2</sub> to the A  $3\Pi(1_u)$  state was obsd. by scanning the pump laser ( $h\nu_1$ ) frequency, while fixing the probe laser frequency ( $h\nu_2$ ) to the  $1_g(3P_2)$ -A  $3\Pi(1_u)$  system. In this procedure, a rotational anal. on the A  $3\Pi(1_u)$ -X  $1\Pi_g^+$  system was made on several vibrational bands for 2 isotopic species, <sup>35</sup>Cl<sup>35</sup>Cl and <sup>37</sup>Cl<sup>35</sup>Cl, and the vibrational numbering was detd. from the isotope difference. The  $1_g(3P_2)$ -A  $3\Pi(1_u)$  system was analyzed to establish the abs. position of the  $1_g(3P_2)$  ion-pair state.

$1_g(3P_2) \leftarrow A 3\Pi(1_u)$

$A 3\Pi(1_u) \leftarrow X 1\Sigma_g^+$

c.A. 1989, 111, 16



35 Cl

1989

Karna S.P., Grein F.

Int. J. Quantum

Chem. 1989, 36 (3),

265-75.

(see  $^{19}\text{F}$ ; iii)

v.n.,  
ab initio  
parvum

Cl<sub>2</sub>

DM 3174

1989

110: 66225y (3+1)REMPI PES of molecular chlorine in the 73300 to 75300 cm<sup>-1</sup> region:  $1^1\Sigma_u^+$  and  $3^1\Sigma_u$  states. Koenders, B. G.; Wieringa, D. M.; Kuik, G. J.; Drabe, Karel E.; De Lange, C. A. (Lab. Phys. Chem., Univ. Amsterdam, 1018 WS Amsterdam, Neth.). *Chem. Phys.* 1989, 129(1), 41-50 (Eng). Excited states of Cl<sub>2</sub> 73,300-75,300 cm<sup>-1</sup> above the neutral ground state were studied using a (3+1) resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI) scheme. Wavelength scans with linearly and circularly polarized light showed that all resonances at the 3-photon level corresponded to transitions to intermediate states which were 1-photon allowed. Most of the progressions obsd. had a counterpart in 1-photon vacuum US studies, but 1 progression was found which was absent in 1-photon work. Photoelectron (PE) spectra obtained for this progression, which was assigned as  $3^1\Sigma_u$ , revealed Rydberg character with a  $2^1\Pi_{g/2}$  core. To substantiate this assignment the PE spectra of various vibrational levels assocd. to the  $1^1\Sigma_u^+$  state in the vicinity of the  $3^1\Sigma_u$  origin were simulated numerically. These simulations of the  $1^1\Sigma_u^+$  state, which is complicated due to Rydberg-valence interactions, were based on an adiabatic approach and are in agreement with the exptl. results. A sep. anal. in terms of diabatic wavefunctions showed

( $1^1\Sigma_u^+$   
 $3^1\Sigma_u$ )  
cncnmp

c.A. 1989, 110, N8

the adiabatic approach to be valid under the present circumstances.  
The PE spectra showed that the Rydberg part of the  $1\ ^1\Sigma_u^+$  state potential has a  $2\Pi_{g3/2}$  core.



Cl<sub>2</sub>

[ Am. 34160 ]

1989

2 17g Koenders B.F., Kzeckho-  
ven S.M., Kuik G.J.,  
Pugsem. et al.,  
Сосмолт.

J. Chem. Phys. 1989, 91, N10,

6042 - 6051.

Photoelectron • spectroscopic

studies of multiphoton processes in molecular chlorine involving the  $2^11g$  Rydberg state.

Cl<sub>2</sub>

№ 32058

1989

7 11 Л342. Экспериментальное подтверждение смешения ридберговского и ионно-парного состояний в состоянии Cl<sub>2</sub> ( $1^1\Sigma_u^+$ ). Experimental evidence for Rydberg and ion-pair state mixing of Cl<sub>2</sub> in the  $1^1\Sigma_u^+$  state / Yamamoto Kaoru, Tsuchizawa Tai, Miyawaki Jun, Tsuchiya Soji // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 156, № 4.— С. 301—304.— Англ.

Спектры индуцированной лазером флуоресценции и резонансно-усиленной двухфотонной ионизации перехода  $1^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_u^+$  охлажденных в струе молекул Cl<sub>2</sub> исследованы с помощью перестраиваемого ВУФ-лазера. Вращательный анализ переходов ( $v', v''$ ) = (39, 0) молекул <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> и <sup>35</sup>Cl<sup>37</sup>Cl показал, что в состоянии  $1^1\Sigma_u^+$ ,  $v' = 39$  средние значения межъядерного расстояния для обеих изотопич. молекул локализованы в области ридберговской ямы потенциала с двумя минимумами, что является прямым эксперим. подтверждением смешения ридберговского и ионно-парного состояний Cl<sub>2</sub>.  
В. С. Иванов

М.А.

фр. 1989, № 11

Cl<sub>2</sub>

[Om 32058]

1989

110: 202003d Experimental evidence for Rydberg and ion-pair state mixing of molecular chlorine in the  $1^1E_u^+$  state. Yamanouchi, Kaoru; Tsuchizawa, Tai; Miyawaki, Jun; Tsuchiya, Soji (Coll. Arts Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 156(4), 301-4 (Eng). The laser-induced fluorescence and resonantly enhanced 2-photon ionization spectra for the  $1^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  vibronic transitions of jet-cooled Cl<sub>2</sub> were obsd. by using a tunable vacuum UV laser. A rotational anal. of the  $(v', v'') = (39, 0)$  transitions for <sup>35</sup>Cl<sub>2</sub> and <sup>35</sup>Cl<sup>37</sup>Cl reveals that the  $v' = 39$  levels of the  $1^1\Sigma_u^+$  state of these 2 isotope species are localized in a Rydberg well of the double-min. potential. The mixing of the Rydberg and ion-pair potentials is evidenced by the localization in the Rydberg well.

BRANUSAM.

AKANUZ

$1^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$

C.A. 1989, 110, N 22