

S42

10

Sc₂
Ca₂.

King A. S. Astrophys J. 1908
27, 353

Спектры молекулярного
Ca и Sc. Оригинальные
интерпретации.

$\frac{Se_2}{Ca_2}$

Huoldt L. Knall E.

11956

Аск. S. Fys. II. 13, 229

О возможности образования
компонов Se и Ca в смеси

Исследовано изменение
интенсивности линий Ca
4227 и Se 4607 в зависимости
от их концентрации в смеси
в пламени $CO_2, H_2 + \text{воздух}$.

Для выяснения влияния самостоятельной
применяемое зеркало с известной
отражательной способностью.
Изменчивости измерений
фотометрически с применением
ортоумножителя. Показано, что
в планках не должны образовываться
дуплеры.

Do (Ln Au, Ce Au, Pr Au, Nd Au, Li Au, Na Au,
Au, Na Au, Rb Au, Cs Au, Mg Au, Ca Au, ¹⁹⁷⁰
Sr Au, Ba Au, Li₂, K₂, Na₂, Rb₂, Cs₂, Mg₂,
Ca₂, Sr₂, Ba₂)

Δ Hf (Ln Au, Ce Au, Pr Au, Nd Au)
viii 3700

Gingerich K. A., Finkbeiner H. C.,
J. Chem. Phys., 1970, 52, N 6, 2956-
2964

pp 1970, 82286 10 u

(99)

Fr_2

Мартынкевич
Г.М.

1970

нефх,

44, N2, 325

сценка
 Φ_0

(Cell. Fr_2) III



Sr₂

1971

Mueller H.

Do Z. Phys. Chem., 1971, 248,
152-60.

• (cm Sr₂); III

Sm₂

номер
1580

1973

номер
свѣд

Kulkarni K.S., Sarma C.R.

Semiempirical methods in molecules

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

1973, 6, NII, 2377-2381.

Sr_2^+

ommuck 5757

1977

Do; Fe^-
y

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc.,
1977, 99, (17), 5557-70.

Sr_2

ommuca 5788

1977

Miller John C., et al.
"J. Chem. Phys.", 1977,
67, No. 2478-2487 (am.)

(D.)

cit. $Mg_2 - III$

отмисек 6715

1978

2 Д378. Спектры испускания молекул Sr_2 в матрице благородного газа, возбуждаемые излучением лазера. Miller John C., Andrews Lester. Laser excited emission spectra of Sr_2 isolated in rare gas matrices at 12 K. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 2, 936—938 (англ.)

В области $12\,250\text{--}13\,250\text{ см}^{-1}$ получены спектры испускания молекул Sr_2 в Ar- и Kr-матрицах при $t = 12^\circ\text{K}$. Спектры возбуждались излучением Kr^+ -лазера ($676,4\text{ нм}$). Широкая полоса с максимумом $\sim 12\,550\text{ см}^{-1}$ имеет колебательную структуру. Расстояние между соседними компонентами структуры $\sim 43\text{ см}^{-1}$. Отмечено, что эксперим. данных недостаточно для расчета на их основе потенц. энергии молекулы Sr_2 в основном состоянии. Полученные результаты сравнены с данными других авторов для подобных объектов: Ca_2 , SrMg и Mg_2 . Библ. 18.

Sr_2
 Sr_2Ar
 Sr_2Kr
 спектр
 Sr_2

Р. 1979. 2

BY-IX-5613
ommua 8564 1979

Sr 2

Jones R.O

K. M. B. C.
Meyner
Chizy

J. Chem. Phys.
1979, 71 (3), 1300-1308

(cc. Bezi III)

St₂

ammica 8901

1979

CUA. NAEY.

Ohwada K.

Spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-57

оттис 9580

1980

Sr₂

9 Д746. Фотоассоциация, фотолюминесценция и диссоциация при столкновениях димеров Sr₂. Photoassociation, photoluminescence, and collisional dissociation of the Sr₂ dimer. Bergeman T., Liao P. F. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 2, 886—898 (англ.)

М.Н.

Исследована фотолюминесценция Sr₂ в газовой фазе, возбуждаемая светом лазера на красителе или Ag⁺-лазера. Спектр люминесценции содержит ряд дискретных молекулярных линий на фоне континуума, характерного для связанно-свободных переходов. Некоторые особенности спектров объяснены флуоресценцией димеров, образующихся в результате фотоассоциации атомов Sr. Проведен расчет параметров потенциала Морзе: для состояний $X^1\Sigma_g^+$ $D_e=1100\pm100$ см⁻¹, $\omega_e=39,6\pm1$ см⁻¹ и для $A^1\Sigma_u^+$ $D_e=5460\pm100$ см⁻¹, $\omega_e=8,3\pm3$ см⁻¹, $R_e''-R_e'=0,49\pm0,02$ Å. Сильная преддиссоциация, индуцированная столкновением молекул, приписана пересечению кривых потенц. энергии. Изучена зависимость характеристик процесса диссоциации от длины волны возбуждающего излучения. Библ. 24. Е. Н. Викторова

Ф 1980 №9

02111111 9590

1980

Sr₂

M.N.

92: 155333j Photoassociation, photoluminescence, and collisional dissociation of the strontium dimer. Bergeman, T.; Liao, P. F. (Phys. Dep., Fordham Univ., Bronx, NY 10458 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(2), 886-98 (Eng). Observations and anal. are reported of the laser-excited photoluminescence of Sr₂. The spectra contains some discrete mol. line spectra, but is dominated by extensive, deeply modulated continua characteristic of bound-free transitions of excimer systems. Dye laser and Ar laser-excitation of the Sr₂ dimer is used. Some of the spectra is attributed to fluorescence from dimers created by laser induced photoassocn. of free Sr atoms. Techniques are developed to obtain Morse potential parameters by computer modeling of the obsd. spectra. For the $X^1\Sigma_g^+$ state, $D_e = 1100 \pm 100 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e = 39.6 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$; for the $A^1\Sigma_u^+$ state, $D_e = 5460 \pm 100 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e = 83 \pm 3 \text{ cm}^{-1}$; and $R_e'' - R_e' = 0.49 \pm 0.02 \text{ \AA}$. Strong collision-induced predissocn. is obsd. and attributed to a potential curve crossing. Cross sections for dissocn. by Ar are reported as a function of laser excitation wavelength.

Ref. 1

C. A. 1980. 92, N18

Sr₂

оттиски 9580

1980

фотоассоциация
фотолюминесценция

19 Б1295. Фотоассоциация, фотолюминесценция и обусловленная столкновениями диссоциация димеров Sr₂. Bergeman T., Liao P. F. Photoassociation, photoluminescence, and collisional dissociation of the Sr₂ dimer. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 2, 886—898 (англ.)

При лазерном возбуждении изучена люминесценция (Лм) димеров Sr₂. Спектры Лм представляют собой континуум, на который наложены дискретные линии молек. спектра. Такой спектр Лм характерен для связанно-свободных переходов в эксимере. Возбуждение Лм проводили светом 475,9—612,4 нм от аргонового лазера или лазера на красителе (спектральная ширина линии

X. 1980 N 19

($\sim 1 \text{ см}^{-1}$). Спектры Лм отнесены к флуоресценции димеров, образованных в результате фотоассоциации свободных атомов Sr. Предложена методика расчета (с использованием ЭВМ) параметров потенциальной кривой Морзе. Найдено, что для состояния $X'\Sigma_g^+$ димеров $D_e = 1100 \pm 100 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e = 39,6 \pm 1 \text{ см}^{-1}$; для состояния $A'\Sigma_u^+ D_e = 5460 \pm 100 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e = 83 \pm 3 \text{ см}^{-1}$. $R_e' - R_e'' = 0,49 \pm 0,02 \text{ \AA}$. Наблюдали преддиссоциацию, обусловленную столкновениями, к-рая, по мнению авторов, вызвана пересечением термов $^1\Sigma_u^+$ и $^3\Pi_u$.

Ю. В. Помазан

Se₂

[number 10463]

1980

Miller John C; et al.

обзор:
спектр
показат.

Appl Spectrosc. Rev. 1980,
16, N1, 1-42.

св. Mg₂ - III

Si_2

number 10853 | 1981

Goble James H. et al.

Chem. Phys. Lett. 1981, 77,
N1, 168-71

и. н. номены
неприв

и. н. Be₂ - III

Sr₂

[Osmerec 12231] 1981.

Miller J. C., et al.

crystal

MCD

laser pump.

J. Chem. Phys., 1981, 74
(12), 6349-61.

Magnetic circular dichroism
spectra in noble gas matrices.

Sr^{2+}
 2

1982

Gaspar R., Tamassy-
Lentei I., et al.

γ, γ,
mupuu.
pacuu.

Acta Phys. Chim. Debre-
cina 1983, 24, 89-93.

(see. ● llg_2^{2+} / III)

1982

Sr₂

/ 100: 129197g Analysis of discrete and continuous laser-induced fluorescence spectra of the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of diatomic strontium. Gerber, G.; Moeller, R. (Fak. Phys., Univ. Freiburg, 7800 Freiburg, Fed. Rep. Ger.). *Contrib. - Symp. At. Surf. Phys.* 1982, 168-71 (Eng). Edited by Lindinger, W.; Hlaworka, F.; Maerk, T. D. Inst. Atomphys. Univ. Innsbruck: Innsbruck, Austria. Laser-induced fluorescence spectra of the gaseous Sr₂ excimer mol. were measured. The spectra contain discrete mol. fluorescence series, regularly modulated continuous fluorescence and an unstructured continuum. Anal. of the mol. line spectra yields for the 1st time Dunham coeffs. for the $X^1\Sigma_g^+$ ground state and the $A^1\Sigma_u^+$ excited state. Using the intensity distribution of the modulated continuum which is assocd. with bound-free transitions the repulsive potential of the ground state up to 3000 cm⁻¹ above the dissocn. limit was detd. The unstructured continuum can be analyzed as due to 2 types of continuous fluorescence. The dissocn. energy of Sr₂ is $D_e(X) = 965 \pm 45$ cm⁻¹.

 $(A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+)$

Do, M.N.

C.A. 1984, 100, N16

Sr₂

1982

16 B1179. Анализ системы полос $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+ + \text{Sr}_2$ дискретного и непрерывного спектра лазерной флуоресценции. Analysis of discrete and continuous laser induced fluorescence spectra of the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of Sr_2 . Gerber G., Möller R. «SASP'82: Symp. Atom. and Surface Phys., Maria Alm, Salzburg, 7—13 Febr., 1982. Contrib.» Innsbruck, s. a. 168—171 (англ.)

М.П., Яо;

Измерены спектры флуоресценции молекул Sr_2 , возбуждаемые одномодовыми Ar^+ и Kr^+ -лазерами и лазером на красителе непрерывного действия. В спектрах, связанных с переходом $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$, наблюдались отдельные серии полос, регулярно модулированная непрерывная флуоресценция и бесструктурный континуум. Определены (но не указаны) коэф. Дэнхема для обоих электронных состояний ($R_e(X^1\Sigma_g^+) = 4,364 \text{ \AA}$), потенциальные кривые состояний A и X молекулы в области значений $R = 3 - 7 \text{ \AA}$ для $I = 0$ и $I = 155$. Энергия диссоциации молекулы оценена как $D_e(X^1\Sigma_g^+) = 965 \pm 45 \text{ см}^{-1}$.
В. М. Ковба

X. 1984, 19, N 16

Sr_2

1982

8 Л410. Анализ дискретных полос и континуума в спектре возбуждаемой лазером флуоресценции системы $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+ Sr_2$. Analysis of discrete and continuous laser induced fluorescence spectra of the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of Sr_2 . Gerber G., Möller R. «SASP'82: Symp. Atom. and Surface Phys., Maria Alm, Salzburg, 7—13 Febr., 1982. Contrib.» Innsbruck, s. a., 168—171 (англ.)

Получены спектры возбуждаемой лазером флуоресценции димеров Sr_2 в газовой фазе при 1300 К. Наличие в спектре континуума со слабо выраженной колебательной структурой и дискретных полос объяснено переходами из связанного возбужденного состояния $A^1\Sigma_u^+$ в основное состояние $X^1\Sigma_g^+$ в области выше и ниже энергии диссоциации. Из спектра флуоресценции определены вращательные и колебательные постоянные состояний $A^1\Sigma_u^+$ и $X^1\Sigma_g^+$. Вычислены равновесное расстояние $R_e = 4,364 \text{ \AA}$ и энергия диссоциации $D_e = 965 \pm \pm 45 \text{ см}^{-1}$ молекулы Sr_2 в основном состоянии. Е. Н. Т.

М. П.

ср. 1984, 18, № 8

Sr₂

от 20019 1984

4 Б1183. Переходы между связанными состояниями и в область континуума системы $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ в спектре испускания Sr_2 индуцируемом лазером. Laser induced bound-bound and bound-continuum emission of the Sr_2 $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system. Gerber G., Möller R., Schneider H. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 4, 1538—1551 (англ.)

спектр

Измерены спектры испускания молекул Sr_2 ($T_{паров} \approx 1300$ K, переход $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$) возбуждаемые одномодовыми Ar^+ , Kr^+ -лазерами и лазером на красителе ($\lambda_{возб} = 600 - 450$ нм). Фл наблюдалась почти коаксиально с лазерным лучом. В зависимости от $\lambda_{возб}$ наблюдались прогрессии P , R -дублетов, регулярно модулированная Фл, бесструктурный континуум. Для отнесения по J возбуждаемых переходов авторы разработали спец. итеративный метод совместного анализа двух хорошо разрешенных прогрессий P , R -дублетов. Дан перечень переходов $V', J'' - V, J$ возбуждаемых отдельными линиями лазеров в диапазоне 514—588 нм. Из анализа спектров получены след. значения коэф. Дан-

X. 1985, 19, № 4

хема для $^{88}\text{Sr}_2$ (см^{-1}): состояние $X^1\Sigma_g^+ - Y_{10} = 40,32$, $Y_{20} = -0,405$, $Y_{30} = 4,29 \cdot 10^{-4}$, $Y_{01} = 1,940 \cdot 10^{-7}$ ($R_e = 4,446$ А), $Y_{11} = -2,0 \cdot 10^{-4}$, $Y_{21} = -7,5 \cdot 10^{-7}$, $Y_{31} = -1,4 \cdot 10^{-8}$, $Y_{02} = -2,0 \cdot 10^{-8}$, $D_e = 1060$; состояние $A^1\Sigma_u^+ - T_e = 17357,9$, $Y_{10} = 85,07$, $Y_{20} = -0,33$, $Y_{30} = -2,5 \cdot 10^{-5}$, $Y_{01} = -6456 \cdot 10^{-7}$ ($R_e = 3,952$ А), $Y_{11} = -1,2 \cdot 10^{-4}$, $Y_{21} = 4 \cdot 10^{-7}$, $Y_{02} = -8 \cdot 10^{-9}$, $D_e = 5400$. Рассчитаны потенциальные кривые РКР (приведены $R_{\text{мин}}$, $R_{\text{макс}}$, G_v , B_v) $\text{Sr}_2(A, X)$ и факторы Франка—Кондона для полос $V_A = 0-31 - V_X = 0-35$ ($J=0$ и 100). Модулированная Фл связана с переходами с дискретных уровней V_A' , J_A' в область континуума основного электронного состояния молекулы (выше диссоционного предела на $\leq 3000 \text{ см}^{-1}$). Анализ этих спектров позволил построить внутреннюю часть потенциальной кривой в этом диапазоне энергий. Для ее описания использовано выражение

$$V_{\text{отт.}}(R) = \sum_{n=0}^6 C_n (R - R_e)^n.$$

Значения C_n (в $\text{см}^{-1} \cdot \text{А}^{-n}$): $C_0 = 111$, $C_1 = -1790$, $C_4 = -1250$, $C_6 = 650$, $C_2 = C_3 = C_5 = 0$. Вычисленные факторы Франка—Кондона для переходов между связанными состояниями и в область континуума хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемым распределением интенсивности в спектрах Фл. Бесструктурный континуум интерпретирован как суперпозиция большого числа переходов возбуждаемых с участием уровней V'', J'' , лежащих вблизи диссоционного предела.

В. М. Ковба

Sr₂

Om 20 019 1984

$$(A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+)$$

u-n.

(лазерный эксперимент)

C.A. 1984, 101, N18

101: 160543m Laser-induced bound-bound and bound-continuum emission of the strontium (Sr₂)A $^1\Sigma_u^+$ -X $^1\Sigma_g^+$ system. Gerber, G.; Moeller, R.; Schneider, H. (Fak. Phys., Univ. Freiburg, D 7800 Freiburg, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(4), 1538-51 (Eng). Laser-induced emission of the Sr₂ mol. consisting of discrete mol. fluorescence series, regularly modulated continuous fluorescence, and an unstructured continuum was obsd. in the gas phase at excitation wavelengths between 600 and 450 nm. The anal. of the mol. line spectra provides Dunham coeffs. and Rydberg-Klein-Rees potentials for the X $^1\Sigma_g^+$ ground state and the excited A $^1\Sigma_u^+$ state. The main spectroscopic consts. are $\omega_e = 40.32$ cm⁻¹, $R_e = 4.45$ Å, and $D_e = 1060$ cm⁻¹ for the X state and $\omega_e = 85.07$ cm⁻¹, $R_e = 3.95$ Å, and $D_e = 5400$ cm⁻¹ for the A state. The modulated continuum which is due to bound-continuum transitions from a specific excited level v' , J' to the continuum of the ground state was used to det. the repulsive part of the ground-state potential up to 3000 cm⁻¹ above the dissoen. limit. Calcd. discrete and continuous Franck-Condon factors are in good agreement with the expt., both depend sensitively on the rotational quantum no. J . The unstructured continuum can be interpreted as a quasicontinuous superposition of many fluorescence spectra. Calens. show that laser excitations from levels v'' , J'' slightly below the dissoen. limit and excitation from continuous states lead to the obsd. continuum.

Sr₂

Om. 20019

1984

1 3 Л485. Связанно-связанное и связанно-свободное возбуждаемое лазером излучение Sr_2 в системе $A_1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$. Laser induced bound-bound and bound-continuum emission of the $\text{Sr}_2 A_1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system. Gerber G., Möller R., Schneider H. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 4, 1538—1551 (англ.)

При лазерном возбуждении получен спектр флуоресценции молекулы Sr_2 в газовой фазе ($A_1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$), состоящий из дискретного спектра, периодически модулированного континуума и бесструктурного континуума. На основании анализа молекулярного спектра вычислены параметры Данхема, коэффициенты РКР потенциала и молекулярные постоянные для обоих состояний. Модулированный континуум, связанный с переходами с возбужденных уровней состояния А на отталкивательную часть основного состояния, использован для определения части потенц. кривой основного состояния, лежащей на 3000 см^{-1} выше предела

М.П.

ср. 1985, 18, № 3

диссоциации. Рассчитаны коэф. Франка—Кондона для
связанно-связанных и связанно-свободных переходов
в зависимости от вращат. квантового числа. Бесструк-
турный континуум в области 590—640 нм объяснен
наложением нескольких излучательных переходов.
Библ. 35. Е. П. Смирнов



Fr

1992

2 4 Б1163. Спектроскопия «обеднения» $B^1\Pi_u - X^1\Sigma^+_g$ системы Sr_2 . Depletion spectroscopy of the Sr_2 $B^1\Pi_u - X^1\Sigma^+_g$ system /Bordas C., Broyer M., Chevaleyre J., Dugourd Ph. //Chem. Phys. Lett. .—1992 :—197 ,№ 6 .—С. 562—657 .—Англ.

Проведено спектроскопич. исследование молекулы Sr_2 в молек. пучке. Метод двухфотонного возбуждения использован для изучения возбужденных состояний: $A-X$ -система наблюдалась при двухфотонной ионизации, а спектроскопия обеднения позволила охарактеризовать новое возбужденное состояние — $B^1\Pi_u$, диссоциирующее к пределу $(5s^2)^1S + (5s5p)^3P$. Получены предварит. молекул. постоянные $B^1\Pi_u$ -состояния. Обсужден механизм диссоциации, приводящий к обеднению. Е. А. Пазюк

М.П.

Х. 1994, №4

Sr₂

1992

/ 117: 200883m Depletion spectroscopy of the Sr₂ B¹Π_u ← X¹Σ⁺_g system. Bordas, C.; Broyer, M.; Chevaleyre, J.; Dugourd, Ph. (Lab. Spectrom. Ionique et Mol. (URA CNRS No. 171), Univ. Lyon I, Batim. 205, 43 Blvd. du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 197(6), 562-7 (Eng). Spectroscopic studies

were performed on Sr₂ mola. produced in a seeded mol. beam. Two-photon excitation techniques were used to investigate excited states of Sr₂: the AX system was obsd. using two-photon ionization while depletion spectroscopy allowed to characterize a new state of Sr₂, B¹Π_u, discovg. in (5s²)¹S + (5s5p)¹P. Preliminary spectroscopic consts. are deduced and the disocn. mechanism allowing depletion is discussed.

(B¹Π_u ← X¹Σ⁺_g)

C.A. 1992, 117, N 20

Sr_2

1992

117: 76970w Strontium clusters and ionization of the strontium dimer. Dugourd, P.; Chevaleyre, J.; Bordas, C.; Broyer, M. (Lab. Spectrom. Ionique Mol., Univ. Lyon I, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1992, 193(6), 539-45 (Eng). Strontium clusters produced in a seeded mol. beam have been obsd. up to Sr_n . These preliminary results demonstrate that spectroscopy of small Sr_n clusters is achievable by means of depletion techniques. Investigation of the ionization region of the Sr_2 mol. was conducted by one- or two-photon ionization techniques which give slightly different estns. of the ionization potential that are discussed here. A value of $38200 \pm 100 \text{ cm}^{-1}$ is deduced for the ionization potential and simultaneously Rydberg series are partly analyzed.

УОНИКА - НУЛОК
СРЕДНОСТЬ.

④ Sr_2



$n=2-5$

C. A. 1992, 117, N. 8

Sr₂

1992

~~45~~ Д22. Кластеры стронция и ионизация димера Sr₂.
Strontium clusters and ionization of the Sr₂ dimer / Du-
gourd Ph., Cheveleyre J., Bordas C., Broyer M. // Chem.
Phys. Lett. — 1992 — 193, № 6 — С. 539—545 —
Англ.

В молекулярном пучке масс-спектроскопич. методом
наблюдалось образование кластеров стронция вплоть до
Sr₅. Проведено исследование области ионизации димера
Sr₂ с использованием методик одно- и двухфотонной
ионизации. Для потенциала ионизации димера получено
значение $38200 \pm 100 \text{ см}^{-1}$.

(У)

ср. 1993, № 6

Sz_n
 $n=2-5$

1992
Dugourd P, Chevalayre
J. et al.

модель.
пухляк
ежемесячно.

Chem. Phys. Lett.
1992, 193 (6), 539-45.

(сер.  Sz_2 ; III)

Sr₂

1996

125: 68277a Theoretical study of the electronic structure of the Sr₂ molecule. Boutassetta, N.; Allouche, A. R.; Aubert-Frecon, M. (Laboratoire Spectrometrie Ionique Moleculaire, CNRS Universite Lyon I, F69622 Villeurbanne, Fr.). *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* 1996, 53(6), 3845-3852 (Eng). The electronic structure of the Sr₂ mol. has been investigated by use of a two-valence-electron pseudopotential, configuration-interaction calcns. with the four active electrons via the CIPSI (CI by perturbation of a multiconfiguration wave function selected iteratively) algorithm, and addn. of a core-polarization potential. Potential-energy curves for the ground and 21 excited states of Sr₂ as well as for the ground state of Sr₂⁺ have been detd., and subsequent spectroscopic consts. have been obtained. Quite a good agreement with a few available exptl. values is displayed for the unambiguously assigned states X ¹Σ_g⁺, A ¹Σ_u⁺ of Sr₂ and X ²Σ_u⁺ of Sr₂⁺, while present predictions lead to a different assignment for the obsd. B ¹Π_u state which is found to correspond to the adiabatic (3)¹Π_u state.

модем.
пацем
номери.
хрустек,
технол.
емпххр

C.A. 1996, 125, 26

Ir₂

On 39543

1998

Baig M.A., Yaseen M., et al.,

Chem. Phys. Lett., 1998,

M.N

296, 403-407