

У₂

Оттиски 7979

1979

М. П.

11 Д457. Система А—Х молекулы J_2 . Ashby R. A. The A—X system of the J_2 molecule «Can. J. Phys.», 1979, 57, № 5, 698—702 (англ.; рез. франц.)

Система $A^3\Pi_{2u}X^1\Sigma_g^+$ молекулы J_2 , расположенная в области 9600—8000 Å; сфотографирована в поглощении с дисперсией 0,13—0,23 Å/мм. Проанализированы 18 полос прогрессий с $v''=4$ и $v''=5$. На основании расчетов, выполненных с использованием потенциала Морзе для состояния $A^3\Pi_{1u}$ предложена колебательная нумерация полос. Определены молекулярные постоянные для состояния $A^3\Pi_{1u}$: $T_e=11059$ см⁻¹, $D_e=1488$ см⁻¹, $\omega_e=95,9$ см⁻¹, $B_e=0,02817$ см⁻¹, $r_e=3,071$ Å. Сопоставление молекулярных постоянных состояния А со значениями постоянных для нижнего состояния УФ-лазерного перехода молекулы J_2 свидетельствует о том, что состояние А не является нижним состоянием лазерного перехода.

В. С. Иванова

Ф. 1949, 111

Y₂

000000 7979

1979

91: 46746e The A-X system of the iodine molecule. Ashby, R. A. (Chem. Dep., New South Wales Inst. Technol., New South Wales, 2007 Australia). *Can. J. Phys.* 1979, 57(5), 693-702 (Eng). The $A^3\Pi_{1u}-X^1\Sigma_g^+$ system of the I_2 mol. at 8000-9600 Å was photographed in absorption under conditions of high dispersion. The band origins and B' values of 18 bands in the lengthy progressions based on $v'' = 4$ and 5 were detd. By assuming that the potential curve of the A state is a Morse curve, an est. of the vibrational numbering of this state was made. Based on this numbering, ests. of important consts. of the $A^3\Pi_{1u}$ state were achieved: viz., $T_e = 11,059 \text{ cm}^{-1}$, $D_e = 1488 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e = 95.9 \text{ cm}^{-1}$, $B_e = 0.02817 \text{ cm}^{-1}$, and $r_e = 3.071 \text{ Å}$. A comparison between the A-state and the lower state of the UV laser transitions of the I_2 mol., based on the value of the consts. D_e , ω_e , $x_e\omega_e$, and $y_e\omega_e$, shows that the A-state cannot be the lower state of the laser transitions.

M, N.

C. A. 1979, 91, N6

1949

В. М. Ковба

2.1979, №2

I_2

1979
3 Д547. Спектр I_2 , полученный с высоким разрешением и поляризационной маркировкой. High-dispersion polarization-labelled spectrum of I_2 . Brand J. C. D., Cross K. J., Hayward R. J. «Can. J. Phys.», 1979, 57, № 9, 1455—1457 (англ.; рез. франц.)

Описан эксперимент по регистрации спектра поглощения молекулярного йода с использованием методики

Спектр
поглощения

Ф. 1980, № 3

поляризационной маркировки, описанной ранее (Teets R. et al. «Phys. Rev. Lett.», 1976, 37, 683). Группа близлежащих переходов системы В—Х молекулы J_2 асимметрично насыщалась с помощью циркулярно-поляризованного лазерного импульса ($19549,5 \pm 0,3$ см $^{-1}$). Поглощение излучения пробного широкополосного лазерного импульса ($18\,900$ — $19\,000$ см $^{-1}$) молекулами J_2 с введенной анизотропией регистрировалось по пропусканию излучения системой скрещенных поляризаторов с измерит. кюветой между ними. В поляризационно-маркированном спектре наблюдались лишь переходы с тех уровней J_2 начального состояния, для которых первый импульс вызывал насыщение. Обсуждены возможные применения метода поляризационной маркировки.

1979

J₂

спектр
флуоресц.

1 Д660. Исследование сверхтонкой структуры полосы В—Х молекулы J₂ в сверхзвуковой струе методом лазерной спектроскопии. Hyperfine structure in the В—Х transition of the iodine molecule near the head of the 12—О band, by laser spectroscopy of a pure iodine supersonic jet. Churassy S., Grenet G., Gail-lard M. L., Bacis R. «Opt. Commun.», 1979, 30, № 1, 41—46 (англ.)

Исследована сверхтонкая структура полос в спектре флуоресценции газообразных молекул J₂ (система переходов В—Х). Спектры молекул J₂ в сверхзвуковой струе паров иода (число Маха ~4,3) возбуждались излучением перестраиваемого лазера на красителе. Показано, что высокая плотность частиц в струе, отсутствие столкновительной релаксации и низкая колебательно-вращательная т-ра молекул позволяют «приготовить» достаточное их число в нужном (ν'' , J'' , F'')-состоянии и с высоким разрешением наблюдать слабые переходы ($\Delta F=0$, $\Delta F=-\Delta J$). М. Т.

Ф. ИВАНОВ

1979

J₂

(u.n.)

91:14092t Hyperfine structure in the B-X transition of the iodine molecule near the head of the 12-0 band, by laser spectroscopy of a pure iodine supersonic jet. Churassy, S.; Grenet, G.; Gaillard, M. L.; Bacis, R. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Claude Bernard, Lyon, Fr.). *Opt. Commun.* 1979, 30(1), 41-6 (Eng). A systematic high resolu. survey of band heads in the B-X transition of I₂ was performed by crossing a pure I₂ supersonic jet with the output beam of a tunable monomode dye laser. For the 12-0 band head, hyperfine structure patterns obsd. in transitions between low *J* levels can be interpreted rather easily when proper account is taken of the theory of 2nd order effects. The high d. of the beam allows the observation under high resolu. of faint lines, such as $\Delta F = 0$ and even $\Delta F = -\Delta J$ transitions, which permits the detn. of eQq' and eQq'' independently.



C.A. 1979, 21, 113

X₂

1979

Hippler H., et al.

Proton-
exchange

F. Laser-Induced Pro-
cess. Mol. Phys. and
Chem. Proc. Eur. Phys.
Soc. Div. Conf., Edinburgh,
1978, Berlin ● c.d. 1979, 286-289.
(see Br₂ i (11))

1979

J₂

8 Д278. Двухфотонное возбуждение молекулярного иода. Cunha S. L., Lisboa J. A., Francke K. E., Grieneisen H. P., Chakraborty B. P. Two photon excitation in molecular iodine. «Opt. Commun.», 1979, 28, № 3, 321—325 (англ.)

Методом двухфотонного поглощения с использованием двух перестраиваемых лазеров на красителях исследована колебательно-вращательная структура состояния E молекулы $^{127}\text{J}_2$. Определены спектроскопич. постоянные этого состояния: $T_e = 41412,1 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e = 101,56 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e = 0,19 \text{ см}^{-1}$, $B_e = 0,02052 \text{ см}^{-1}$, $\alpha_e = 0,00016 \text{ см}^{-1}$.

В. С. Иванов



М. П.

оп. 1979, № 8

1979

7
2

90:195288p Two photon excitation in molecular iodine.
Cunha, S. L.; Lisboa, J. A.; Francke, R. E.; Grieneisen, H. P.;
Chakraborty, B. P. (Inst. Fis., Univ. Fed. Rio Grand do Sul,
Porto Alegre, Brazil). *Opt. Commun.* 1979, 28(3), 321-5
(Eng). A 2-photon sequential absorption technique was used to
resolve the rotation-vibrational structure of the E -state of I_2 .
Spectroscopic consts. obtained are: $T_e = 41,412.1 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e =$
 101.56 cm^{-1} , $\omega_e x_e = 0.19 \text{ cm}^{-1}$, $B_e = 0.02052 \text{ cm}^{-1}$ and $a_e =$
 0.00016 cm^{-1} .

(u,n)



C.A. 1979, 90, N24

number 7743

1979

I₂

absorption.

(90) 130043k On the saturated fluorescence of iodine molecules. Doepel, E. (Sekt. Phys., Friedrich-Schiller-Univ., Jena, E. Ger.). *Opt. Commun.* 1979, 28(2), 186-8 (Eng). The hyperfine structure of ¹²⁹I₂-mols. was investigated by means of the satd. fluorescence excited in the resonator of a single mode 633 nm He Ne laser. In the recorded spectrum some hyperfine structure components appear, which were not obsd. in satd. absorption. The contrast of the lines and the spectral distribution of the resonance fluorescence are discussed.

Chemical
properties.

C

C.A. 1979, 90, N16

72

спектр
флуоресц.

оттиски 7743

1979

14 Б134. О насыщенной флуоресценции молекул йода. Döpel E. On the saturated fluorescence of iodine molecules. «Opt. Commun.», 1979, 28, № 2, 186—188 (англ.)

Измерены спектры насыщ. флуоресценции молекул йода, возбуждаемой в резонаторе одномодового He-Ne-лазера (633 нм). В полученных спектрах обнаружены компоненты СТС линии Р(54) 8—4 молекулы I_2 при фильтровании флуоресценции 650 или 625 нм. Отмечено хорошее согласие положения линий с данными по насыщ. поглощению. При фильтровании флуоресценции 600 нм найдены новые компоненты СТС, не наблюдавшиеся в поглощении. Обсуждена контрастность линий (отношение сигнала к фону) и спектральное распределение резонансной флуоресценции. С. Б. Осин

2. 1979, N 14

у₂

1979

4 Б137. Сверхтонкая структура линии R (98) полосы 58—1 $^{127}\text{J}_2$ в области 514,5 нм. Foth H. J., Spieweck F. Hyperfine structure of the R (98), 58—1 line of $^{127}\text{J}_2$ at 514.5 nm. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, №2, 347—352 (англ.)

М. И.

Исследована СТС слабой вращательной линии R (98) полосы 58—1 перехода $B^3\Pi(O_u^+) - X^1\Sigma_g^+$ молекулы $^{127}\text{J}_2$. Определены разности в постоянных СТ-взаимодействия верхнего и нижнего состояний: постоянная квадрупольного взаимодействия $-\Delta eqQ = eqQ'eqQ'' = 1880,198 \pm 0,09$ мгц, спин-вращательная постоянная $-\Delta C = C' - C'' = 829,20 \pm 0,04$ кгц, тензор спин-спинового взаимодействия $-\Delta D = D' - D'' = -501,9 \pm 3,5$ кгц и постоянная спин-спинового взаимодействия $-\Delta A = A' - A'' = 356,8 \pm 1,1$ кгц. Значения постоянных C' , D' и A' для уровня $v' = 58$ сопоставляются с данными для колебательных уровней с $v' = 11$ и $v' = 43$. В частности отмечается, что A ($v' = 58$) по абс. величине на два порядка больше чем A ($v' = 43$) и противоположна по знаку. Предполагается, что причиной этого является возмущение состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ состоянием O_g^- . В. М. Ковба

ХХХХХХХХ

У
2.

1 Д661. Сверхтонкая структура линии $R(98)$, 58—1 спектра флуоресценции молекулы $^{127}\text{I}_2$, возбуждаемого излучением 514,5 нм. Hyperfine structure of the $R(98)$, 58—1 line of $^{127}\text{I}_2$ at 514.5 nm. Foth H. J., Spieweck F. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 2, 347—352 (англ.)

Спектр
флуоресценции

М. Н.

Исследован спектр флуоресценции газообразных молекул $^{127}\text{I}_2$ в области 515—550 нм. Спектр возбуждался излучением Ar^+ -лазера ($\lambda=514,5$ нм). В спектре идентифицированы линии, отвечающие переходам $B^3\Pi_{u+}$, $X^1\Sigma_g^+$. Анализ доплеровского уширения линии $R(98)$, 58—1 позволил определить разницу констант сверхтонкого взаимодействия в верхнем и нижнем состояниях (в кгц): $\Delta e q Q = (1\,880\,198 \pm 9)$, $\Delta C = (829,20 \pm 0,04)$ для спин-вращательной постоянной; $\Delta D = -501,9 \pm 3,5$ для скалярной спин-спиновой и $\Delta A = 356,8 \pm 1,1$ для тензорной спин-спиновой постоянных. Результаты работы хорошо согласуются с данными других авторов.

Ф. 1980. N 1

I_2

оттиски 9047

1979

7 Б146. Отнесение нескольких групп линий в $B-X$ системе йода (I_2). Gerstenkorn S., Luc P. Assignments of several groups of Iodine (I_2) lines in the $B-X$ system. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 2, 310—321 (англ.)

М. П.

Дано отнесение линий вращательной структуры спектра йода (система $B^3\Pi(O_u^+ - X^1\Sigma_g^+)$), расположенных вблизи линий Ar^+ -лазера (5145 и 5287 Å), Kr^+ -лазера (5208, 5308 и 5683 Å), $He-Ne$ -лазера (6119 Å). Для линий, лежащих в области 5145 Å, проведено более детальное сравнение волновых чисел рассчитанных с использованием различных наборов молек. постоянных, в том числе полученного недавно авторами из анализа спектра поглощения, измеренного методом Фурье-спектроскопии.

В. М. Ковба

х. 1980 N 7

Y
2

amuck 9047

1979

J. A. Calvès

91: 6179u Assignments of several groups of iodine (I_2) lines in the B-X system. Gerstenkorn, S.; Luc, P. (Lab. Aime Cotton, CNRS II, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 77(2), 310-21 (Eng). The spectra obtained by means of Fourier spectroscopy and the assignments of the B-X lines of I_2 in the vicinity of 2 Ar ion laser lines (5145 and 5287 Å), 3 Kr ion laser lines (5208, 5308, and 5683 Å), and 1 He-Ne laser line (6119 Å) are given. A detailed comparison, in the vicinity of the Ar ion laser line (5145 Å), between the I_2 wavenumbers calcd. by means of the 2 sets of mol. consts. published by J. Wei and J. Tellinghuisen (1974) and R. F. Barrow and K. K. Yee, (1973) with those calcd. from Fourier spectroscopy data, is presented.

C.A. 1979B, 110

Оттиски 9047

1979

J_2

1 Д317. Отнесение некоторых групп линий системы В—Х молекулы J_2 . Assignments of several groups of Iodine J_2 lines in the В—Х-system. Gerstenkorn S., Luc P. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 2, 310—321 (англ.)

Спектр
поглощ.

В спектре поглощения молекулы J_2 , полученном ранее с помощью фурье-спектроскопии (Gerstenkorn S., Luc P. «Atlas du spectre d'absorption de la Molecule de l'iode», 14 800—20 000 cm^{-1} , Ed. CNRS, Paris, 1978), выполнено отнесение нескольких групп линий системы В—Х, расположенных в области двух линий Ar^+ -лазера (5145 и 5287 Å), трех линий Kr^+ -лазера (5208, 5308 и 5683 Å) и одной линии He—Ne-лазера (6119 Å). Волн. числа линий в области 5145 Å, полученные с помощью фурье-спектроскопии, сопоставлены с рассчитанными с использованием двух наборов молекулярных постоянных, опубликованных ранее в работах (РЖФиз., 1974, 10Д266; 1973, 10Д158). Библ. 18. В. С. Иванов

94080.14

У
2

2 Д563. Абсолютные иодные J_2 стандарты, измеренные методом фурье-спектроскопии. Absolute iodine (J_2) standards measured by means of Fourier transform spectroscopy. Gerstenkorn S., Luc P. «Rev. phys. appl.», 1979, 14, № 8, 791—794 (англ.; рез. франц.)

Для калибровки спектра поглощения молекулы J_2 в видимой области, полученного методом Фурье-спектроскопии, использован метод внутреннего стандарта. Определена величина поправки, которую необходимо внести в атлас линий J_2 , ранее опубликованный теми же авторами, $0,0056 \text{ см}^{-1}$ в области $14\,800\text{—}20\,000 \text{ см}^{-1}$. Точность определения волн. чисел с учетом поправки, по мнению авторов, составляет $\pm 0,002 \text{ см}^{-1}$. Библ. 17.

М. Т.

спектр
поглощ.

Ф.1980.№2

у
2)

спектр
флуоресц.

24 Б1174. Наблюдение сверхфлуоресцентного испускания для системы B—X в J₂. H a n k o L., B e n a r d D. J., D a v i s S. J. Observation of superfluorescent emission of the B-X system in J₂. «Opt. Commun.», 1979, 30, № 1, 63—65 (англ.) 194/10

Исследован спектр короткоживущего сверхфлуоресцентного испускания (СФИ) на переходе J₂ [B³Π(0) → X¹Σ] при накачке паров J₂ излучением широкополосного (~3 А) импульсного лазера на красителе. Спектр испускания наблюдали в области 1,1—1,3 мкм, накачку производили светом с 8 значениями длин волн в диапазоне 510—600 нм. Показано, что СФИ начинается через ~40 нсек после начала импульса накачки (его длительность < 0,3 мксек, энергия до 200 мдж), пороговая энергия накачки ~10 мдж. Добавки He оказывают сильный тушащий эффект на излучение J₂ и при давл. выше 1 мм СФИ прекращается. Произведено отождествление ряда спектральных линий СФИ. Показано, что переходы СФИ происходят на уровни с очень большими значениями v'' , так что наиболее вероятными являются переходы с $\Delta v \approx 40$. Отмечено, что при накачке светом 5154 и 5161 А спектр СФИ содержит одиночную линию, к-рую не удалось однозначно идентифицировать.

В. Е. Скурат

2.1079, 1024

1979

У₂

12 Д1220. Наблюдение излучения суперфлуоресценции в системе В — Х молекул J₂. Observation of superfluorescent emission of the ~~V-X~~ system in I₂. Hanko L., Benard D. J., Davis S. J. «Opt. Commun.», 1979, 30, № 1, 63—65 (англ.)

Спектр
флуоресценции

Исследованы спектральные характеристики усиленной спонтанной флуоресценции при переходах в молекулах J₂ ($B^3\Pi(0) \rightarrow X^1\Sigma$, 1,1÷1,3 мк), возбуждаемых перестраиваемым в области 510—600 нм лазером на красителе с выходной энергией ~200 мдж в импульсе длительностью ≤0,3 мсек. Суперфлуоресценция появлялась через ~40 нсек после начала импульса накачки, пороговая энергия которого оценена ~10 мдж. Зарегистрированные линии суперфлуоресценции в области 11502—13433 Å отнесены к переходам между колебательно-вращательными ($v', J' \rightarrow v'', J''$) подуровнями состояний В и Х молекул J₂. Библ. 8. С. Л.

Ф.10.42.12

1979

91: 114896f Observation of superfluorescent emission of the B-X system in diatomic iodine. Hanko, L.; Benard, D. J.; Davis, S. J. (Air Force Weapons Lab., Kirtland AFB, NM USA). *Opt. Commun.* 1979, 30(1), 63-5 (Eng). Transient superfluorescent emission was obsd. on the $I_2(B-X)$ system when I_2 was pumped by a broadband pulsed dye laser. Emission was obsd. from 1.1-1.3 μm for pump wavelengths in the range 510-600 nm.

(B-X
Co-em.)

C.A., 1979, 21, 144

1342 - X1 - 6338 1979

у
2

3 Д770. Исследования зелено-голубой флуоресценции молекул йода, возбуждаемых излучением 193-нм ArF-лазера. Studies the blue-green fluorescence from iodine molecules excited by a 193 nm ArF laser. Hemmati H., Collins G. J. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 1, 5—8 (англ.)

спектр
флуоресц.

При возбуждении смеси паров J_2 с буферным газом (Ar, Kr или He) излучением ArF-лазера наблюдалась зелено-голубая флуоресценция (широкая полоса с $\lambda_{\text{макс}} \sim 510$ нм). Исследована зависимость этой флуоресценции от интенсивности возбуждения, давления буферного газа и т.р. Результаты сопоставлены с полученными для полосы 342 нм молекулы J_2 . Сделано заключение, что наблюдаемая зелено-голубая флуоресценция обусловлена: возбуждением состояния $D^1\Sigma_u^+$ при поглощении молекулой J_2 одного кванта света с $\lambda = 193$ нм, индуцированным столкновением переходом в близлежащее состояние $^3\Pi_g$ и последующим излучательным переходом в состояние, диссоциирующее на $J(^2P_{3/2}) + J(^2P_{1/2})$. Библ. 15.

В. С. Иванов

Ф. 1980. №3

1979

У
2

13 Б1169. Фотофизические процессы в газовой фазе, измеренные с помощью оптико-акустического эффекта. Часть 7. Колебательно-поступательная релаксация J_2 : X-состояние и индуцированная столкновениями преддиссоциация B-состояния. Hunter Tom F., Kristjansson Kristjan S. Photophysical processes in the vapour phase measured by the optic-acoustic effect. Part 7. Vibrational-translational relaxation in J_2 , X state, and collisionally induced predissociation in the B state. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1979, 75, № 12, 1670—1676. (англ.)

преддиссоц.

Оптико-акустический эффект использован для изучения фотофизич. процессов в газообразном J_2 (давл. $J_2 \sim 0,3$ мм) при t -ре 295 К, наблюдающихся при модулированном возбуждении J_2 светом ртутной лампы на длине волны 546 нм. К возникновению акустич. модуляции, а следовательно и спектрофонного сигнала, приводят

Л. 1980 N 13

два различных процесса, сопровождающих преддиссоциацию молекул: 1) переходы тепловой энергии, выделяющийся в р-ции, в поступательную энергию и 2) увеличение числа частиц в исследуемом объеме. Показано, что первый из этих процессов является доминирующим. Измерено время вращательно-поступательной релаксации молекулы J_2 в X-состоянии, которое оказалось равным $\tau_v = 4,25 \cdot 10^{-12}$ сек. Показано, что в процессе столкновительной преддиссоциации, преобладающей в исследованном диапазоне давления, менее 5% выделившейся энергии переходит в колебательную энергию молекулы J_2 . «Горячие» ($T_{\text{пост}} = 2800^\circ \text{K}$) атомы J, образующиеся в процессе преддиссоциации, не играют заметной роли в образовании колебательно-возбужденных молекул J_2 , вследствие быстрой поступательной релаксации.

В. А. Сараев

1979

J₂лазерная
спектроскопия

4 Д1223. Оптическая накачка молекулы J₂ излучением лазера на парах меди. Каслин В. М., Петров Г. Г., Якушев О. Ф. «Физ. ин-т АН СССР. Препр.», 1979, № 151, 37 с., ил. (рез. англ.)

Осуществлена оптич. накачка молекулярного йода излучением лазера на парах меди (5106 и 5782 Å). Получена генерация на 14 колебательных переходах $B^3\Pi_{0+u} - X^1\Sigma_g^+$ в области 1,016—1,342 мк.

ф. 1920 № 4

У₂

ВР-Х1-6331

1979

(ϵ_i)

7 Б147. Двух- и трехфотонное поглощение J_2 . Kawasaki M., Tsukiya K., Kuwana M., Ohi K., Tanaka I. Two- and three-photon absorption of J_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 2—3, 365—368 (англ.)

Измерены спектры двух- и трехфотонного поглощения J_2 в газовой фазе при облучении перестраиваемым лазером в области 490—540 нм. Отмечено, что при возбуждении молекул J_2 длинноволновым излучением ($\lambda \approx 519$ нм) наблюдается диффузная флуоресценция в области 280—350 нм. При облучении более коротковолновым светом обнаружена система резких пиков при 385, 340, 290 и 270 нм. Наблюдена также полоса ис-

Х. 1980 N 7

пускания, связанная с состоянием $BO_u + (^3\Pi)$ иода в области 580 нм. Предположено, что УФ-полосы появляются вследствие ступенчатого многофотонного поглощения с участием B -состояния. Измерены зависимости интенсивностей испускания от лазерной мощности. На основании рассмотрения значений T_e и правил отбора полоса испускания 340 нм отнесена к переходу $1432, 2g(^3\Pi) \rightarrow 2431, 2u(^3\Pi)$, а полоса 385 нм — к переходу $1g(^3\Pi) \rightarrow 1u(^3\Pi)$. Полосы 270 и 290 нм предположительно отнесены к состояниям, промотированным благодаря трехфотонному поглощению. Предложена вероятная диаграмма состояний для ступенчатого двухфотонного поглощения.

С. Б. Осин

Y₂

BP-XI-6331

1979

92: 49689v Two- and three-photon absorption of molecular iodine. Kawasaki, M.; Tsukiyama, K.; Kuwana, M.; Obi, K.; Tanaka, I. (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 67(2-3), 365-8 (Eng). Two- and 3-photon absorption of I₂ was studied in the gas phase. The emission band at ≈ 340 nm is attributed to the $2g(^3\Pi) \rightarrow 2u(^3\Pi)$ transition, and the 385 nm band to the $1g(^3\Pi) \rightarrow 1u(^3\Pi)$ transition. The 270 and 290 nm bands correspond to states promoted by 3-photon absorption.

Chem
molecules

C. A. 1980.92.N6

J_2

ВФ-Х1-6337

1979

4 Д776. Двух- и трехфотонное поглощение J_2 . Two- and three-photon absorption of J_2 . Kawasaki M., Tsukiya K., Kuwana M., Ohi K., Tanaka I. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 67, № 2-3, 365—368 (англ.)

Экспериментально изучены спектры флуоресценции при двухфотонном поглощении молекулами J_2 перестраиваемого лазерного излучения в диапазоне 490—540 нм. Полоса флуоресценции вблизи 340 нм приписана переходу $1g(^3\Pi) \rightarrow 2431,2 \text{ и } (^3\Pi)$, а полоса вблизи 385 нм — переходу $1g(^3\Pi) \rightarrow 1u(^3\Pi)$. Обнаружены также полосы с $\lambda = 270$ и 290 нм, возбуждаемые при трехфотонном поглощении.

К. Б.

Спектр
флуоресц

J_2

ф. 1979 № 4

1979

7 Д437. Резонансное комбинационное рассеяние двухатомных молекул в газовой фазе. Kiefer W., Baierl P. Resonanz-raman-streuung an zweiatomigen Molekülen in der Gasphase. «Acta phys. austr.», 1979, Suppl. № 20, 43—73 (нем.; рез. англ.)

Рассмотрены спектры комб. рас. молекул J_2 и B_2 , возбужденные линиями лазера Ar^+ в синезеленой области, попадающими как в область дискретного, так и сплошного спектров поглощения этих молекул. Обсуждаются различия спектров резонансной флуоресценции и резонансного комб. рас., которые могут при этом наблюдаться. Рассчитано распределение интенсивности спектра комб. рас. в полосах различных колебательных гармоник в предположении, что для спектра J_2 актуальным является одно возбужденное электронное состояние $3\Pi_{0u}^+$, а для спектра B_2 — 2 электронных состояния $3\Pi_{0u}^+$ и $^1\Pi_{1u}$. Показано, что при возбуждении в области сплошного спектра необходимо учитывать действительную и мнимую части амплитуды рассеяния. Удалось достигнуть удовлетворительного согласия рассчитанных спектров с экспериментальными, при этом в результате опробования различных потенциалов была определена форма различных потенциалов кривых состояния Π_{1u} . Библ. 35.

М. Тонков

У₂

В₂

спектры

К. Р.

(+1) $\boxtimes$

рпсру,
1979
№4

1979

Обзор
 J_2
Br

резонансн.
комбинац.
рассеяние

12 Б205. Резонансное комбинационное рассеяние двухатомных молекул в газовой фазе. Kiefer W., Baierl P. Resonanz-Raman-Streuung an zweiatomigen Molekülen in der Gasphase. «Acta phys. austr.», 1979, Suppl. № 20, 43—73 (нем.; рез. англ.)

Обзор посвящен особенностям проявления резонансного КР в газ. йоде и бrome. Показано, что если для йода основной вклад в интенсивность резонансного КР вносит один электронный переход ($B \leftarrow X$), то для брома эффективны 2 электронных перехода ($B \leftarrow X$ и ${}^1\pi \leftarrow X$). В последнем случае имеют место интерференц. эффекты. Показано, каким образом действительная и мнимая части амплитуды рассеяния влияют на непрерывное резонансное КР. Анализ интенсивностей резонансного КР является эффективным методом определения вида потенциальных кривых несвязывающих состояний молекул. напр., состояния ${}^1\pi_{1u}$ молекулы йода. Фибл. 35. А. В. Бобров

(+1) ☒

х. 1949, N12

1979

72

CO

N₂⁺расчет
модуля.

14 Б49. Аналитическое выражение для колебательно-вращательных собственных функций произвольного электронного потенциала двухатомной молекулы. Ko-beissi Hafez, Dagher Mounzer. Analytic expression of the rotation-vibration eigenfunction of any electronic potential of a diatomic molecule. Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla., March 11-17, 1979. «Int. J. Quantum Chem.», Quantum Chem. Symp. № 13, 169-174 (англ.)

Предложен аналитич. метод нахождения колебательно-вращательных волновых функций для двухатомных молекул, пригодный, в частности, для тех случаев, когда потенциал задан численным образом в точках пово-

(72) [X]

x 1980 N 14

рота с последующей полиномиальной интерполяцией. Задача сведена к нахождению канонич. функций $\alpha_{vj}(r)$ и $\beta_{vj}(r)$, являющихся двумя частными решениями радиального уравнения Шредингера. Для функций α и β приведены аналитич. выражения в виде рядов. Разв-тый метод применен к нахождению колебательно-вращательных волновых функций для потенциалов, заданных разложением Данхема, а также для численных потенциалов. Точность предложенной процедуры нахождения волновых функций, как следует из расчетов для ряда электронных состояний J_2 , CO и N_2^+ не ниже точности традиц. методов численного решения задачи.

Б. И. Жилинский

I_2

(Re)

ommu 8133

1949

90: 194941j The electronic transition moment of the $BO_u^+-X^1\Sigma_g^+$ system of iodine through gain measurements of an iodine optically pumped laser. Koffend, J. Brooke; Bacis, R.; Field, Robert W. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1979; 70(5), 2366-72 (Eng). The electronic transition moment of the $I_2 BO_u^+-X^1\Sigma_g^+$ system was detd. over a range of R -centroid from 2.8-4.6 Å through gain measurements of an optically pumped I_2 laser. The technique reported here represents an important new application of optically pumped diat. lasers allowing accurate detn. of relative dipole strength functions from gain measurements.

C.A. 1949, 90, N24

Смтиса 8133

1979

22 Б1209. Определение момента электронного перехода систем $BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы J_2 методом измерения коэффициента усиления для лазера на J_2 с оптической накачкой. Koffend J. Brooke, Vascis R., Field Robert W. The electronic transition moment of the $BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system of J_2 through gain measurements of an J_2 optically pumped laser. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 5, 2366—2372 (англ.)

Для системы полос J_2 ($BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$) методом измерения коэф. усиления g лазера на J_2 с оптич. накачкой получены величины момента электронного перехода $M(R) = \langle Kv' | \mu(R) | v'' \rangle / \langle v' | v'' \rangle$ в зависимости от $\bar{R} = \langle v' | R | v'' \rangle / \langle v' | v'' \rangle$ в диапазоне $\bar{R} = 2,8 - 4,6$ А. Полученная зависимость $M(\bar{R})$ согласуется с предсказаниями на основании модели Brewer L., Tellinghuisen J. («J. Chem. Phys.», 1972 56, 3929). В области $\bar{R} = 3,2$ А наблюдается резкий максимум функции $M(\bar{R})$, в котором $|M(\bar{R})|^2 = 2,4 D^2$. При дальнейшем росте $\bar{R}$ величина $M(\bar{R})$ спадает до нуля, так что при $\bar{R} = 4,6$ А $|M(\bar{R})|^2 \leq 0,04 D^2$. Относит. погрешность измерения

22.10.79, 1822

величин $M(R)$ составляет $\sim 10\%$. Однако при более точном контроле эксперим. параметров, таких как давл. и мощность накачки, она может быть снижена до 1—5%. Указано, что предложенный метод может применяться и к др. лазерам на двухатомных молекулах с оптич. накачкой. Метод обладает рядом преимуществ по сравнению с известными методами измерения $M(\bar{R})$ (измерения интенсивностей флуоресценции, коэф. поглощения или излучательных времен жизни): при его использовании не требуется калибровки чувствительности детектора в зависимости от длины волны, имеется возможность зондирования электронных переходов в широком диапазоне изменения $\bar{R}$ в условиях, свободных от эффектов доплеровского уширения и случайного перекрывания линий; измеряют величину, пропорциональную $|M(\bar{R})|^2$ при одном значении $\bar{R}$, а не величину, усредненную по колебательным уровням при нескольких значениях $\bar{R}$.

В. Е. Скурат

У₂

8133

1979

11 Д470. Электронный момент перехода системы $BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы J_2 , определенный по измерениям усиления в J_2 -лазере с оптической накачкой. Koffend J. Brooke, Bacis R., Field Robert W. The electronic transition moment of the $BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system of J_2 through gain measurements of an J_2 optically pumped laser. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 5, 2366—2372 (англ.)

Электронный
момент
перехода

Описана методика определения электронных моментов перехода с помощью двухатомных лазеров с оптич. накачкой. Определена зависимость электронного момента перехода системы J_2 ($BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$) от межъядерного расстояния в диапазоне от 2,8 до 4,6 А. Библ. 25.

СР.1079/11

Очтмш 8547

1979

Э БТЗ6. Непрерывное излучение оптически накачиваемого лазера на иоде. Спектроскопия и анализ в области больших (межъядерных) расстояний основного состояния $X'\Sigma_g^+ J_2$. Koffend J. B., Bacis R., Field R. Continuous wave optically pumped iodine laser. Spectroscopy and long range analysis of the $X'\Sigma_g^+$ ground state of J_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 2, 202—212 (англ.)

Лазерный эффект на J_2 использовался для изучения потенциальной функции в области больших межъядерных расстояний основного состояния $X'\Sigma_g^+$. Иод накачивался одной продольной модой аргонового лазера в области 5145 или 5017 Å, при этом возбуждался переход $BO_w^+ - X'\Sigma_g^+$, причем максимум интенсивности был при больших v'' . Использовалась накачка след. состояний: $v'=43$ $J'=12$ и 16, $v'=44$ $J'=47$ и 87, $v'=49$, $J'=102$, $v'=50$ $J'=45$, $v'=62$ $J'=27$ и $v'=64$ $J'=40$. Излучение с этих уровней приводило к появлению в

X. 1980.13

области $0,55-1,35$ мкм 752 линий, в том числе 44 линий с $\nu'' \geq 83$ (область $1,28-1,34$ мкм). Все эти линии имели сверхтонкую структуру. Выполнено отнесение спектра с использованием имеющихся данных по состоянию VO_2^+ . Определены колебательные термы и вращательные постоянные для $\nu''=83-96$. Обсужден вид потенциала нода вблизи диссоциац. предела и сравниваются различные эмпирич. потенциалы, используемые в лит-ре. Для потенциала $V(R)=D_e-C_6/R^6$ определено значение $C_6=1,1 \pm 0,1 \times 10^6$ см $^{-1}$ А $^{-6}$. Указывается, что последний колебательный уровень основного состояния имеет $\nu=114$. Л. В. Серебренников



У₂
1 Д1041. Непрерывный йодный лазер с оптической накачкой. Спектроскопия и анализ дальнего действия основного состояния $X^1\Sigma_g^+ J_2$. Continuous wave optically pumped iodine laser. Spectroscopy and long range analysis of the ground state of $X^1\Sigma_g^+ J_2$. Koffend J. Brooke, Bacis Roger, Field Robert W. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 2, 202—212 (англ.)

Изучен спектр лазера на парах йода с рабочим давл. $90 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. при накачке излучением 514,5 или 501,7 нм одномодового аргонового лазера. Длина рабочей кюветы йодного лазера составляла 240 см. Измерен спектр генерации. В области 0,55—1,35 мк идентифицировано 752 линии, принадлежащие переходам в системе $J_2BO_u^+ - X^1\Sigma_g^+$. С целью исследования структуры состояния $X^1\Sigma_g^+$ вблизи предела диссоциации проведен анализ 44 переходов $83 \leq v'' \leq 96$ в области 1,28—1,34 мк. Определены вращательные и колебательные константы этих состояний. Анализ действующего межъядерного потенциала основного состояния йода показал, что параметр $C_6 = (1,1 \pm 0,1) \cdot 10^6 \text{ см}^{-1} \text{ А}^{-6}$ и последний связанный колебательный уровень состояния $X^1\Sigma_g^+$ имеет $v=114$. Библ. 24.

П. Ш.

Ф. 1980. N1

Omni 8547

1949

91: 65953m Continuous wave optically pumped iodine laser. Spectroscopy and long-range analysis of the $X^1\Sigma_g^+$ ground state of diatomic iodine. Koffend, J. Brooke; Facis, Roger; Field, Robert W. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA): *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 77(2), 202-12 (Eng). Continuous wave oscillation is obsd. on transitions belonging to the $I_2 B O_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system into highly excited vibrational levels of the ground state. The I_2 laser is optically pumped with a single longitudinal mode Ar ion laser oscillating at either 514.5 or 501.7 nm resulting in some 752 assigned laser lines throughout the visible and near IR. Of these, 44 transitions have $80 \leq v'' \leq 96$ and are used here to obtain rotational and vibrational consts. for levels of $X^1\Sigma_g^+$ near the disocn. limit. A long range anal. applying the theory of R. J. LeRoy (1973) to the highest obsd. levels yields $C_6 = 1.1 \pm 0.1 \times 10^6 \text{ cm}^{-1} \text{ \AA}^{-6}$ and indicates that the last bound vibrational level of $X^1\Sigma_g^+$ has $v = 114$.

M.H.

1949, 9/18

1979

У
2

9 Д171. Релятивистски параметризованный расши-
ренный метод Хюккеля. Lohr L. L., Pyykko P. Re-
lativistically parameterized extended Hückel theory.
«Chem. Phys. Lett.», 1979, 62, № 2, 333—338 (англ.)

Предложена параметризация расширенного метода
Хюккеля, учитывающая релятив. эффекты. Расчет мат-
ричных элементов эффективного одноэлектронного га-
мильтониана сводится к расчету интегралов перекрыва-
ния атомных ф-ций, заданных в базисе $|lsjm\rangle$, причем
для $j=l+1/2$ и $j=l-1/2$ используются различные ра-
диальные ф-ции. Атомные орбитальные энергии в ре-
лятив. приближении получены с помощью расчетов по
методу Дирака-Фока. Конкретные расчеты выполнены
для молекул J_2 , Br_2 , JBr , HJ , InJ , CH_4 , SiH_4 , GeH_4 ,
 SnH_4 , $(114) H_4$, Bi_4 . Исследована связь между орбиталь-
ными энергиями и наблюдаемыми потенциалами иониза-
ции. Показано, что спин-орбитальное расщепление ва-
лентной оболочки хорошо воспроизводится в рамках
предложенного метода. Е. А. Жилинская

расчет
матрич.
элементов

(+10) ☒

9.1979/19

Метод
Хюккеля

у
2

ув. мех.
расчет
2л. строен.

(+11)  см. на обороте

2. 1979, N 4

17 Б18. Расширенный метод Хюккеля с релятивистской параметризацией. Lohr L. L. Jr., Ruukko P. Relativistically parameterized extended Hückel theory. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 62, № 2, 333—338 (англ.)

Предложен новый вариант расширенного метода Хюккеля (РМХ) с релятивистской параметризацией (РРМХ). Матричные элементы одноэлектронного эффективного гамильтониана, связанные с интегралами перекрывания по ф-ле средн. арифметического $[s_k=1,75]$, определены в базисе ф-ций $\{lsjm\}$. Для базисных ф-ций с $j=l+1/2$ и $j=l-1/2$ при заданных значениях n и l использованы различные радиальные части. Для каждого атома с s -, p - и $d=AO$ применялись по два набора ф-ций: $s_{1/2}$, $p_{1/2}$, $d_{3/2}$ и $s_{1/2}$, $p_{3/2}$, $d_{5/2}$ соотв. Матрица перекрывания вычислялась по станд. программе Гоффмана с действительными АО. Унитарное преобразование матрицы с к исходному базису проведено отдельно для каждого пар-

1979

ного атомного блока начальной матрицы γ -рекуррентности
и отдельно для α и β спинов. Условие фаз для
 $\{lsm\}$ -базиса выражено через 3-j символы. Релятивист-
ские и нерелятивистские значения атомных орбитальных
энергий получены методами Дирака — Фока и Хартри —
Фока. Проведены расчеты электронного строения J_2 , B_2 ,
 JB_2 , H_2 , In_2 , CH_4 , SiH_4 , GeH_4 , SnH_4 , PbH_4 , [114] H_2 и
 Bi_4 . Результаты сопоставлены с имеющимися для этих
систем в релятивистских и нерелятивистских вариантах.
Отмечено, что предложенная версия PRMX дает полу-
колич. описание релятивистских эффектов. С. Долин

Y₂

Lommen 8097

1979

сметр
воздущ.
сметр
гравес.

McClelland B. M.,
et al.

J. Phys. Chem., 1979,
83 (8), 947-58

72

1979

сверхтонк.
структура
Э. спектра

12 Д309. Сверхтонкая структура электронного спектра $^{127}\text{I}_2$ вблизи 633 нм, измеренная методом абсорбционной спектроскопии насыщения. Morinaga Atsuo, Tanaka Keiichi. Hyperfine structure in the electronic spectrum of $^{127}\text{I}_2$ by saturated absorption spectroscopy at 633 nm. «Bull. Nat. Res. Lab. Metrol.», 1979, № 39, 28—30 (англ.)

С помощью He—Ne-лазера (633 нм), перестраиваемого в диапазоне $\sim 1,5$ ГГц при сохранении одностороннего режима работы, измерены частоты всех сверхтонких компонент линии R(127) полосы 11—5 и десяти компонент линии P(33) полосы 6—3 электронного перехода $\text{B}^3\Pi_{0u} + \leftarrow \text{X}^1\Sigma_g +$ молекул $^{127}\text{I}_2$ методом спектроскопии насыщенного поглощения. Указанный режим работы лазера обеспечивался применением сложного оптич. резонатора, состоящего из основного длиной 190 см, и

ар. 1979/1/12

вспомогательного, длиной 10 см, частоты настройки которых синхронизировались методом первой производной модуляционной частоты. Улучшенное соотношение сигнал/шум, составившее ~ 5 для линии $R(127)$ и ~ 100 для линии $P(33)$, позволило измерить частотные интервалы между большинством компонент с точностью $\pm 0,1$ Мгц. Определена величина разности констант ядерного электрич. квадрупольного взаимодействия для основного и возбужденного состояний и константа магн. сверхтонкого взаимодействия в возбужденном состоянии, имевшие значения $\Delta eQq = -960,6 \pm 0,1$ Мгц и $K = 484,8 \pm 1,4$ Мгц соответственно. Библ. 10. С. Л.

1979

Y₂

✓92: 85201p Analysis of hyperfine structure in the electronic spectrum of iodine molecule. Morinaga, Atsuo; Tanaka, Keiichi (Natl. Res. Lab. Metrol., Tokyo, Japan). *Keiryō Kenkyūsho Hokoku* 1979, 28(2), 47-54 (Japan). The hyperfine structures of the *R*(127) line in the 11-5 band and the *P*(33) line in the 6-3 band of the *B*←*X* electronic transition of ¹²⁷I₂ were theor. investigated. The higher order terms of the tensor or scalar nuclear spin-spin interactions improve the agreement between the expts. and theory. The differences in hyperfine coupling consts. for the upper and lower electronic states were also detd. The results obtained for the *R*(127) line are; $\Delta eQq = 1944.3 \pm 0.2$ MHz for the nuclear elec. quadrupole interaction, $\Delta C = 28.6 \pm 0.1$ kHz for the magnetic nuclear spin-rotation interaction, $\Delta D_t = 20 \pm 4$ kHz for the tensor nuclear spin-spin interaction, and $\Delta D_s = -9.5 \pm 2.3$ kHz for the scalar nuclear spin-spin interaction.

A. Inaba

сверхтон.
струк.

CA 1980 92 N10

T_2

N_2

O_2

H_2

NO

CO

P_2

Оттиск 8313

152

21 Б24. Два новых тригонометрических потенциала для связанных состояний двухатомных молекул. Noor Mohammad S. Two new trigonometrical potentials for the bound states of diatomic molecules. «Physica», 1979, ВС96, № 3, 410—421 (англ.)

Рассмотрены два новых аналитич. потенциала для аппроксимации потенциальных кривых связанных состояний двухатомных молекул: $U_1(r) = A \operatorname{th}(r^p/q) - C \operatorname{sech}^2(r^p/q)$, $U_2(r) = M \cos \operatorname{sech}^2(r^m/d) - N \operatorname{sech}^2(r^m/d)$. Формально оба потенциала являются четырехпараметрич., однако показано, что параметр p в случае U_1 или m в случае U_2 можно сделать эмпирич. зависимостью с параметром, $U(r_e)/D_e$, определяемым по эксперим. данным. Оставшиеся три параметра подбираются по эк-

метод расчета
молекулы.

2-1979, №21

① - метод расчета 2-х атом. молекул.
② - расчет молекулы.

сперим. значениям энергии диссоциации D_e , равновесного межъядерного расстояния r_e и силовой постоянной K_e . Качество потенциальной функции оценивается по ее способности воспроизводить спектроскопич. постоянные α_e и $\omega_e X_e$. Конкретно рассмотрены 10 электронных состояний (основных и возбужденных) молекул J_2 , N_2 , O_2 , H_2 , NO , CO и P_2 . Сделано заключение, что новые потенциальные функции (особенно U_2) превосходят по кач-ву известные трехпараметрич. потенциалы, но уступают пятипараметрич. потенциалу Хулберта — Хиршфелдера. Обсуждены проблемы расчета высших производных в точке минимума, анализа ван-дер-ваальсовой области взаимодействия и построения колебательно-вращательных волновых функций с данными потенциалами.

А. В. Немухин

J₂

Smirnova 8901

1979

Chad. 1979.

Obwada K.

Spectrochim. acta,
1979, 35, 1553-57

I_2

I_2He_n

фото-
диссоц.

(+1) Δ

г. 1980. № 4

4 B1365. Распределение энергии в продуктах фотодиссоциации ван-дер-ваальсовых молекул. Комплекс мода с гелием. Sharfin Wayne, Johnson Kenneth E., Wharton Lenn..., Levy Donald I. Energy distribution in the photodissociation products of van der Waals molecules: Iodine-helium complexes. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 3, 1292—1299 (англ.)

Исследовали процесс фотодиссоциации (ФД) ван-дер-ваальсовых молекул I_2He_n ($n=1, 2$), получаемых при сверхзвуковом истечении потока He , содержащего несколько $млн^{-1}$ I_2 , в вакуум через сверхзвуковое сопло из камеры, давл. в которой было равно 100 атм. Поступательная т-ра молекул I_2 была ниже 0,1 К, а вращательная т-ра $\sim 0,5$ К. Эти молекулы испытывали колебательную преддиссоциацию в результате селективного лазерного возбуждения (перестраиваемый лазер на красителе) из состояния, соотв-щего основному электронному и колебательному состоянию $J_2(X^1\Sigma_g^+, v''=0)$ и основных колебательных состояний ван-дер-ваальсовой связи, в индивидуальное возбужденное вибронное состояние комплекса, соотв-щее состоянию $V^3_{low}, v'=21$ молекулы J_2 . Во всех случаях колебательная мода комплекса, возбуждаемая лазером, очень

(1980)

Энергия
длина
волны
9,3
4
10⁻⁸

близка к валентному колебанию молекулы J_2 . Это колебание связано с колебаниями по более слабым ван-дер-ваальсовым связям и приводит в конечном счете к отщеплению атомов. Не за время порядка нескольких сотен колебательных периодов молекулы J_2 . Поскольку характеристич. время этого процесса на несколько порядков величины короче по сравнению с излучательным временем J_2 , комплекс разрушается до флуоресценции (Фл) J_2 или преддиссоциации J_2 на атомы в основном состоянии. Поэтому все наблюдаемые спектры Фл обусловлены испусканием света молекулами J_2 , уже не входящими в состав комплексов. Изучали как спектры Фл, так и спектры возбуждения Фл. Показано, что для каждого комплекса J_2Ne_n первый наблюдаемый канал диссоциации обусловлен потерей n колебательных квантов с валентного колебания молекулы J_2 даже в случаях, когда энергетически возможны процессы с потерей меньшего числа квантов. Этот n -квантовый процесс преобладает, наблюдаются также более слабые $(n+1)$ -квантовые процессы. Различные комплексы могут быть идентифицированы по сдвигу

полосы поглощения комплекса относительно свободной молекулы J_2 , т. е. к. полоса поглощения сдвигается на постоянную величину на каждый дополнительный атом в комплексе. Измерены сечения столкновительной колебательной релаксации J_2 атомами. Не при сверхзвуковом расширении газ. струи в вакуум в зависимости от расстояния от сверхзвукового сопла. Показано, что эффективное сечение колебательной релаксации увеличивается по мере снижения поступательной т-ры от 300 К до 100 К. В. Е. Скурлат

1979

7 Д123. Применение теории возмущений в релятивистских расчетах. II. Молекулы. A perturbation theory approach to relativistic calculations. II. Molecules. Snijders J. G., Baerends E. J., Ros P. «Mol. Phys.», 1979, 38, № 6, 1909—1929 (англ.)

Развивается самосогласованная теория возмущений, основанная на методе Хартри—Фока—Слэтера (ХФС) в применении к релятив. расчетам молекулярных систем. Для вычисления ф-ции нулевого приближения использовался аналитич. вариант метода ХФС с численной оценкой молекулярных интегралов. В качестве иллюстрации предложенного метода рассчитаны фотоэлектронные спектры молекул J_2 и HgJ_2 . Ошибки в величинах потенциалов ионизации не превышают 1 эв. Ч. I см. Snijders J. G., Baerends E. J. «Molec. Phys.», 1979, 36, 1789).
А. И. Панин

фотоэлектронный
спектр

(+1)

Ф. 1980. № 7

У₂

М.П.

Отмеч 8008

Х. 1949/17

7 Б74. Определение постоянных колебательного потенциала двухатомных молекул с помощью метода газовой электронографии. Spiridonov V. P., Gershikov A. G., Butayev B. S. Electron diffraction evaluation of vibrational potentials of diatomic molecules. «J. Mol. Struct.», 1979, 51, № 1, 137—140 (англ.)

Развит новый подход к интерпретации перв. электронографических данных, продемонстрированный на примере молекулы J_2 . В ур-ние Дебая для интенсивности рассеяния (ИР) электронов введен с помощью матриц плотности колебательный потенциал двухатомной молекулы в виде ряда Данхэма, включающего члены разл. вплоть до 4-го порядка. Из кривой ИР, полученной при $T=294$ К, определены величины равновесного межъядерного расстояния $r_e=2,6664$ (21) А, частоты колебания $\omega_e=207,5$ (8,1) $см^{-1}$, постоянных $K_3=-5,67$ (1,02) $см^{-1}$ и $K_4=0,40$ (27) $см^{-1}$. Полученные величины хорошо согласуются с найденными спектроскопически. Для первых шести колебательных уровней рассчитаны величины средних межъядерных расстояний $r_v = \langle 1/r^2 \rangle_v^{-1/2}$. Использованный подход значительно увеличивает кол-во молек. параметров, которые могут быть определены с помощью метода газовой электронографии.

Г. В. Гиричев

1949
5489-1/1-6345
ВР-Х/1-6345

1979

24 Б91. Простой метод непараметрической оценки функции плотности вероятности распределения в двухатомных молекулах посредством газовой электронографии. Spiridonov V. P., Maimin Z. G., Ger-shikov A. G. A simple method for non-parametric estimation of the probability distribution function of diatomic molecules by electron diffraction. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 1, 89—92 (англ.)

На основе рассмотрения ур-ния Дебая для интенсивности рассеяния как линейного интегрального ур-ния Фредгольма первого рода, предложен метод оценки функции плотности вероятности распределения $P(r)$ для двухатомных молекул с использованием функции приведенной молек. составляющей интенсивности рассеяния $sM(s)$, получаемой в газовой электронографии. При решении использована процедура регуляции Тихонова. Метод продемонстрирован на примере молекулы J_2 , для к-рой определяемые в газовой электронографии межъядерные расстояния r_g , r_a и амплитуда колебаний l_a получены посредством линейного МНК

метод
решения
сист. уравн.

(+) метод

Л. 1979, № 24

без каких-либо предположений о форме колебательного потенциала ($r_g = 2,6730$ А, $r_a = 2,6720$ А и $l_a = 0,0513$ А). Для проверки кач-ва полученной непараметрич. функции $P(r)$ использовано аналитич. представление $P(r)$ через матрицы плотности с колебательным потенциалом в виде ряда Данхема. Полученные параметры: межъядерное расстояние $r_e = 2,6646$ А, частота колебания $\omega_e = 189,2$ см⁻¹, силовые постоянные $K_3 = -8,8$ см⁻¹, $K_4 = -0,4$ см⁻¹ удовлетворительно согласуются с найденными спектроскопически.

Г. В. Гиричев

72

1979

образов.
молекулы
при фото-
диссоц. CF_3J

11 Д1102. Влияние O_2 на образование молекуляр-
ного йода при импульсной фотодиссоциации CF_3J .
Strong Julie E., Prest Harry F., Strong Robert L. Effect of O_2 on molecular iodine production
following flash photodissociation of CF_3I . «J. Photo-
chem.», 1979, 10, № 6, 413—424 (англ.)

Исследован во времени выход молекулярного йода
при импульсном газофазном фотолизе CF_3J (в смеси с
 CO_2). В отсутствие O_2 индукционный период равен
200 мксек и определяется тушением атомов $\text{J}(^2\text{P}_{1/2})$
с последующей рекомбинацией атомов йода в основном
состоянии $\text{J}(^2\text{P}_{3/2})$. Добавление небольшого кол-ва O_2
сильно увеличивает скорость образования J_2 . При
 $P(\text{O}_2) \geq 0,2$ мм рт. ст. основное кол-во образуется во
время фотолизирующего импульса. Результаты объясне-
ны образованием промежут. эксиплекса $\text{J}(^2\text{P}_{1/2}) + \text{O}_2$.
Библ. 37.

ср. 1979, 11

Y₂

1979

92: 13089k Spectroscopy of doubly resonant third-harmonic generation in molecular iodine. Tai, C.; Dalby, F. W.; Giles, Gordon L. (Phys. Dep., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can.). *Phys. Rev. A* 1979, 20(1), 233-8 (Eng). A technique of 3rd harmonic generation based on simultaneous resonances in 1- and 2-quantum transitions was applied to find a level of symmetry $1O_g^+$ of I_2 . The energy of this level is given, in cm^{-1} , by $E_T(n, J) = (35972.4 \pm 0.5) + (132.9 \pm 0.2)(n + 1/2) - (0.34 \pm 0.02)(n + 1/2)^2 + [(0.02857 \pm 0.00015) - (0.00015 \pm 0.00002)n](J)(J + 1)$, where n is an integer differing from the vibrational quantum no. v by an undetd. integer, and J is the angular momentum. This technique has relatively high efficiency in 3rd-harmonic generation and may provide a basis for a new Doppler-free spectroscopy.

(u, n.)

C.A. 1980.92 N2

1979

J2

Tellinghuisen Joel
Top Meet Excim. Lasers.
Dig. Techn. Pap, Charleston.
S.C., 1979

спектр
испуск.

See Xcel ; III

1979

У₂

23 Б75. Неэмпирический расчет параметров сверхтонкого и магнитного взаимодействий для J_2 в состоянии B . Vigué J., Broyer M., Lehmann J. C. Ab initio calculation of hyperfine and magnetic parameters in the I_2 B state. «Phys. Rev. Lett.», 1979, 42, № 14, 883—887 (англ.)

Предложен простой аналитич. метод неэмпирич. расчета констант сверхтонкого взаимодействия: константы взаимодействия ядерный спин-вращение c_I , вращательного фактора Ланде g_J , и хим. сдвига g_1 для молекулы иода в состоянии $B^3\Pi_{0+4}$. Для описания возбужденных колебательных состояний использован квазиклассич. подход. Молек. электронная волновая функция для больших межатомных расстояний представлена в виде симметризованной линейной комбинации атомных функций. Для расчета молек. параметров использована теория возмущений, учитывающая взаимодействие только между состояниями, имеющими одинаковый диссоциац. предел. Получено хорошее согласие теор. значений параметров с экспериментальными. Развитый метод применим к произвольному молек. состоянию, находящемуся вблизи диссоциац. предела.

Б. И. Жилинский

кв. мех.
расчет

Х. 1979 № 23

1979

90: 192716r Ab initio calculation of hyperfine and magnetic parameters in the molecular iodine B state. Vigue, Broyer, M.; Lehmann, J. C. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Ec. Norm. Super., Paris, Fr.). *Phys. Rev. Lett.* 1979, 42(14), 883-7 (Eng). The spin-rotation magnetic-dipole hyperfine const. (C_I), the rotational Lande factor (g_J), and the chem. shift [g_I , which is a modification of the nuclear Lande factor (B., et al., 1975)] for different vibrational quantum nos. ($v' = 40-70$) of the $B^3\Pi_{0^+u}$ state of I_2 were calcd. with the described new ab-initio method. The calcd. values agreed well with the available exptl. data. The method is quite general, and can be applied with minor modifications to any mol. state close to its disocn. limit.

ph. acc.
factes

C.A. 1979, 90, N24

7 Д764. Ступенчатое двухфотонное возбуждение молекулярного йода: обоснование возбуждения E -состояния. Williamson Ashley D. Stepwise two-photon excitation of molecular iodine. The E state vindicated. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 3, 451—454 (англ.)

Исследован спектр возбуждения флуоресценции молекулярного йода при ступенчатом двухфотонном переходе в состояние $E^3\text{P}_{0g}^+$ через промежуточное состояние

$B^3\text{P}_{u}^+$. Селективное возбуждение состояния B осуществлялось импульсным лазером на красителе со стабилизированной частотой ($\nu = 16955,25 \text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu \leq 0,1 \text{ см}^{-1}$), а источником пробного излучения служил перестраиваемый лазер на красителе ($\lambda = 3960—4250 \text{ Å}$, $\Delta\nu \sim 0,6 \text{ см}^{-1}$, воспроизводимость $\nu \sim 0,5 \text{ см}^{-1}$). На основании полученных результатов определены некоторые молекулярные постоянные состояния B , значения которых хорошо согласуются с вычисленными теоретически. Отмечено, что полученные результаты не согласуются с данными (Danyluk M. D., King G. W., Chem. Phys. 1977, 22, 59) и, в отличие от последних, подтверждают анализ спектра испускания, выполненный в работе (Wieland K. et al., «J. Mol. Spectr.», 1972, 41, 69).

М. Ю. Н.

1979

2489-11-6342

спектр
флуоресценции

рпсфц,
1979
н 7

У₂

ВФ-Х1-6342

1979

11 Б1328. Ступенчатое двухфотонное возбуждение молекулярного йода. Подтверждение существования *E*-состояния. Williamson Ashley D. Stepwise two-photon excitation of molecular iodine: the *E* state vindicated. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 3, 451—454 (англ.)

Методом ступенчатого двухфотонного возбуждения изучена спектральная полоса перехода $E^3\Pi_g^+ \leftrightarrow B^3\Pi_u^+$ молекулы J_2 . Пары J_2 при комн. т-ре (давл. 0,25 мм) возбуждали двумя направленными навстречу друг другу пучками импульсных лазеров на красителе, накачиваемых одним и тем же лазером на N_2 . Один из лазеров возбуждал индивидуальные колебательно-вращательные уровни *B*-состояния, а второй — колебательные по-

М. И.

Х.1979, N11

лосы E -состояния. В отличие от работ Danyluk M. D., King G. W. («Chem. Phys. Lett.», 1976, 44, 440, «Chem. Phys.», 1977, 22, 59) подтверждено наличие E -состояния молекулы J_2 и определены его спектральные параметры (см^{-1}): T_e 41304,36; ω_e 101,59; $\omega_e x_e$ 0,2054; B_e $2,0255 \cdot 10^{-2}$; α_e $8,34 \cdot 10^{-5}$.
В. Е. Скурат

Y
2

BP-XI-6342

1979

90: 12541s ~~Stepwise~~ two-photon excitation of molecular iodine: the E state vindicated. Williamson, Ashley D. (Health Saf. Res. Div., Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 60(3), 451-4 (Eng). The $E \leftrightarrow B$ system of I was examd. by a stepwise 2-photon process in which I mols. are excited 1st to individual vibrational-rotational levels of the B state, then to E state vibrational bands. In contrast to an earlier 2-photon study by M. D. Danyluk and G. W. King (1977), the data support the anal. of the emission spectra given by K. Wieland et al. (1972).

2d. *Chem. Phys.*

Q.A. 1979, 90, N14

1980

У
2

16 Б177. Коэффициенты Франка—Кондона для линий J_2 , возникающих при возбуждении лазерами на Ar^+ , Kr^+ и $He-Ne$. Allegrini M., Alzetta G., Civilini M. Franck—Condon factors for J_2 lines arising from Ar^+ , Kr^+ and $He-Ne$ laser excitation. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 70, № 3, 454—458 (англ.)

(f m n)
M, n

Коэффициенты Франка—Кондона для переходов $B \rightarrow X$ в молекуле J_2 определяются из спектров флуоресценции молекулы J_2 , возбуждаемой излучением лазеров на Ar^+ , Kr^+ и $He-Ne$. Для вычислений коэф. Франка—Кондона использовалась спец. программа для ЭВМ, строящая потенциальную ф-цию, и решающая ур-ние Шредингера. В вычислениях использовались наиболее точные молек. константы, полученные в последнее время. Отмечается хорошее совпадение теоретически вычисл. интенсивностей различных линий с эксперим. значениями.

В. И. Захарьин

X 1980 № 16

1980

y₂

92: 206513c Franck-Condon factors for the atomic iodine lines arising from argon(+1), krypton-neon laser excitation. Allegrini, M. (Lab. Fis. At. e Mol., CNR, 56100 Pisa, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 70(3), 454-8 (Eng). Franck-Condon factors are reported for the I₂ B → X transitions excited by several lines of Ar⁺, Kr⁺ and He-Ne lasers and obsd. in fluorescence. The most recent and accurate mol. consts. of P. Luc were used in the calcn.

factor
f-k.

CA 1980 92 x24

72

Оттиск 10951

1980

М. П.

7 Д540. Нумерация колебательных уровней и улучшенные константы состояния $A^3\Pi_{1u}$ молекулы J_2 . The vibrational numbering and improved constants of the $A^3\Pi_{1u}$ state of J_2 . Ashby R. A., Johnson C. W. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 1, 41—48 (англ.)

Система полос $A-X$ молекулы J_2 сфотографирована в поглощении с разрешением $0,5 \text{ см}^{-1}$. Определены положения линий в прогрессиях, начинающихся с уровней $v''=6\div 18$. Предложена новая нумерация колебательных уровней состояния A . Уточнены значения спектроскопич. постоянных этого состояния: $T_e=1096\pm 1\pm 3 \text{ см}^{-1}$, $D_e=1641\pm 3 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e=92,5\pm 0,5 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e=1,20\pm 0,08 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e y_e=-0,062\pm 0,006 \text{ см}^{-1}$. Полученные значения постоянных согласуются с заключением работы (Tellinghuisen «J. Chem. Phys. Lett.», 1977, 49, 485) о порядке расположения состояний A и A' .

В. А. Е.

ф. 1981. № 7

У
2

12 Б177. Колебательная нумерация и улучшенные постоянные состояния $A^3\Pi_{1u}$ J_2 . Ashby R. A., Johnson C. W: The Vibrational ~~Numbering~~ and Improved Constants of the $A^3\Pi_{1u}$ State of J_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 1, 41—48 (англ.)

1980

М. П.

Измерен спектр поглощения паров иода ($T \leq 320^\circ$) в области 8000—13 400 Å. Использовалась нагреваемая оптич. ячейка однократного прохождения с длиной поглощающего слоя 1 м ($P_{J_2} = 0,25-7$ атм). Наблюдались полосы $\nu' = 0-13 - \nu'' = 6-18$ перехода $A^3\Pi_{1u} - X^1\Sigma_g^+$. Предложена новая колебательная нумерация полос. Приведены таблица Деландера для кантов полос и эксперим. зависимость $\Delta G_{v+1/2}$ от v . Для состояния $A^3\Pi_{1u}$ J_2 получен след. улучшенный набор молек. постоянных (в см^{-1}): $T_e = 10\,906$, $T_0 = 10\,845$, $D_e = 1641$, $[D_0 = 1595$, $\omega_e = 92,5$, $\omega_e X_e = 1,20$, $\omega_e J_e = -0,062$, $\omega_e Z_e = 2,7 \times 10^{-3}$, $\omega_e t_e = -3,2 \times 10^{-5}$.
В. М. Ковба

Омшк 10951



Х. 1981. N12

y
2

1977: 12246 10951

1980

"94: 9524x The vibrational numbering and improved constants of the $A^3\Pi_{1u}$ state of diatomic iodine. Ashby, R. A.; Johnson, C. W. (Chem. Dep., New South Wales Inst. Technol., Broadway, 2007 Australia). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 84(1), 41-8 (Eng). The A-X system of I_2 was recorded in absorption, under conditions of medium resolu., at 8000-13,400 Å. Bandheads in progressions based on $v' = 6$ through 18 were measured and assigned. A new vibrational numbering for the A state is proposed, which leads to more reliable values for the important consts. of the A state: $T_e = 10.906 \pm 3 \text{ cm}^{-1}$, $D_e = 16.41 \pm 3 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e = 92.5 \pm 0.5 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e x_e = 1.20 \pm 0.08 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e y_e = -0.062 \pm 0.006 \text{ cm}^{-1}$.

M.N.

P.A. 1981, 94, N2

OTTAWA 9528

1980

J₂

92: 101831b High-resolution and sub-Doppler Fourier transform spectroscopy: iodine molecular fluorescence excited by the 514.5 and 501.7 nm argon (Ar⁺) laser lines. Bacía, R.; Churassy, S.; Field, R. W.; Koffend, J. B.; Verges, J. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., 69621 Villeurbanne, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(1), 31-42 (Eng). Fluorescence from the $I_2 BO_u^+$ state, excited by the 514.5 and 501.7 nm continuous wave Ar⁺ laser lines, was recorded by using a high resolu. Fourier transform spectrometer. The spectra were obtained with both multimode (6 GHz) and single mode (≤ 100 MHz) Ar⁺ lasers, the latter spectra exhibiting reduced Doppler width. $BO_u^+ X^1\Sigma_g^+$ fluorescence was recorded at 1 mK precision for $v'' = 10-100$, cQq'' quadrupole consts. were obtained ($\pm 5\%$) from measured linewidths, broadening of quasibound $X^1\Sigma_g^+$ rotational levels above the rotationless $X^1\Sigma_g^+$ dissociation limit was obsd., and perturbations of $X^1\Sigma_g^+, v'' \geq 92$ by 2 previously unobsd. long range I_2 mol. states were detected. These 2 states, O_x^+ and I_x , which dissociate into 2 $^2P_{3/2}$ I atoms, were also obsd. directly in the fluorescence spectrum.



м.р.
чекст
г.у.с.с.

C.A. 1980.92 NR

сттсс 9528

1980

Уа

16 Б1404. Спектроскопия высокого разрешения и суб-доплеровская спектроскопия с преобразованием Фурье: флуоресценция молекулярного йода, возбуждаемая линиями Ar^+ 514,5 и 501,7 нм лазера на Ar^+ . Bacis R., Churassy S., Field R. W., Koffend J. B., Vergès J. High resolution and sub-Doppler Fourier transform spectroscopy: Iodine molecular fluorescence excited by the 514,5 and 501,7 nm Ar^+ laser lines «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 1, 34—42 (англ.)

спектр
дифракции

С помощью Фурье-спектрометра высокого разрешения исследована флуоресценция из состояния J_2BO_u^+ , возбуждаемая линиями Ar^+ -лазера при 514,5 и 501,7 нм. Спектры получены с использованием мультимодовых (6 ГГц) и одномодовых (<100 МГц) Ar^+ -лазеров, в последнем случае для спектров имеет место уменьшение доплеровского уширения. Флуоресценция BO_u^+ —

Х 1980 №16

— $X'\Sigma_g^+$ измерена с точностью 10^{-3} см $^{-1}$ (29,5 МГц) для $v''=10-100$, из измеренных ширины линий получены квадрупольные константы eQq'' с точностью $\pm 5\%$. Наблюдалось уширение квазисвязанных вращательных уровней $X'\Sigma_g^+$ выше невращательного предела диссоциации $X'\Sigma_g^+$. Определены возмущения $X'\Sigma^+$, $v'' \geq 92$, вызванные двумя ранее неизвестными состояниями $J_2, 0_g^+$ и 1_g , наблюдаемыми непосредственно в спектрах флуоресценции, к-рые диссоциируют на 2 атома J($^2J_{3/2}$). Спектроскопия высокого разрешения с Фурье-преобразованием в сочетании с лазерным возбуждением имеет ряд преимуществ по сравнению с обычными спектрометрами, особенно в близкой ИК-области, и позволяет получать информацию о тонкой структуре полос, связанных с колебательной ($v''=10-103$) и вращательной ($J''=0-110$) релаксацией.

А. Шведчиков

1980

J₂

4 Д249. Измерения eQq в X^- , $1g^-$, O_g^{+-} и B -состояния J_2 : тест для электронных молекулярных собственных функций. eQq measurement in the X , $1g$, O_g^{+-} and B state of J_2 : A test of the electronic molecular eigenfunctions. Bacis R., Broyer M., Churassy S., Vergès J., Vigué J. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2641—2650 (англ.)

Спектр
флуоресценции

С использованием фурье-спектрометра высокого разрешения исследована индуцированная лазерным излучением флуоресценция молекул J_2 . Из анализа спектров определены константы электрического квадрупольного взаимодействия с ядром eQq для состояний $X-Q_g^+$, $v=26-60$, $73-107$; $1g$, $v=0, 1, 3$ и Q_g^+ , $v=1, 2$. Проведена оценка изменения величин eQq как ф-ций фиксированного межъядерного расстояния R . Полученные результаты в совокупности с литературными данными сопоставлены с теоретич. значениями eQq для различных термов в области малых R (на основе приближения МО ЛКАО) и в области больших R (при использовании базиса волн. ф-ций разделенных атомов). Имеется хорошее соответствие. А. Ф. Шестаков

ф. 1981 № 4

1980

J₂

2 9 Б172. Измерения eQq в состояниях X , $1g$, O_g^+ и B молекулы J_2 : анализ молекулярных электронных собственных функций. Bacis R., Broyer M., Chugassy S., Vergès J., Vigué J. eQq measurements in the X , $1g$, O_g^+ and B state of J_2 : a test of the electronic molecular eigenfunctions. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 6, 2641—2650 (англ.)

М.И.

Экспериментально изучены спектры лазерной флуоресценции высокого разрешения молекулы J_2 . По полученным данным определены константы квадрупольного электр. взаимодействия eQq для электронных состояний X , $1g$ и O_g^+ , и по лит. данным — для состояния B . Для всех состояний найдена зависимость параметра eQq от колебательного уровня, причем для основного состояния X значения параметров получены почти для всех колебательных состояний вплоть до диссоциац. предела. Эксперим. данные сравнены с ре-

X. 1981 N 9

результатом теор. расчета. При этом для низших колебательных состояний использованы электронные волновые ф-ции, выраженные через МО в форме ЛКАО. Для сильно возбужденных колебательных состояний электронная ф-ция представлена в виде произведения атомных функций. Показано, что эксперим. данные по eQq при колебательном возбуждении хорошо согласуются с теор. результатами.

Б. И. Жилинский

I_2

1980

Chem

93: 194738k The eQq measurements in the X, $1g$, 0_g^+ and B state of diatomic iodine: a test of the electronic molecular eigenfunctions. Bacis, R.; Broyer, M.; Churassy, S.; Verges, J.; Vigue, J. (Lab. Spectrometrie Ionique Mol., Univ. Claude Bernard Lyon I 43, 69622 Villeurbanne, Fr.). J. Chem. Phys. 1980, 73(6), 2641-50 (Eng). The laser fluorescence spectra of I_2 recorded with a high resolu. Fourier Transform Spectrometer (LIF-FTS) enables measuring the hyperfine parameters eQq in 3 states of I_2 ; the X state and the recently discovered 1_g and 0_g^+ states. For each state, eQq was obtained in various vibrational levels and esp. in the X-state, the complete variation curve of eQq was obtained as a function of the vibrational energy. All these results and some other ones

C. A. 1980. 93 1x20

available in the literature were interpreted by using LCAO eigenfunctions for short internuclear distance and sepd. atom basis set near the dissocn. limit. The agreement with the exptl. results is very good and it is possible to observe the transition between the 2 basis sets.

J_2

От. 15245

1980

3 Д848. Исследование лазерной флуоресценции молекулы J_2 . Laser fluorescence studies of J_2 molecule. Balasubramanian T. K., Bhale G. L., Dixit M. N., Nagasimham N. A. «Indian J. Phys.», 1980, В54, № 4—5, 263—269 (англ.)

М.П;

Исследованы спектры флуоресценции паров J_2 (система В—Х) при возбуждении излучением: 5145 Å Ag^+ -лазера, 6328 Å He—Ne-лазера и 5957 Å лазера на красителе. Отмечено, что полученные спектры находятся в согласии с данными более ранних работ (Sakurai J. I et al. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, 1615, Harnes G. R. et al. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 39, 506). Результаты анализа спектров будут опубликованы отдельно.

Ю. В. Чижов

сп. 1983, 18, №3

92

(Ommuck 15245)

1980

лазерная
флуорес.

$B \rightarrow X$

196: 76937p Laser fluorescence studies of the molecular iodine molecule. Balasubramanian, T. K.; Bhale, G. L.; Dixit, M. N.; Narasimham, N. A. (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400085 India). *Indian J. Phys.*, [Part] B 1980, 54B(4-5), 263-9 (Eng). The fluorescence spectrum of I_2 vapor (B-X system) excited by the 5145-Å line of the Ar^+ laser, and the 6328-Å line of the He-Ne laser was recorded on Spex Ramalog. The observations are in conformity with the observations of earlier workers. In addn. the fluorescence in I_2 was excited by employing several wavelengths isolated from the Spectra-Physics 375, Ar^+ -pumped dye laser.

C.A. 1982, 96, n 10.

I_2

1980

Blazy J.A., et al

спектр.
испуск.
попереч.
р-луч

J. Chem. Phys., 1980, 72,
n4, 2439-44.



(see $\text{I}_2\text{-He}$) III

У₂

1980

12 Д344. Сверхтонкие спектры иода 129 при 612 нм.
Hyperfine spectra in iodine-129 at 612 nm. Cid-
dor P. E., Brown N. «Opt. Commun.», 1980, 34,
№ 1, 53—56 (англ.)

сверхтонкая
структура

Методом лазерной спектроскопии изучен спектр сверхтонкой структуры линии $\lambda=612$ нм для смеси 83% $^{129}\text{J}_2$ и 17% $^{127}\text{J}_2$. Набор из 28 интенсивных сверхтонких компонент $^{129}\text{J}_2$, отвечающих ядерному электрическому квадрупольному расщеплению 1940 МГц, полностью идентифицирован. Этот набор переналагается с известным спектром перехода $R(47) 9-2$ в $^{127}\text{J}_2$, что позволило использовать общую шкалу частот. Кроме того, как в $^{127}\text{J}_2$, так и в $^{129}\text{J}_2$ обнаружены переходы другого типа, причем в последнем частично отождествлен ряд компонентов. Описано устр-во использованных лазеров, а также методика измерения частот. А. Н. Рябцев

ф. 1980 N 12

72

Commence 11204 1980.

DePristo A. E., et al.

kezyoreg.

Kacibar, cocoro. ru.

J. Chem. Phys., 1980,
73 (10), 4798-4806.

The selective preparation of
excited vibrational states
using the stimulated resonance
Raman effect.

1980

J₂

✓ 93: 140332c Hyperfine structure and isotope shift of the 1.3 μm transition of iodine-129. Engleman, R., Jr.; Keller, R. A.; Palmer, B. A. (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, CA 87545 USA). *Appl. Opt.* 1980, 19(16), 2767-70 (Eng). High resolu. Fourier transform spectra of the 1.3- μm emission from ^{127}I and ^{129}I electrodeless discharge lamps are presents and analyzed. The hyperfine splitting consts. of ^{129}I are: $A = 18.35 \pm 0.01$ mK and $B = 26.55 \pm 0.07$ mK for the $J = 3/2$ ground state and $A = 146.32 \pm 0.02$ mK for the $J = 1/2$ excited state. The validity of the theor. intensity and isotope relationship is confirmed. The isotope shift between ^{129}I and ^{127}I for the 1.3- μm transition was measured to be < 1 mK.

M.N.

C.A. 1980, 93, N14

1980

$\text{I}_2(\text{u.n.})$

6330-XI

Luc P.

J. Mol. Spectrosc. 1980, 80 (1), 41-55

Molecular constants and Dun-
ham expansion parameters des-
cribing the B-  X system of ...

C.A. 1980, 92, N14, 119034d

10



У₂

Оттиск 10779

1980

5Д414. Исследование спектра поглощения йода методом фурье-спектроскопии в области 12 600—14 000 cm^{-1} . Study of the iodine absorption spectrum by means of Fouries spectroscopy in the region 12 600—14 000 cm^{-1} . Gerstenkorn S., Luc P., Sinzel-
le J. «J. phys.» (France), 1980, 41, № 12, 1419—1430 (англ.; рез. франц.)

Мин.

Получены спектры поглощения паров йода при давл. ~5 мм рт. ст. в ближней ИК-области с разрешением 0,02 cm^{-1} . Наблюдено 7500 линий, частоты которых измерены с использованием линии лазера He—Ne, стабилизированной по лэмбовскому провалу, с точностью ~0,003 cm^{-1} . Выполнено отнесение 1564 линий к колебательно-вращательным переходам электронной полосы $V\ddot{P}_u \leftarrow X^1\Sigma_g$ с колебательных уровней 0,1, 2 на уров-

Ф. 1984 N 5

ни $\nu' = 10 \div 14$. Анализ вращательной структуры выполнен с учетом членов четвертой степени по $J(J+1)$ в возбужденном электронном состоянии и третьей степени в основном. Определена частота электронного перехода, энергии колебательных уровней и константы B , D , H и L молекул J_2 в изученных состояниях. Вычислены коэф. Данхэма. Центробежные константы рассчитаны также из потенц. ф-ций. По интенсивностям полос определены факторы Франка — Кондона.
М. В. Т.

Библ. 34.



У₂

ОТМЕСК 10779 1980

8 B182. Изучение спектра поглощения иода в области $12\,600\text{--}14\,000\text{ см}^{-1}$ методом фурье-спектроскопии. Gerstenkorn S., Luc P., Sinzelle J. Study of the iodine absorption spectrum by means of Fourier spectroscopy in the region $12\,600\text{--}14\,000\text{ см}^{-1}$. «J. phys.» (France), 1980, 41, № 12, 1419—1430 (англ.; рез. франц.)

М.П.

С помощью фурье-спектрометра, с высоким разрешением измерены спектры поглощения паров иода в области $12\,600\text{--}14\,000\text{ см}^{-1}$ [переход $V^3\Pi(O_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$]. Использовалась нагреваемая оптич. ячейка с длиной поглощающего слоя 2 м. Давление паров иода задавалось т-рой двух стростков, размещенных на концах ячейки ($T_{\text{яч}}=250^\circ$, $T_{\text{отр}}=25$ и 60°). При т-ре 250° заселенность возбужденных колебательных уровней ($v'' \leq 14$) основного электронного состояния J_2 сказывается достаточной для эксперим. наблюдения соотв-щих горячих полос в электронном спектре поглощения. Измерена

X.1981v8

и проанализирована вращательная структура 12 новых
 полос прогрессий $v' = 0-2-v'' = 10-14$. Уточнены значе-
 ния молек. постоянных $G(v)$, $B(v)$ и $D(v)$ J_2 в состоя-
 ниях $X^1\Sigma^+$ ($10 \leq v'' \leq 14$) и $B^3\Pi(O_u^+)$ ($v' = 0-2$) ($T_\infty =$
 $= 15724,586 \pm 0,003$ см $^{-1}$). Рассчитаны и приведены зна-
 чения коэф. Дэнхемма для обоих электронных состояний,
 факторы Франка—Кондона и R -центроиды для перехо-
 да $B(v' = 0-2) \rightarrow X(v' = 8-15)$. По методу Альбриттона
 вычислены постоянные вращательного искажения D , H
 и L $J_2(B, X)$. Отмечается хорошее согласие между
 эксперим. и рассчитанными значениями $D(v')$ и $D(v'')$.
 В. М. Ковба

7
2

Commuc 10779

1980

M.N.

94: 9502p Study of the iodine absorption spectrum by means of Fourier spectroscopy in the region 12,600-14,000 cm^{-1} . Gerstenkorn, S.; Luc, P.; Sinzelle, J. (Lab. Aime Cotton, Cent. Natl. Rech. Sci., 91405 Orsay, Fr.). *J. Phys. (Orsay, Fr.)* 1980, 41(12), 1419-30 (Eng). Twelve new absorption bands of the I mol. spectrum belonging to the $(0, v'')$, $(1, v'')$ and $(2, v'')$ progressions, where $10 \leq v'' \leq 14$, were analyzed. The data obtained by Fourier spectroscopy measurements between 12,600 and 14,000 cm^{-1} , permit both the extension of the precise detn. of the mol. consts. $G(v'')$, $B(v'')$ and $D(v'')$ of the ground state $X(^1\Sigma_g^+)$ up to $v'' = 14$ and studies of the low-lying levels of the excited state $B(^3\Pi_{ou}^+)$; in particular the sepn. between the 2 states X and B is $T_{0,0} = 15,724.586 \pm 0.003 \text{ cm}^{-1}$. Rotational distortion D , H and L consts. for the B and X states were computed from Rydberg-Klein-Rees potentials. Good agreement between exptl. and calcd. $D(v'')$ and $D(v')$ values was found. Franck-Condon Factors were calcd. and the computed relative intensities are consistent with the obsd. ones.

P.A. 1981. 94, N2

у
J2 . [ommueu 10315] 1980
Gropeu O. et al

кв. лех.
рачет J. Chem. Phys. 1980, 73(1),
402-6

CuCl₂ ; III

1980

У₂

1 Д416. Пересмотр интерпретации эмиссионного спектра J_2 в аргоне. Reinterpretation of the emission spectrum of I_2 in argon. Guy Anita L., Viswanathan K. S., Sur Abha, Tellinghuisen Joel. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 73, № 3, 582—588 (англ.)

М.П.

В области длин волн 2000—5500 Å исследован эмиссионный спектр паров J_2 . В качестве буферного газа использован Аг. Исследована зависимость относит. интенсивностей линий спектра от давления и т-ры газовой смеси. Проведена идентификация эмиссионных полос и установлено, что в спектре проявились по крайней мере 12 (из предсказанных в области 40 000—54 000 см^{-1} восемнадцати) состояний типа ионной пары. Не обнаружено никаких указаний на существование состояний, лежащих ниже состояния $D'(2g)$, что противоречит результатам выполненных недавно многофотонных исследований. Библ. 29. А. В. Н.

ф. 1981 N 1

1980

✓ 93: 140375w Reinterpretation of the emission spectrum of diatomic iodine in argon. Guy, Anita L.; Viswanathan, K. S.; Sur, Abha; Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 73(3), 582-8 (Eng). The emission spectrum of I_2 in Ar was examd. as a function of pressure and temp. Evidence is found for at least 12 of the ion-pair states, of which $D'(2g)$ is the lowest.

~~93: 140376x Study on the spectroscopic and fluorescence characteristics of neodymium-doped phosphate glasses. Hu, Her Pang (Shanghai Inst. Opt. Fine Mech., Acad. Sin., Shanghai, Peop. R. China). *Chi Kuang* 1979, 6(9), 23-8 (Ch). Two series of Nd-doped glasses, $Li_2O \cdot BaO \cdot xP_2O_5$ and $45R_2O \cdot 0.55P_2O_5$, where R is an alkali or alk. earth element, were prepd., and their absorption and fluorescence spectra were measured. Based on the Judd-Ofelt theor. model, the effects of various oxides on the fluorescence properties of Nd doped phosphate glasses were studied. The spontaneous radiative transition probability of Nd^{3+} increases with the decreasing field strength of cation.~~

спектр
в матрице
Ar

C.A. 1980, 93, N14

J_2

ВФ-Х/ - 6335

1980

12 Д190. Повторный расчет сверхтонких констант связи $B-X$ -переходов в молекуле J_2 . Re-evaluation of the hyperfine coupling constants for $B-X$ transitions in J_2 . Hackel R. P., Hackel L. A., Ezekiel S. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1980, 21, № 4, 1342—1343 (англ.)

М. П.

Проведены прецизионные измерения сверхтонкого спектра $B-X$ (43,0) R (15) в молекуле $^{127}J_2$. Методом наименьших квадратов выполнена подгонка полученных данных для R (15)- и P (13)-переходов к гамильтониану, в котором опущены члены, ответственные за магн. октупольную связь и ядерные электрические квадрупольные взаимодействия. Сделан вывод, что предыдущая подгонка с ненулевой октупольной связью, по-видимому, ошибочна.

А. Воронин

Ф. 1980 N 12

Y_2

B9-XI-6335

1980

$B \rightarrow X$

21. C. C. C.

93: 16102r~ Re-evaluation of the hyperfine coupling constants for B-X transitions in molecular iodine. Hackel, R. P.; Hackel, L. A.; Ezekiel, S. (Res. Lab. Electron., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, MA 02139 USA). *Phys. Rev. A* 1980, 21(4), 1342-3 (Eng). High-precision measurements of the I_2 B-X(43,0) R(15) hyperfine spectrum are reported. The R(15) and previously measured (43,0) P(13) spectra were fitted to 2.6 and 5.4 kHz, resp. A previous fit of the P(13) which resulted in a nonzero value for the magnetic octupole coupling const. was apparently in error. Extension of such measurements to other rotational vibrational levels in I_2 using an optically pumped laser and 2-step excitation is discussed.

CA 1980 23 v2

4
2

спектр
флуоресц.

х. 1981. N 5

1980
5 Б1198. Возбуждаемая лазером флуоресценция J_2 .
Hemmati H., Collins G. J. Laser excited fluorescence of J_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 3, 488—493 (англ.)

Изучена флуоресценция (Фл) паров J_2 (т-ра 275 и 300 К, давл. $\sim 0,03$ мм) при изменении давл. Аг от 0 до 900 мм под действием несфокусированного излучения ($\sim 193,3$ нм) лазера на AgF (спектральная ширина излучения 95 см^{-1} , длительность импульса 20 нс, энергия $\simeq 20$ мДж, частота 2 Гц), к-рую регистрировали в направлении, перпендикулярном лучу лазера, в интервале длин волн 200—540 нм. Спектр Фл чистого J_2 в области 200—330 нм состоит из многих перекрывающихся переходов между колебат. уровнями состояний $D^1\Sigma_u^+$ и $X^1\Sigma_g^+$. При 206,2 нм отмечается излучение атомарного йода [$5p^5 (^2P_{1/2}^0)$, $5p^4 6s (^2P_{3/2}^0)$], к-рый образуется при диссоциативной электрон-ионной рекомбинации. В области 330—480 нм наблюдается группа диффузных полос, предположительно обусловленных переходами в состояния $^3\Sigma_{0+g}$, $^3\Sigma_{g(0+)}^-$, $E^3\Pi_{0+g}$, а также $2\Pi_{2g} \rightarrow ^3\Pi_{2u}$ -переходом (полоса при 340 нм). С рос-

отмеч 10486a

том давл. Аг вероятность перехода $D \rightarrow X$ уменьшается, а полосы, обусловленные переходами $F \rightarrow X$, $D' \rightarrow A'$, $E \rightarrow B$, становятся основными, т. к. состояния $J_2 D'^3\Pi_{2g}$, $E^3\Pi_{0+g}$ и $F^1\Sigma_u^+$ заселяются при столкновениях J_2 с Аг из лазерно-возбуждаемого состояния $D^1\Sigma_u^+$.

Отмечается, что полосы при длинах волн 270, 343, 430 и 505 нм соотв. обусловлены переходами $F \rightarrow X$, $D' \rightarrow A'$, $E \rightarrow B$ и $D' (^3\Pi_{2g}) \rightarrow (^3\Delta_{2u})$. Предполагается, что излучение в области 271,2—278,5 нм связано с переходами в X - и B -состояния, а широкая полоса в обл. 351—390 нм обусловлена переходом из состояния, лежащего вблизи $E^3\Pi_{0+g}$, на отталкивательный уровень с образованием атомов йода $J (^2P_{3/2})$. В области 453—

477 нм появляются полосы (при определенном давл. Аг сравнимые по интенсивности с полосами $F \rightarrow X$ и $E \rightarrow B$), интенсивность к-рых уменьшается при увеличении давл. Аг от 100 мм до 1 атм также как и интенсивность полосы $E \rightarrow B$. Считается, что флуоресценция J_2 в обл. 480—515 нм обусловлена переходом $1432 J_2 ^3\Pi_{2g} \rightarrow 2332 ^3\Delta_{2u}$.

Ю. И. Дорофеев

У₂

Оттиск 10486а

1980

3 Д823. Возбуждаемая лазером флуоресценция J₂.
Laser excited fluorescence of J₂. Hemmati H.,
Collins G. J. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 3,
488—493 (англ.)

Возбуждаемый ArF-лазером (193 нм) спектр флуоресценции молекул J₂ исследован в области 200—520 нм при различных давлениях буферного газа (Ar, CF₄, SF₆, N₂, Kr, Ne). Приведена таблица и предложена интерпретация наблюдаемых в спектре электронных переходов. Обнаружена одна новая полоса испускания молекулы J₂. Библ. 28. В. С. Иванов

E_i; D_i

Ф. 198/IV 3

I₂

ommuca 10486a)

1980

спектр
лазерной
флуорес.

93: 247717m Laser-excited fluorescence of diatomic iodine. Hemmati, H.; Collins, G. J. (Dep. Phys., Colorado State Univ., Fort Collins, CO 80523 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 75(3), 488-93 (Eng). The fluorescence spectrum of I₂ was investigated from 200 to 520 nm in the presence and absence of buffer gases following excitation of I₂ with 193-nm photons. The pressure dependence of the fluorescence and tentative transition assignments for one new and several less well-known I₂ emission bands are discussed.

C. A. 1980. 93 N26

оттиса 10220

1980

У₂

2 Д546. Исследование энергетических уровней молекулы $^{129}\text{J}_2$ около диссоциационного предела состояний В методом двухфотонной спектроскопии. Energy levels of iodine-129 near the B state dissociation limit from two-photon spectroscopy. King G. W., Littlewood I. M., Robins J. R., Wijeratne N. T. «Chem. Phys.», 1980, 50, № 3, 291—299 (англ.)

М.М.

Методом спектроскопии последовательного двухфотонного поглощения исследована вращательная структура перехода В—Х-молекулы $^{129}\text{J}_2$ в спектральной области вплоть до частот, отстоящих на 2 см^{-1} от предела диссоциации состояния J_2 (В). Определены колебательные и вращательные постоянные для уровней $v'=71-79$ этого состояния. Показано, что ур-ния ЛеРоу для дальнедействующих потенциалов в масс-редуцированной форме позволяют скомбинировать спектроскопич. постоянные молекул $^{129}\text{J}_2$ и $^{127}\text{J}_2$ и уточнить дальнедействующие константы состояния В. Приведена потенц. кривая РКР для $\text{J}_2(\text{В})$ в области больших значений v' . Библ. 16.

В. С. Иванов

9.1981.12

У
2

1980

16 Б1061. Исследование столкновительной релаксации высоковозбужденных колебательных уровней J_2 в состоянии $X^1\Sigma_g^+$, используя оптически накачиваемый лазер на J_2 . Koffend J., Brooke, Wodarczyk F. J., Bacis R., Field R. W. Collisional relaxation of highly excited vibrational levels of the $J_2X^1\Sigma_g^+$ state using an J_2 optically pumped laser. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 1, 478—483 (англ.)

Метод дает возможность измерять скорости изменения заселенностей индивидуальных колебательно-вращательных уровней нефлуоресцирующих состояний. Возможности метода демонстрируются на примере использования лазера на Ag^+ ($\lambda=514,5$ нм) для накачки J_2 . Скорости столкновительной дезактивации высоковозбужденных уровней молекулы J_2 в состоянии $X^1\Sigma_g^+$ определялись с помощью простой кинетич. модели, к-рая описывает отношение интенсивностей флуоресцентного сигнала из среды оптически накачиваемого лазера при наличии и при отсутствии J_2 .

В. И. Захарьин

столкнов.
релаксация

20 1980 N16

I₂

1980

столкнов.
релаксация.

10 Д746. Исследование столкновительной релаксации высоковозбужденных колебательных уровней $J_2(X^1\Sigma_g^+)$ с помощью J_2 лазера с оптической накачкой. Collisional relaxation of highly excited vibrational levels of the $I_2X^1\Sigma_g^+$ state using an I_2 optically pumped laser. Koffend Brooke, Wodarczyk F. J., Bacis R., Field R. W. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 1, 478—483 (англ.)

Предложен новый метод изучения процессов переноса энергии между отдельными колебательно-вращательными уровнями нефлуоресцирующих состояний молекул.

Исследована релаксация высоковозбужденных колебательных уровней основного состояния молекул $J_2(X^1\Sigma_g^+)$. Определены константы скорости релаксации отдельных уровней при различных давлениях паров J_2 . Библ. 20. С. Л.

фр 1980 №10

72.

ammuck 10820

1980.

Kenny J. E., et al.

спектр
возбуждения

J. Chem. Phys., 1980,

73 (8), 3607 - 16.

У
2

13 B166. Теория отклонений спектра двухатомных молекул вблизи порога диссоциации спектра. Le Roy Robert J. Theory of deviations from the limiting near-dissociation behavior of diatomic molecules. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 12, 6003—6012 (англ.)

1980

колебательный
вращательный
спектр

Исследуется природа отклонений от предельного поведения колебательно-вращательного спектра двухатомной молекулы вблизи порога диссоциации, определяемого ведущим членом асимптотич. разложения взаимодействия по обратным степеням межъядерного расстояния r в окрестности дальней точки поворота. Показано, что такие отклонения могут быть приписаны влиянию старших членов асимптотич. ряда для дальнего взаимодействия. Отмечается, что экспериментально определенное положение колебательных уровней вблизи порога диссоциации характеризуется предельным поведением, даже если ведущий член разложения в дальней точке поворота заметно отличается от значения потенциальной функции в этой точке. Наоборот, вращательная постоянная B_v весьма чувствительна к

☑

⑦ общ. 28 л. (вкл.)

кон. в.р.

2.1981. № 5

членам разложения старших степеней, и отклонения от предельного поведения B_v могут использоваться для определения соотв-щих коэф. разложения. Теория иллюстрируется примером простых модельных потенциалов и на материале эксперим. спектроскопич. данных для $J_2(B^3\Pi_0^+)$.

А. И. Маергойз



72

1980

Le Roy R. J.

J. Chem. Phys 1980,
73, 6003.

Theory of deviations from the
limiting near-dissociation
behavior of  diatomic molecules.

notes
Typlus

J_2

ommueu 9631

1980

92: 119034d Molecular constants and Dunham expansion parameters describing the B-X system of the iodine molecule. Luc, P. (Lab. Aime Cotton, CNRS II, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 80(1), 41-55 (Eng). New mol. consts. and Dunham expansion parameters are given for the B-X system of I. These results cover the bands with $0 \leq v'' \leq 9$ and $1 \leq v' \leq 62$. The polynomial expansion parameters reproduce the wavenumbers of 14,000 assigned transitions belonging to 139 analyzed bands, with std. deviations of 0.001, 0.0017, and 0.004 cm resp., for levels involving max. J values of 50, 100, and 150.

(u,n)

C. A. 1980. 92 N 14

У
2

Оттиски 9631 1980

19 Б161. Молекулярные постоянные и параметры разложения Дэнхема описывающие систему $B-X$ молекулы иода. Luc P. Molecular constants and dunham expansion parameters describing the $B-X$ system of the iodine molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 1, 41—55 (англ.)

М. И.

Излагаются результаты анализа эксперим. данных полученных методом фурье-спектроскопии по 14 000 индив. электронно-колебательно-вращательным переходам в системе $B^3\Pi(O_u^+) - X^1\Sigma_g^+$ (вращательная структура 139 полос). Приведены значения молекулярных постоянных иода $E_{0v''}$, $B_{v''}$, $D_{v''}$ для состояния $X^1\Sigma_g^+$ ($v''=0-9$) и $v_{0v'}$, $B_{v'}$, $D_{v'}$, $H_{v'}$ для состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ ($v'=1-62$). Приводятся также значения 60 параметров полиномиального разложения Дэнхема для постоянных $G_{v'}$, $B_{v'}$, $D_{v'}$, $H_{v'}$ и $G_{v''}$, $B_{v''}$, $D_{v''}$. В. М. Ковба

Х. 1980 № 19

У₂

10 Д162. Молекулярные постоянные и параметры разложения Дэнхэма, описывающие систему B—X молекулы йода. Molecular constants and Dunham expansion parameters describing the B—X-system of the iodine molecule. L u c P: «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 1, 41—55 (англ.)

1980

М.И.

С помощью фурье-спектроскопии выполнен анализ вращательной структуры спектра поглощения молекулы йода. В областях $14\,800\text{--}15\,750\text{ см}^{-1}$, $15\,600\text{--}17\,600\text{ см}^{-1}$ и $17\,500\text{--}20\,000\text{ см}^{-1}$ зарегистрированы 4730, 18 000 и 24 000 линий. Для определения молекулярных параметров использовано отнесение 14 000 линий 139 полос к значениям колебательных и вращательных квантовых чисел. Для основного состояния $X^1\Sigma_g^+$ определены по 10 значений Bv'' и Dv'' при $0 \leq v'' < 9$, а для возбужденного состояния $B^3\Pi_{0+u}$ найдено по 62 значения постоянных $B'v'$, $D'v'$, $H'v'$ при $1 \leq v' \leq 62$. Молекулярные постоянные разложены в степенные ряды по колебательному квантовому числу. Приводятся численные значения 60 параметров разложений Дэнхэма для обоих электронных состояний. Найденные молекулярные постоянные хорошо согласуются со значениями, полученными другими авторами.

М. А. Ковнер

аттмск 9631

Ф 1980 к10

оттис 9602

1980

J₂

9 Д1207. Высокора разрешенные спектры насыщенного поглощения молекул иода $^{129}\text{J}_2$, $^{129}\text{J}^{127}\text{J}$ и $^{127}\text{J}_2$ при 633 нм. High resolution saturated absorption spectra of iodine molecules $^{129}\text{J}_2$, $^{129}\text{J}^{127}\text{J}$ and $^{127}\text{J}_2$ at 633 nm. Magyar J. A., Brown N. «Metrologia», 1980, 16, № 2, 63—68 (англ.)

Спектр

Описан лазерный спектрометр высокого разрешения с $^3\text{He}^{20}\text{Ne}$ -лазером, предназначенный для измерения спектров насыщенного поглощения иода вблизи 633 нм. Приведена конструкция лазерной системы, особое внимание обращено на новый способ установки резонаторного зеркала. Рассмотрена стабильность и воспроизводимость спектрометра. Измерены спектры линий $^{129}\text{J}_2$, $^{129}\text{J}^{127}\text{J}$ и $^{127}\text{J}_2$. П. Ш.

ФР 1980 №9

Оттиски 10316

1980

у
2

4 БЗЗ. Близкие к хартри-фоковскому пределу расчеты молекулы J_2 и ее положительного и отрицательного ионов. McLean A. D., Gropen O., Huzinaga S. Near Hartree-Fock calculations on J_2 and its positive and negative ions. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 1, 396—401 (англ.)

Кв. мек,
расчет

В нерелятивистском приближении Хартри—Фока выполнены расчеты потенциальных кривых молекулы J_2 (состояние $X^1\Sigma^+$) ее положит. J_2^+ ($^2\Sigma^+$ и $^2\Pi$) и отриц. J_2^- ($^2\Sigma^+$) ионов. Использован расширенный базис слейтеровских ф-ций (вплоть до f-орбиталей), что позволяет оценивать результаты как близкие к хартри-фоковскому пределу. Результаты представлены для межъядерных расстояний от 3,8 до 20 ат. ед. При численном интегрировании колебательного ур-ния определены спектроскопич. постоянные, а также и равновесные расстояния.

а. 1981. № 4

Проведены оценки энергий диссоциации, сродства к электрону, рассчитаны квадрупольные моменты для равновесных геометрий. Вычисл. энергия диссоциации аниона $0,60 \pm 0,05$ эВ отличается от экспериментальной $1,07 \pm 0,1$ эВ. Для сродства к электрону J_2 расхождение меньше ($2,17 \pm 0,1$ эВ вместо эксперим. величины $2,58 \pm 0,1$ эВ). Поскольку при расчетах приведение по симметрии соответствовало точечной группе $C_{\infty v}$ вместо $D_{\infty h}$, оказалось возможным изучить эффект ослабления ограничений по симметрии на волновую ф-цию. Найдено, что для $^2\Pi$ -состояния катиона получаются два близких стабильных хартри-фоковских решения (одно симметрии $C_{\infty v}$, другое — $D_{\infty h}$), причем ниже по энергии расположена потенциальная кривая симметрии $C_{\infty v}$.

А. В. Немухин

ommucl 10316

1980

93: 120737n Near Hartree-Fock calculations on diatomic iodine and its positive and negative ions. McLean, A. D.; Gropen, O.; Huzinaga, S. (Res. Lab., IBM, San Jose, CA 95193 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(1), 396-401 (Eng). Potential curves from single configuration SCF calcs. near the complete basis set limit are reported for ground state $I_2(1\Sigma^+)$, ground state $I_2^-(2\Sigma^+)$, and the lowest $I_2^+(2II)$ and $I_2^+(2\Sigma^+)$ states. Orbitals are expanded in a Slater basis; the Hamiltonian is the usual nonrelativistic one with no spin-orbit and other relativistic effects. The calcs. provide a benchmark for model-potential, multiconfiguration, and relativistic and spin-orbit studies. An exptl. value for disocn. energy (I_2^-) of 1.07 ± 0.1 is derived and compared with the Hartree-Fock computed value of 0.60 ± 0.05 eV. Potential curves are analyzed for spectroscopic consts. The Hartree-Fock electron affinity of I_2 is 2.17 ± 0.1 eV compared with the obsd. 2.58 ± 0.1 eV. The Hartree-Fock quadrupole moment of the I_2 mol. in its ground state is 6.24×10^{-25} esu cm².

y_2
 y_2^-
 y_2^+

M. N.

kb. uclx.
 factor

(+2)



CA 1980 93 N12

У
2

В. И. Барановский

1980

2 Д68. Близкие к хартри-фоковским расчеты молекулы J_2 и ее положительного и отрицательного ионов. Near Hartree-Fock calculations on I_2 and its positive and negative ions. McLean A. D., Gropen O., Hu-

zinaga S. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 1, 396—401 (англ.)

потенс.
кривые,
кв. сек.
расчет

В одноконфигурационном приближении метода ССП с базисом слэтеровских АО, позволяющим получить по энергии почти хартри-фоковский предел, рассчитаны потенциальные кривые основных электронных состояний $J_2(1\Sigma^+)$, $J_2^-(2\Sigma^+)$ и низших электронных состояний $J_2^+(2\Pi)$ и $2\Sigma^+$. Волн. ф-ции выбирались в рамках симметрии группы $C_{\infty v}$ вместо симметрии ядерного остова $D_{\infty h}$. В районе равновесных значений межъядерного расстояния полученные самосогласованные ф-ции соот-

аннотация 10316

ф. 1981. N2

ветствовали симметрии $D_{\infty h}$, но при увеличении меж-
ядерного расстояния они теряли эту симметрию за счет
локализации электронов на атомах. Для иона $J_2^+ (^2\Pi)$
в рамках симметрии $C_{\infty v}$ получено два самосогласован-
ных решения, что отмечается как необычное явление.
Потенц. ф-ции молекулы и ионов аппроксимированы
полиномами, и по методике Данхэма найдены спектро-
скопич. постоянные. Энергия диссоциации J_2^- в хартри-
фовском приближении составила $0,60 \pm 0,05$ эв (экспе-
рим. значение $1,07 \pm 0,1$ эв), сродство к электрону J_2
равно $2,17 \pm 0,1$ (эксперим. значение $2,58 \pm 0,1$ эв). Для
молекулы J_2 рассчитан также квадрупольный момент
($6,24 \times 10^{-24}$ эл. статич. ед. $\times$ см²). А. Дементьев

У₂ Коммуна 9676 1

1980

длектр.
снктр.
помещец.
кривые

McNaught J. J.

J. Chem. Education,
1980, 57 (2), 101-105.

У
2

1057. 104791

1980

4 Д677. Измерения интенсивности и относительной силы полос флуоресценции $J_2(B-X)$. Intensity measurements and relative band strengths of the fluorescent bands of the $(B-X)$ system of J_2 . Murthy N. Sreedhara, Bagare S. P. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1980, 24, № 4, 319—322 (англ.).

Спектр
флуоресц.

Методом фотоаграфич. фотометрии измерены относиг. интегр. интенсивности нескольких колебательных полос в спектре флуоресценции $J_2(B-X)$. С использованием значений коэф. Франка-Кондона и r -центридов из работы (Tellinghuisen J. «JQSRT», 1978, 19, 149) определена зависимость электронного момента перехода от межъядерного расстояния: $R_e(\tilde{r}) = \text{const} (1 - 0,693_0\tilde{r} + 0,120_1\tilde{r}^2)$ в диапазоне $2,76 < \tilde{r} < 281$ Å. Приведена таблица относит. значений силы колебательных полос.

В. С. Иванов

Ф. 1981 N 4

Y₂

Check,
photogenic -
coincidence

C. A. 1981.9

✓ 54: 74602k The photodissociation of diiodomethane: production of electronically excited diatomic iodine. Okabe, H.; Kawasaki, M.; Tanaka, Y. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Standards, Washington, DC 20234 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(12), 6162-6 (Eng). The primary photodissocn. process of CH_2I_2 leading to the formation of electronically excited $\text{I}_2(^3\Pi_{2g})$ was studied. The process occurred with yields $>1\%$ for light $>1320 \pm 10 \text{ \AA}$. The $\text{I}_2(^3\Pi_{2g})$ initially produced by the Kr (1165, 1236 $\text{\AA}$) lines was vibrationally excited up to $v'=35$. The addn. of near atm. Ar or N_2 deactivated vibrational quanta to $v'=0, 1$, and 2 but little electronic quenching was obsd. The quantum yield of $\text{I}_2(^3\Pi_{2g})$ prodn. was 0.006 at 1236 $\text{\AA}$. At 1306 $\text{\AA}$ little vibrational excitation of $\text{I}_2(^3\Pi_{2g})$ was seen. In addn., very weak I_2 emission bands in the 2500-2900 and 4500-4900 $\text{\AA}$ regions were found in CH_2I_2 photodissocn. by the Kr lamp. The absorption cross sections of CH_2I_2 in the 1100 to 1500 $\text{\AA}$ region were measured and compared with the $\text{I}_2(^3\Pi_{2g})$ fluorescence excitation spectrum. The results show that the I_2 emission bands arise mainly from the underlying absorption continua and not from structured features of CH_2I_2 , suggesting that the $\sigma\text{-}\sigma^*$ transitions in the C-I bond were responsible for $\text{I}_2(^3\Pi_{2g})$. The CH_2I_2 dissocn. process involves an energy barrier of $\sim 1 \text{ eV}$, in agreement with other mol. detachment processes. The Kr photosensitized reaction of CH_2I_2 gave rise to the $\text{I}_2(^1\Pi)$ emission in addn. to emissions obsd. in direct photolysis. This state was likely to be $^1\Sigma_u^+$ rather than $^3\Sigma_u^+$.

148

11/13

Emmich

J_2

Спектр

11139

Оттиск

х. 1981. N 13

1980
13 Б1212. Фотодиссоциация CH_2J_2 . Образование электронно-возбужденных молекул J_2 . Okabe H., Kawasaki M., Tanaka Y. The photodissociation of CH_2J_2 : Production of electronically excited J_2 . «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 12, 6162—6166 (англ.)

Спектроскопическими методами исследованы про-

цессы молек. отщепления электронно-возбужденного J_2 при фотодиссоциации (ФД) CH_2J_2 (I) в газовой фазе. Изучены спектры флуоресценции (Фл), возникающие при ФД I монохроматич. светом. резонансных Хе- (1470 А), Кг- (1165, 1236 А) и О-ламп (1306 А), а также проведено сопоставление спектра поглощения I и спектра диссоциативного возбуждения Фл J_2 (наблюдение при 3420 А) в области 1100—1500 А. Наиболее интенсивный спектр Фл обнаружен при ФД I при давл. 0,15 мм в проточных условиях светом Кг-лампы. Он лежит в области 2900—3550 А и содержит наиболее интенсивную полосу при ~3420 А. Этот спектр приписан переходу $J_2(^3\Pi_{2g} \rightarrow ^3\Pi_{2u})$ по аналогии

см. CH_2J_2 ; [17]

с лит. данными. Молекула $J_2(^3\Pi_{2g})$ образуется в перв. процессе ФД I, причем ее колебательное возбуждение достигает уровня $v'=35$. В присутствии 700 мкм Ag или N_2 происходит ее колебательная дезактивация на уровне $v'=0, 1, 2$ при отсутствии тушения электронного возбуждения. Поскольку расстояния между атомами J в молекуле I в основном состоянии и в молекуле $J_2(^3\Pi_{2g})$ по оценкам равны 3,6 и 3,5 Å соотв., т. е. практически одинаковы, сделан вывод, что процесс молек. отщепления $J_2(^3\Pi_{2g})$ сопровождается сильными изменениями конфигурации молекулы I, связанными, напр., с возбуждением деф. кол. — J и симм. вал. кол. C—J. При фотол. изл. I светом 1306 Å колебательное возбуждение $J_2(^3\Pi_{2g})$ мало. По оценкам распределение колебательных заселенностей $J_2(^3\Pi_{2g})$ в присутствии Ag при атмосферном давл. должно быть близко к больцмановскому, т. к. время жизни $J_2(^3\Pi_{2g})$ равно 17 нс, а эффективность дезактивации атомами Ag по лит. данным составляет $\sim 0,1$. Квант. выход Фл $J_2(^3\Pi_{2g})$ при ФД I светом 1236 Å найден равным 0,006. При ФД I светом 1470 Å Фл J_2 отсутствует. Поскольку термохим. порог процесса $I \rightarrow CH_2(X^3B_1) + J_2(^3\Pi_{2g})$ равен $8,43 \pm 0,05$ эВ, что соответствует длине волны 1470 ± 10 Å, тогда как образование $J_2(^3\Pi_{2g})$ при ФД I начинается обнаруживаться лишь при $\lambda < 1320$ Å, сделан вывод, что для образования $J_2(^3\Pi_{2g})$ требуется избыточная энергия 0,96 эВ. Большой энергетич. барьер наблюдался и ранее для процессов молек. отщепления $NH_3 + h\nu \rightarrow NH(^1\Sigma^+) + H_2$, $H_2CO + h\nu \rightarrow H_2 + CO$ и $H_2O + h\nu \rightarrow H_2 + O(^1S)$. Вероятно, эта избыточная энергия требуется для сближения атомов с образованием отщепляемой двухатомной молекулы. В спектре поглощения I в области 1240—1320 Å имеется несколько пиков, которые отсутствуют в спектре возбуждения ФЛ. По аналогии с изученной ранее ФД CH_2Br_2 они приписаны ридберговским переходам с четырех 5p-орбиталей на высшие s-, p- и d-орбитали атома J. Континуум, наложенный на эти пики, может быть приписан электронным переходам с возбуждением в разрыхляющую σ^* -орбиталь хим. связи C—J. В ридберговских переходах происходит возбуждение симм. вал. кол. C—J и деф. кол. J—C—J с образованием электронно-возбужденных молекул $J_2(^3\Pi_{2g})$. С другой стороны, в ридберговских переходах, локализованных на атомах J, могут возбуждаться лишь валентные колебания C—J, приводящие к отщеплению атомов J. При облучении светом Кг-ламп смесей I+Kг наблюдали ФД I, сенсibilизированную Кг. При этом наряду с Фл, наблюдаемой при прямом фотол. I, обнаружена Фл в области 1800—2300 Å, приписанная переходу $J_2(H \rightarrow X)$, причем H-состояние является состоянием $^1\Sigma_u^+$, но не $^3\Sigma_u^+$.

В. Е. Скурат

Оттиск 9521

1980

У
2

19 Б163. Сверхтонкая структура линий оптического поглощения $^{127}\text{J}_2$ и $^{129}\text{J}_2$. Pique J. P., Stoeckel F., Hartmann F. Hyperfine structure of $^{127}\text{J}_2$ and $^{129}\text{J}_2$ optical absorption lines. «Opt. Commun.», 1980, 33, № 1, 23—25 (англ.)

сверхтонкая
структура

Изучена СТС линий $R(30)$, $R(64)$ и $R(64)$ полосы 15—1 ($\lambda \sim 582$ нм) системы $B-X$ молек. йода ($^{127}\text{J}_2$, $^{129}\text{J}_2$). Исследования проводились методом насыщенного поглощения (пары $^{129}\text{J}_2$) и методом лазерной флуоресценции (коллимированный сверхзвуковой молекулярный пучок $^{127}\text{J}_2$). В обоих случаях использовался один и тот же одночастотный лазер на красителе. Значения постоянных квадрупольного (eqQ) и магнитного (c) взаимодействия для уровней B , $v'=15$ и X , $y''=1$ молекул равны (в мГц): $^{127}\text{J}_2 - eq''Q = -2443$, $e(q'-q'')Q = 1928$, $eq'Q = -515$, $c''=0$, $c'=0,05$; $^{129}\text{J}_2 - eq''Q = -1700$, $e(q'-q'')Q = 1348$, $eq'Q = -352$, $c''=0$, $c'=0,02$. Найденная величина отношения $^{129}Q/^{127}Q = 0,699$ согласуется с результатами исследований чисто квадрупольных спектров твердого SnJ_4 в РЧ-области и данных полученных методом внутрирезонаторного насыщенного поглощения с использованием He—Ne-лазера.

В. М. Ковба

X. 1980 № 19

оттиски 9521

1980

У₂

9 Д744. Сверхтонкая структура линий оптического поглощения молекул $^{127}\text{J}_2$ и $^{129}\text{J}_2$. Hyperfine structure of $^{127}\text{I}_2$ and $^{129}\text{I}_2$ optical absorption lines. Pique J. P., Stoeckel F., Hartmann F. «Opt. Commun.», 1980, 33, № 1, 23—25 (англ.)

Сверхтонкая структура колебательно-вращательных линий поглощения $R(3)$, $R(64)$ и $R(65)$ полосы $15'-1''$ системы В—Х молекул $^{127}\text{J}_2$ и $^{129}\text{J}_2$ исследована соответственно методом индуцированной лазером флуоресценции с использованием коллимированного молекулярного пучка и методом спектроскопии насыщения. Определено значение отношения ядерных квадрупольных моментов $^{129}\text{Q}/^{127}\text{Q}=0,699$, которое хорошо согласуется с полученным непосредственно из чисто квадрупольных микроволн. спектров твердого SnJ_4 . Библ. 16.

В. С. Иванов

сверх-
тонкая
структ.

Ф 1980 №9

J₂

1980

Segur G., et al

Кб. мех.
расет

Int. J. Quantum Chem.,
1980, 17, N 5, 955-68.



(see H₂) III

7
2

13 Б123. Индуцируемая электрическим полем преддиссоциация $J_2(B^3PO_u^+)$. Sullivan Brian J., Dows David A. Electric field-induced predissociation of $J_2(B^3PO_u^+)$. «Chem. Phys.», 1980, 46, № 1—2, 231—236 (англ.)

1980

спектр
флуоресц.

Изучены возбуждаемые Ag^+ -лазером спектры широкополосной резонансной флуоресценции паров иода при давл. $8 \cdot 10^{-3}$ мм при наложении модулированного электрич. поля. Наложение поля вызывает пересечение состояния $B^3PO_u^+$ с отталкивательным состоянием и связанное с этим уменьшение интенсивности и модуляцию флуоресценции. Предположено, что отталкивательным состоянием является состояние O_g^+ . Обсуждена возможность взаимодействия состояния B^3P и

O_u^+ с теоретически предсказанным ранее состоянием J_g^+ . Изучена зависимость скорости инициируемой полем преддиссоциации от колебательного квантового числа состояния B . Показано, что пересечение осуществляется вблизи уровней $v=3-4$ потенциальной кривой. Определен дипольный момент перехода между состоянием B и отталкивательным состоянием, равный $0,03-0,04$ D.

Т. Б. Осин

8516
оттиски 9158

№ 1980 N13

оттиск 9158

1980

У₂

6 Д696. Индуцированная электрическим полем преддиссоциация $J_2(B^3\Pi(0_u^+))$. Electric field-induced predissociation of $J_2(B^3\Pi(0_u^+))$. Sullivan Brian J., Dows David A. «Chem. Phys.», 1980, 46, № 1—2, 231—236 (англ.)

В присутствии внешнего электрич. поля связанное состояние $B^3\Pi(0_u^+)$ молекулы J_2 может преддиссоциировать в континуумы 0_g^+ и 1_g^+ . Эффект исследован с использованием методики модуляции электрич. полем индуцированной лазером флуоресценции $J_2(B-X)$. Зависимость константы скорости индуцированной полем преддиссоциации от колебательного уровня состояния B свидетельствует о том, что несвязанное состояние молекулы J_2 , по-видимому, 0_g^+ пересекается с состоянием $B^3\Pi(0_u^+)$ в области уровней $v=3-4$ на внешней части потенц. кривой. Определен дипольный момент перехода из состояния $B^3\Pi(0_u^+)$ в несвязанное состояние 0_g^+ (0,03—0,04) ед. Дебая. Библ. 29. В. С. Иванов

преддиссоц.
М, спектр
флуоресценции

ФР 1980 № 6

I₂

ammuch 9158 1980

92: 1381-42d Electric field-induced predissociation of diatomic iodine ($B^3\Pi_{0^+u}$). Sullivan, Brian J.; Dows, David A. (Dep. Chem., Univ. South. California, Los Angeles, CA 90007 USA). *Chem. Phys.* 1980, 46(1-2), 231-6 (Eng). An elec. field can couple the $B^3\Pi_{0^+u}$ state of I_2 to predicted, unbound 0_g^+ and 1_g^+ states, inducing predissocn. of the B state. This effect is studied by observation of the elec. field modulated, laser-induced fluorescence of I_2 . The dependence of the induced predissocn. rate on the vibrational level of the B -state indicates that an unbound state (probably the 0_g^+) crosses the B state near $v = 3-4$ on the outer limb. The transition dipole moment between B and the unbound state is 0.03-0.04 D.

(frequency)

C.A. 1980.92, N16

J_2

оттиски 10416

1980

3 Д822. Анализ спектра флуоресценции $J_2(D \rightarrow X)$.
Reanalysis of the $D \rightarrow X$ fluorescence spectrum of J_2 .
Tellinghuisen Joel, McKeever Mark R.,
Sur Abha. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 82, № 2, 225—
245 (англ.)

Спектр УФ-флуоресценции (1960—2370 Å) паров J_2 ,
возбуждаемый излучением атомов иода 1830 Å, сфото-
графирован с дисперсией $0,55 \div 1,7$ Å/мм. Выполнен ко-
лебательно- вращательный анализ спектра, который
подтвердил результаты работы (Verma R. D., «J. Chem.
Phys.», 1960, 32, 738—749). Уточнены значения спектро-
скопич. постоянных для уровней $v=0-99$ состояния
 X и уровней $v=204-208$ состояния D молекулы J_2 .
Библи. 37. В. С. Иванов

М.П.

Ф. 1981W 3

I₂

number 10416

1980

✓ 93: 140346n Reanalysis of the $D \rightarrow X$ fluorescence spectrum of diatomic iodine. Tellinghuisen, Joel; McKeever, Mark R.; Sur, Abha (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 82(2), 225-45 (Eng). The UV fluorescence spectrum of I₂ excited by at. I radiation at 1830 Å was photographed and analyzed using a direct least-squares-fitting method with consistency constraints on the centrifugal distortion consts. The anal. confirms prior anal. of this spectrum by R.D. Verma (1960) and yields improved mol. consts. for $v = 0-99$ of the X state and $v = 204-208$ of the D state.

(M.N.)

C.A. 1980, 93, N14

J₂

Оттиск 104/6

1980

8 Б169. Повторный анализ спектра флуоресценции J₂ в переходе $D \rightarrow X$. Tellinghuisen Joel, McKeever Mark R., Sur Abha. Reanalysis of the $D \rightarrow X$ fluorescence spectrum of J₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 82, № 2, 225—245 (англ.)

Зарегистрирован спектр в переходе флуоресценции $D \rightarrow X$ паров J₂ (давл. $\sim 0,03$ мм) при облучении светом 1830 Å (СВЧ-разряд в смеси He (давл. 1—2 мм) и паров J₂ (давл. $\sim 0,03$ мм)). Эксперим. данные согласуются с лит. данными. Они получены для уровней до $v=99$ для X-состояния (на 0,4% ниже предела диссоциации) и до $v=204-208$ для D-состояния. Для D- и X-состояний рассчитаны вращательные постоянные и константы центробежного возмущения. Проведен расчет факторов Франка — Кондона для испускания света в переходе $B \rightarrow X$ с колебательного уровня $v=43$.

В. И. Дорофеев

М. П.

Х. 1981 № 8

Y₂

Lommuck 10599 / 1980.

Truesdell K.A; et al.

. Ii

сметр
группы.

J. Chem. Phys., 1980, 73 (3),
1117 - 26.

I₂

om mccc 8986

1980

(cncwp)

92: 118847j Picosecond dye laser excitation of molecular iodine fluorescence and resonance Raman emission in carbon tetrachloride and cyclohexane. Woodruff, S. D.; Struve, W. S. (Dep. Chem. Ames Lab., Iowa State Univ., Ames, IA 50011 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 69(1), 50-5 (Eng). The emission spectra of I₂ excited at 607 nm in CCl₄ and cyclohexane exhibit resonance Raman emission bands accompanied by featureless red-IR continua, and are identical for 1.5 μs and 3 ps pumping pulses. The continua consist primarily of vibrationally unrelaxed $B^3\Pi_0 + u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ fluorescences.

C. A. 1980. 92 n 14

У₂

1980

12 Д453. Исследование J_2 методом магнитного резонанса в молекулярном пучке с использованием лазерной флуоресценции для селекции состояний и детектирования переходов СТС. Laser fluorescence state selected and detected molecular beam magnetic resonance in I_2 .

Yokozeki Akimichi, Muentner J. S. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 6, 3796—3804 (англ.)

Двадцать СТС-переходов $\Delta F = \pm 1$ молекулы $J_2(X^1\Sigma, v=0, J=13)$ зарегистрированы методом магн. резонанса в молекулярном пучке J_2 с использованием излучения $\lambda = 5145$ нм Ar^+ -лазера для селекции молекул по состояниям и детектирования переходов СТС. Определены константы eqQ , спин-вращательного, тензорного спин-спинового и скалярного спин-спиновых взаимодействий: —2452583,7 (16); 3,162 (8); 1,58 (5) и 3,66 (3) кгц соответственно. С использованием полученных значений

М. П.

ф. 1980 № 12

пересмотрены результаты анализа оптич. данных (Нас-
kel L. A. et al. «Phys. Rev. Lett», 1975, 35, 568) и опре-
делены константы СТ-взаимодействий для J_2 ($B^3\Pi_0$, $v=$
 $=43$, $J=12$), равные (в том же порядке, что и выше):
—558669(8); 190,13 (12); —100,2(7) и 0,2(4) кгц. Зна-
чения постоянных для состояний X и B сильно отлича-
ются от полученных ранее. Для обоих состояний оцене-
ны также магнитное октупольное и электрическое гек-
садекупольное взаимодействия. Библ. 37. В. С. Иванов