

79 Br₂
81 Br₂

B7-XI-1804

1967
65

u. 17.

список нормал.

50537p Absorption spectrum of bromine from 6200 to 5100 A. J. A. Horsley and Richard F. Barrow (Univ. Oxford, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 63(1), 32-8(1967)(Eng). The absorption spectrum of the $^3\Pi_{0+u} - ^1\Sigma_g^+$ system of Br between 6200 and 5100 A. has been photographed at high resolu. by using each of the sepd. isotopic species $^{79}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$. A rotational analysis of 10 bands of each isotopic species has been carried out. The accepted vibrational numbering was confirmed. The consts. obtained (cm.⁻¹) for each species are:

$^{79}\text{Br}_2$	$\omega_e'' = 325.37,$	$x_e''\omega_e'' = 1.098,$	
	$\omega_e' = 168.88,$	$x_e'\omega_e' = 1.75,$	$y_e'\omega_e' = -0.0061,$
	$B_e'' = 0.082114,$	$\alpha_e'' = 0.00032,$	
	$B_e' = 0.0594,$	$\alpha_e' = 0.00043,$	$\gamma_e' = -0.00001,$
	$r_e'' = 2.2809,$	$r_e' = 2.68 \text{ A.}$	

C.A. 1967. 66. 12

⁸¹Br₂

$$\begin{aligned}\omega_e'' &= 321.29, \\ \omega_e' &= 166.83, \\ B_e'' &= 0.080088, \\ B_e' &= 0.0576,\end{aligned}$$

$$x_e''\omega_e'' = 1.064,$$

$$x_e'\omega_e' = 1.71,$$

$$\alpha_e'' = 0.000319,$$

$$\alpha_e' = 0.00038,$$

$$r_e'' = 2.2809,$$

$$r_e' = 2.69 \text{ \AA}.$$

$$y_e'\omega_e' = -0.0057,$$

$$\gamma_e' = -0.000011,$$

Revised consts. for the most abundant isotopic species ^{79,81}Br₂ have been calcd. The last 4 bands immediately preceding the onset of the continuum have also been analyzed for each species. A limiting curve of dissocn. has been plotted in each case leading to an av. value for D_0 (^{79,81}Br₂) of $15,893.1 \pm 1.0$ cm.⁻¹

RCTD

Br₂

BP-XI-1804

1967
65

1 Д264. Спектр поглощения брома в области 6200—5100 Å. Horsley I. A., Barrow R. F. Absorption spectrum of bromine from 6200 to 5100 Å. «Trans. Faraday Soc.», 1967, 63, № 1, 32—38 (англ.)

оп. 1968. 1Д

Br₂

В-9-Х1-1864

1967
65

3 Б106. Спектр поглощения брома от 6200 до 5100 Å.
Horsley J. A., Barrow R. F. Absorption spectrum of
bromine from 6200 to 5100 Å. «Trans. Faraday Soc.», 1967,
63, № 1, 32—38 (англ.)

Спектр поглощения системы $^3\Pi_{o+u} - ^1\Sigma_g^+$ брома иссле-
дован при высоком разрешении - фотографическим мето-

структура;

и. и. ;

Do

дом в области 6 200—5 100 Å отдельно для изотопичес-
ких образцов Br₂⁷⁹ и Br₂⁸¹. Проведенный ротационный и
колебательный анализ подтвердил правильность приня-
той нумерации колебательных полос. Найденные значе-
ния молекулярных констант (в см⁻¹) соответственно
равны для Br₂⁷⁹: $\omega_e'' = 325,37$; $x_e''\omega_e'' = 1,098$; $\omega_e' = 168,88$;
 $x_e'\omega_e' = 1,75$; $y_e'\omega_e' = -0,0061$ $B_e'' = 0,082114$; $\alpha_e'' = 0,00032$;

Х. 1968. 3

$B'_e = 0,0594$; $\alpha'_e = 0,00043$; $\gamma'_e = -0,00001$; $r''_e = 2,2809$;
 $r'_e = 2,68$ А и для Br_2^{81} : $\omega''_e = 321,29$; $x''_e \omega''_e = 1,064$; $\omega'_e =$
 $= 166,83$; $x'_e \omega'_e = 1,71$; $y'_e \omega'_e = -0,0057$; $B''_e = 0,080088$;
 $\alpha''_e = 0,000319$; $B'_e = 0,0576$; $\alpha'_e = 0,00038$; $\gamma'_e = -0,000011$;
 $r''_e = 2,2809$; $r'_e = 2,69$ А. Рассчитаны также константы
 для молекулы смешанного изотопического состава
 $\text{Br}^{79}\text{Br}^{81}$. Короткой экстраполяцией определена граница
 диссоциации $D_0(\text{Br}_2^{79,81}) = 15893,1 \pm 1 \text{ см}^{-1}$.

В. Динанов-Клоков

45440 ± 8

$H_2, CH, OH, HCl, O_2, Cl_2, Br_2, I_2, Li_2$ 1967
 K_2 (fe-cu.no.g.) X-5997

Mathai A. Cleveland 55.

Spectrosc. Mol., 1967, 16 (187), 61-6.

Force constants from the Rydberg-Klein-Rees potential energy curves.

13 ~~1110~~

CA, 1968, 68, 522, 98735v

1967

Br₂

Br₂

спектр
поглощения

20 Б144. Спектр поглощения брома в видимой и
УФ-области спектра от комнатной т-ры до 440. Pas-
schier A. A., Christian J. D., Gregory N. W.
The ultraviolet-visible absorption spectrum of bromine
between room temperature and 440°. «J. Phys. Chem.»,
1967, 71, № 4, 937—942 (англ.)

Измерен молярный коэф. поглощения Br₂ в области
300—750 нм для 7 значений т-р от 25 до 440°. Показано,
что ур-ние Зульцера — Виланда хорошо описывает
т-рный ход коэф. поглощения Br₂ в этой области. Рас-
смотрен вопрос об отнесении поглощения, сильно зави-
сящего от т-ры и давления в области 200—240 нм к
молекуле Br₄. С. А. Станкевич

2. 1967. 20

Br₂

1967

99905w The ultraviolet-visible absorption spectrum of bromine between room temperature and 440°. A. A. Passchier, J. D. Christian, and N. W. Gregory (Univ. of Washington, Seattle). *J. Phys. Chem.* 71(4), 937-42(1967)(Eng). The absorption spectrum of Br₂(g) at wavelengths between 200 and 750 mμ and between 25 and 440° has been measured. Molar absorptivities suitable for quant. use are reported. The temp. dependence is compared with that predicted by a Sulzer and Wieland equation (CA 47, 5250f). A marked temp. and concn. dependence in the uv region and evidence for Br₄ are discussed.

RCKG

C.A. 1967.66.22

$\text{Cl}_2, \underline{\text{Br}_2}$ (gum *negativ. spectrum*) ¹¹ 1967
VI 2393

Todd J.A.C., Richards W.G., Byrne H.A.,
Trans. Faraday Soc., 1967, 63(9), 2081-4.

Complete potential energy curves
for excited states of chlorine and
bromine. ⁶⁰⁸ 
1967 
CA, 1967, 67, 122, 102991z

XI - 660

1967

Получены (сирект. параметры
квант.-мех. расчет)

Wiebenga E.H.,

Stereochim. Inorg., Acad. Naz.

Lincei, Corso Estivo Chim. 9th, 1965
(Publ. 1967), 319-331 (unpubl.)

CA, 1969, 71, 121, 128926g HO

1968

Br₂

111739s Flash spectroscopy studies of aqueous bromine and iodine solutions. Faure, Jean; Soullignac, Jean Claude; Dupuy, Jean Claude (Dep. Chim. Phys., Fac. Sci., Bordeaux, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. C* 1968, 267(11), 673-6 (Fr). Use of a double monochromator and a Xe arc lamp suitably outfitted allowed an energy input of over 1500 j. with a flash whose time-energy profile was 5 μ sec. half-band width and a decay tail giving less than 5% of peak intensity at 20 μ sec. Light of 450 or 390 nm. was used to excite I₂ or Br₂ in $5 \times 10^{-4} M$ aq. soln. Absorption spectra for a long-lived excited species found to persist well beyond 200 μ sec. was found to decay according to 2nd order kinetics. The spectra for the excited species are shown. The addn. of NaClO₄ had no effect on the kinetics. A charge complex, X-H₂O, is postulated.

S. Goldwasser



C. A. 1968. 69. 26

IX

Br₂

1968

Gutmann H., Levin M.,
Perlmuter - Hayman B.

J. Phys. Chem., 72, v10, 3671.

Ис-снейфор нонмоченн
Cl₂, Br₂ и BrCl в водном
р-рах.



(см. Cl₂ / III)

F_2, Cl_2, Br_2, I_2 (сумма X_1^{302} сгорания) 1968

Lee Hui Bang, Pak Hyungsuk, Chang Seikun,

Daehan Kwahan Ilwojee (Seoul, Korea),

1968, 12(1), 32-4

Rotational partition function for
diatomic molecules in the liquid
state.

14, 15



80

CA, 1969, 70, 14, 6138 &

ВФ-Х1-1938

1968

Br₂¹($\tilde{\Sigma}_g^+$)

16 Б133. Метод проверки и улучшения молекулярных констант двухатомных молекул с конкретным применением к Br₂¹(Σ_g^+). LeRou, Robert J., Burns George. A method for testing and improving molecular constants of diatomic molecules with special reference to Br₂¹(Σ_g^+). «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 25, № 1, 77—85 (англ.)

Использование ЭВМ для расчета «точек поворота», соответствующих потенциалу Рисса—Клейна—Ридберга (РКР), а также для решения радиального уравнения Шрёдингера с этим потенциалом, позволяет оценить приемлемость аналитических потенциалов из сравнения с данными, следующими для потенциала РКР. На этом сравнении основан предлагаемый метод проверки приближенно оцениваемых спектроскопич. констант (СК)

Х. 1968. 16

двухатомных молекул. Формулируются общие требования, которым должен удовлетворять потенциал РКР, и излагается схема выбора СК, удовлетворяющих этим требованиям. Конкретное применение метода к молекуле Br_2 $79,81^1(\sum_g^+)$ показывает, что ни один из известных в литературе наборов СК не приводит к приемлемым потенциалам РКР. Приводятся новые значения СК, согласующиеся с эксперим. данными и, в то же время, приводящие к удовлетворительному потенциалу РКР: $\omega_e = 324,24$; $\omega_e x_e = 1,172$; $\omega_e y_e = 0,342 \cdot 10^{-2}$; $\omega_e z_e = -0,101 \cdot 10^{-3}$; $B_e = 0,081079$; $\alpha_e = 0,30405 \cdot 10^{-3}$; $\gamma_e = -0,40 \cdot 10^{-5} (\text{см}^{-1})$; $r_e = 2,2814 \text{ \AA}$. А. А. Медвинский

44281a Method for testing and improving molecular constants of diatomic molecules with special reference to bromine $^1(\Sigma_g^+)$. Robert J. LeRoy and George Burns (Univ. Toronto, Can.). *J. Mol. Spectrosc.* 25(1), 77-85(1968)(Eng). The common procedure of constructing Rydberg-Klein-Rees (R.K.R.) potentials from known spectroscopic data has been reversed in this work. Instead, spectroscopic consts., which had often been obtained by approx. methods, were tested to det. whether they agree with the expected shape of the R.K.R. potential. For a special case, the $^{79,81}\text{Br}_2$ ($^1\Sigma_g^+$) mol., no spectroscopic consts. available in the literature could generate a R.K.R. potential which is reasonable at all energies, and some reported consts. has been calcd. These consts. agree with the exptl. results and, at the same time, yield a reasonable R.K.R. potential. They are (in cm^{-1}): $\omega_e = 324.24$, $\omega_e x_e = 1.172$, $\omega_e y_e = 0.342 \times 10^{-2}$, $\omega_e z_e = -0.101 \times 10^{-3}$, $B_e = 0.081079$, $\alpha_e = 0.30405 \times 10^{-3}$, and $\gamma_e = -0.40 \times 10^{-5}$. The term values generated from these consts. predict that there are eighty vibrational levels in Br_2 ($^1\Sigma_g^+$). The R.K.R. turning points for the lowest thirty-seven vibrational levels of Br_2 ($^1\Sigma_g^+$) are given.

RCKP

1968

8561-11-1938

C.A. 1968. 08. 10

Bu

Singh S. P.
Mathur V. K.

1968

Di

Indian J. Pure
and Appl. Phys., 6,
N7, 386.

(Cell. Sig) IV

Br_2

(A)

1969

3 Б105. Полные сечения перезарядки между атомами щелочных металлов и молекулами галогенов. Bae-
de A. P. M., Moutinho A. N. C., Vries A. de E.,
Los J. Total cross sections for charge transfer between
alkali atoms and halogen molecules. «Chem. Phys. Let-
ters», 1969, 3, № 7, 530—531 (англ.)

Измерены относит. полные сечения перезарядки ато-
мов K, Na и Li на молекуле Br_2 . Эксперим. пороги иони-
зации равны соответственно 1,5, 2,3 и 2,5 эв. Эти пороги
отождествляются с разностью энергии ионизации и сред-
ства к электрону молекулы Br_2 . Отсюда для сродства по-
лучено значение 2,8 эв, что близко к величине, отвечаю-
щей адиабатич. переходу от Br_2 к Br_2^- . Кривые перезарядки
обработаны по формуле Ландау — Зинера, и для
этой модели неадиабатического перехода определены
энергетич. параметры и точка пересечения ковалентного
и ионного терма.

Е. Е. Никитин

Х. 1970. 3.

Cl_2 (vi)
 Br_2

U

1969

192

Cahill J. E., Leroy C. E.,
J. Chem. Phys., 1969, 51, 510, 43-14-4513
(ann)
Raman spectra of solid chlorine
and bromine.

6

Pukhov, 1970, 125328

5

Br₂

1969

3 Д249. Изучение ионизации Cs при столкновениях с Br₂ в пересекающихся пучках. Helbing R. K. B., Rothe E. W. Crossed-beam study of ionization of Cs by Br₂. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 4, 1607—1609 (англ.)

В пересекающихся пучках измерена зависимость от энергии сечения ионизации Cs при столкновениях с молекулой Br₂. Перекрыт диапазон энергий 1,5—16,5 эв (Ц-система). Нейтральные Cs получались путем перезарядки ионов и селективровались по скорости с помощью многодискового селектора, имеющего разрешение по скорости ~3,4%. Пучок Br₂ создавался многоканальным источником. Возникающие в реакции ионы Cs⁺ регистрировались по вторичной эмиссии электронов. Обнаружен четкий порог реакции при $1,66 \pm 0,1$ эв;

Ar

09. 1970.

3D

максимум сечения достигается при $\sim 6,0$ эв. С помощью известного потенциала ионизации Cs для энергии сродства Вг_2 к электрону получается значение $2,23 \pm 0,1$ эв, которое лежит между адиабатическим ($2,6 \pm 0,3$) и вертикальным ($1,2 \pm 0,5$) значениями этой величины. Тщательно проверялось предположение о независимости чувствительности детектора от энергии частиц пучка.

Ю. Н. Беляев.

Br

2

(A')

C.F.

1969. H. 20

1969

94888m Crossed-beam study of ionization of cesium by bromine. Helbing, Reinhard K. B.; Rothe, Erhard W. (Space Sci. Lab., Gen. Dyn./Convair, San Diego, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(4), 1607-9 (Eng). The velocity dependence of the relative cross section for the formation of Cs^+ from Cs and Br_2 has been measured in the center of mass (c.m.) energy range 1.5-16.5 ev. A crossed-mol.-beam technique was used. The threshold energy is 1.66 ± 0.1 ev. (c.m.). This leads to a nominal value of 2.23 ± 0.1 ev. for the electron affinity of Br_2 . A max. cross section is found near 6 ev. RCJQ

Br_2

ВР-ХТ-344

1969

спектр КР

10 Б226. Лазерные спектры комбинационного рассеяния, инфракрасные и видимые спектры жидкого и твердого брома под высоким давлением. Melveger A. J., Brasch J. W., Lippincott E. R. Laser Raman, infrared and visible spectra of liquid and solid bromine under high pressure. «Mater. Res. Bull.», 1969, 4, № 8, 515—523 (англ.)

Описана миниатюрная алмазная кювета, которая может быть использована как для получения ИК- и видимых спектров поглощения, так и для получения спектров КР жидких и твердых в-в при давлениях до 150 кбар. С помощью этой кюветы исследован спектр КР, возбуждавшийся линией 6328 А He—Ne лазера, жидк. и тв. Br_2 . Для жидкого Br_2 наблюдалась единственная полоса КР при 311 см^{-1} . Для тв. Br_2 , затвердевающего с образо-

Х. 1970

10

1
ванием поликристаллич. массы при давлении ~ 5 кбар эта полоса расщепилась на две компоненты: полоса 302 и интенсивная полоса 294 см^{-1} . На основе измерения степени деполяризации этих линий в спектре КР монокристалла Br_2 полосы 302 и 294 см^{-1} отнесены к A_g - и B_{2g} -компонентам (фактор-группа D_{2h}). Исследованы ИК-спектры поглощения Br_2 (жидкость, монокристалл). Наблюдались запрещенные полосы поглощения 310 и 310 см^{-1} (жидкость), 335 и 362 см^{-1} (монокристалл). Причины их появления пока не установлены. В видимом спектре поглощения жидкого и твердого Br_2 наблюдалось плечо полосы поглощения в области 5500—6500 Å.
А. Александров

Cl_2 , Br_2 , I_2 (М.Н. Гинзбург. Энергия) 1969

Steinfeld J. I. XI-4195

Int. J. Quantum Chem., Symp.,
1969 (Pub. 1970), 3, (Pt. 2), 615-616
(англ.)

Appearance of long-range
interatomic force in molecu-
lar potential curves.

10

Φ

CA 1970, 73, 118, 93028K

1969

Br₂ (кристал.)

10 Б230. Спектр комбинационного рассеяния кристалла брома. Suzuki Masako, Yokoyama Toru, Ito Mitsuio. Raman spectrum of the bromine crystal. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 5, 1929—1931 (англ.)

спектр
комб. рассеяния

Измерен спектр КР кристаллич. брома при 77° К. В низкочастотной области спектра обнаружено 5 линий: 53, 70, 82, 96 и 110 см⁻¹. Сравнение спектров кристаллич. Cl₂ и Br₂ показывает весьма близкое их сходство, на основании к-рого последние 4 линии отнесены к колебаниям классов B_{1g}, B_{2g}, A_g и B_{3g}. Линия 53 см⁻¹ по частоте совпадает с разрешенным в ИК-спектре колебанием кристаллич. решетки Br₂ класса B_{1u}. Ее появление в спектре КР возможно связано с дефектом в

X. 1970. 10

кристалле, либо с сильным электрон — решеточным взаимодействием. В спектре КР (Br_2) обнаружены также линии 301, 296 и 294 см^{-1} . Линии 296 и 294 см^{-1} отнесены к вал. кол. различных изотопич. вариантов молекулы $\text{Br}-\text{Br}$. Происхождение линии 301 см^{-1} может быть связано с фактор-групповым расщеплением в кристаллич. поле. Величина расщепления $\sim 6 \text{ см}^{-1}$ указывает на сильное межмолек. взаимодействие в кристаллич. Br_2 . Этот вывод подтверждается проведенным расчетом кол. кристаллич. Br_2 .

Г. Кузьянец

ВР-Х1-76

1969

Br₂

12 Б318. Спектр молекулы брома в вакуумной ультрафиолетовой области. Venkateswarlu Putcha. The vacuum ultraviolet spectrum of the bromine molecule. «Canad. J. Phys.», 1969, 47, № 22, 2525—2538 (англ.)

Спектр поглощения брома сфотографирован в области 1700—1170А с дисперсией 0,20—0,16 А/мм. В области 1510—1170А получено несколько систем, большинство к-рых образуют ридберговские серии. Пять из этих серий сходятся к пределу $85165 \pm 80 \text{ см}^{-1}$ (B_2^+ , $^2\Pi_{3/2g}$). Обсуждено небольшое отличие этой величины от данных фотоэлектронной спектроскопии. По-видимому, эти серии соответствуют переходам в состояния с конфигурациями (...) $np\sigma_u$, (...) $np\pi_u$, (...) $n f\sigma_u$, (...) $n f\pi_u$, (...) $n f\delta_u$, где (...) = ($\sigma_u^2 \pi_u^4 \pi_g^3 {}^3\Pi_{3/2g}$), $n=5, 6, 7, \dots$

спектр,
 $f_i, \delta_i;$
 δ_i

отмечено 856

Х. 1970. 12

или 4, 5, 6, ... Другие четыре серии сходятся к пределу $88306 \pm 80 \text{ см}^{-1}$. Верхние состояния первых членов этих серий отнесены к конфигурациям с ядром $(\sigma_g^2 \pi_u^4 \pi_g^3 \Pi_{1/2g})$. Волновые числа полос О—О всех указанных серий представлены как обычного вида функции от n . Верхним состояниям еще двух очень слабых серий приписаны конфигурации $(\sigma_g^2 \pi_u^3 \pi_g^4 \Pi_{3/2u}) 5s\sigma_g$ и $(\sigma_g^2 \pi_u^3 \pi_g^4 \Pi_{1/2u}) 5s\sigma_g$. Верхние состояния трех систем, не образующих серии, отнесены к типам $^1\Pi_u(1_u)$, $^3\Pi(1_u)$ и $^3\Pi(0_u^+)$ с конфигурациями $\sigma_g \pi_u^3 \pi_g^4 \sigma_u^2$. Все эти системы образуются при переходах из основного состояния; для них определены значения ω_0 . В области 1680—1500 Å получена еще одна система, наблюдавшаяся ранее в спектре флуоресценции. Д. И. Катаев

Br
2

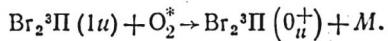
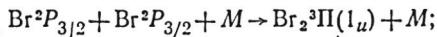
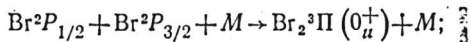
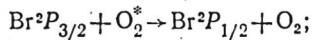
1 Д462. Перенос электронной энергии от $O_2(^1\Sigma_g^+, ^1\Delta_g)$ к диссоциированному бром. Clyne M. A. A., Coxon J. A., Cruse H. W. Electronic energy transfer to dissociated bromine by $O_2(^1\Sigma_g^+, ^1\Delta_g)$. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 6, № 1, 57—60 (англ.)

Произведено спектроскопич. исследование возмущения послесвечения брома синглетными метастабильными молекулами O_2 . Взаимодействие с молекулярным кислородом в состояниях $^1\Delta_g$ и $^1\Sigma_g^+$, имеющее характер химич. накачки, приводит к замене в послесвечении брома полос $A^3\Pi(1_u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ полосами $B^3\Pi(0_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ и к увеличению интенсивности люминесценции, обусловленному значительно большей вероятностью перехода с уровня $B^3\Pi(0_u^+)$. Предложены два механизма образования молекул $Br_2^3\Pi(0_u^+)$:

М.И.

9. 1971

12



Приведена таблица волн. чисел голов новых полос системы $\text{Br}_2^3\Pi(0_u^+) - \text{X}^1\Sigma_g^+$. Библ. 8. И. Дворников

ВФ-Х1-796

1970

Br₂

3 Б161. Колебательная нумерация состояния $A^3\Pi(1_u)$ брома. Сохон J. A., Clyne M. A. A. Vibrational numbering of the $A^3\Pi(1_u)$ state of bromine. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1970, 3, № 8, 1164—1165 (англ.)

(М. и.)

Представлены результаты колебательного анализа четырех полос поглощения слабой красной системы $A^3\Pi(1_u) \leftarrow X^1\Sigma_v^+$ молекулы Br_2^{79} . Вращательные константы (везде в см^{-1}) для переходов (v'', v') составляют: $(15,2)v_v'v'=14775,07$; $B_{v'}=0,042077$; $D_{v'} \cdot 10^7=1,63$; $\delta G_{v',1}=5,54$ (изотопич. разность для состояний Br_2^{79} и $\text{Br}_2^{79,81}$); соотв. $(15,3)$, $14456,24$; $0,042087$; $1,73$; $5,51$; $(14,3)$, $14395,775$; $0,043725$; $1,54$; $5,67$; $(13,3)$, $14328,41$; $0,04528$; $1,4$; $6,01$. Эффект λ -удвоения состояния $A^3\Pi(1_u)$ Br_2^{79} [для $v'=15$, полоса $(15,2)$] описывается выражением $F_+(J) - F_-(J) = (4,4 \pm 0,5) \times 10^{-5} J(J+1) \text{ см}^{-1}$ при $J=20-46$.
Б. В. Рассадин

Х. 1971. 1

Br₂

BP-XI-796

1970

u. n.

82274m) Vibrational numbering of the $A^3\Pi(1_u)$ state of bromine. Coxon, John A.; Clyne, Michael A. A. (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, Engl.). *J. Phys. B* 1970, 3(8), 1164-5 (Eng). Rotational anal. of 4 absorption bands of the weak $A^3\Pi(1_u) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ red system of $^{79}\text{Br}^{79}\text{Br}$ has been made. Accurate wave nos. for the band origins have been combined with earlier data for $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$ to obtain the vibrational numbering of the $A^3\Pi(1_u)$ state. It is necessary to increase Brown's provisional numeration for this state by 7 units. RCBS

C. A. 1970. 73. 16

1970

Br₂

(9)

10 Б804. Пороговая энергия молекулярной фотоионизации брома. Dibelер Vernon H., Walker James A., McCulloh K. E. Threshold for molecular photoionization of bromine. «J. Chem. Phys.», 1970. 53, № 12, 4715—4716 (англ.)

С помощью комбинации монохроматора вакуумного УФ-света и масс-спектрометра изучена фотоионизация Br₂. Получена зависимость выхода ионов Br₂⁺ (процесс Br₂ + hν → Br₂⁺ + e) от λ (1200—950 Å) при разрешении 0,7 Å. Обнаружены 3 пороговых значения λ: 1185, 1180 и 1174 Å. Выходы ионов, образующихся при λ 1180 и 1174 Å, не зависят от т-ры ионного источника, изменявшейся в интервале 198—378° К, тогда как выход ионов при λ 1185 Å уменьшается при уменьшении т-ры с энергией активации 323 см⁻¹, соотв-щей кванту колебательного возбуждения молекулы Br₂. Из этих данных сделан вывод, что пороговая энергия 0—0-перехода с образованием Br₂⁺ (²Π_{3/2}, g) равна 10,52 ± 0,01 эв (λ 1179 Å). В. Е. Скурат

X. 1971. 10

Br₂

1970

5 Д235. Порог фотоионизации молекулы Br₂. Diber-
ler Vernon H., Walker James A., McCall-
ion K. E. Threshold for molecular photoionization of
bromine. «J. Chem. Phys.», 1970. 53, № 12, 4715—4716
(англ.)

Изучена фотоионизация молекулы Br₂. При измерении
потенциала фотоионизации использовался вакуумный
УФ-монохроматор и масс-спектрометр. Анализ резуль-
татов, полученных в диапазоне 1200—950 Å с разреше-
нием 0,7 Å, и опыты с изменением т-ры от 378 до 198° К
однозначно показывают, что для 0—0-перехода в состоя-
ние иона ²Π_{3/2g} порог фотоионизации составляет 1179 Å
(10.52±0,01 эв). В. Александров

Ф. 1971. 5Д

Br₂

1970

photoionization
yield

16866a Threshold for molecular photoionization of bromine. Dibeler, Vernon H.; Walker, James Auld; McCulloh, Kenneth E. (Inst. Mater. Res., Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 1970, 53(12), 4715-16 (Eng). The onset of the 0,0 transition to the $^2\Pi_{3/2,g}$ state of Br_2^+ is at 1179 Å (1174 Å also given). Three onsets were obsd. in the threshold region of the photoionization yield curve of Br_2 . Onsets at 1180 and 1174 Å are temp. independent (198-378°K). The 1185-Å feature (reported by Venkateswarlu as the threshold of the 0,0 transition of the mol. ionization of Br) decreases with decreasing temp.: the slope corresponds to 1 vibrational quantum, 323 cm^{-1} , of initial excitation. FBJN :

C.A. 1971. 74. 4

XI-796

1970

Br₂ (u.m.)

Flouinoy J. M., Nelson L. Y.

Chem. Phys. Lett, 1970, 6, ~5,
521-524



HO

E. T. J. K.

Cl_2 ; Br_2 ; I_2 ; BrCl ; ICl ; IBr (Раман-эффект) 1970
(с А. Лазаров)

Holzer W.; Murphy W. F.; Bernstein
H. Y.

J. Chem. Phys. 1970, 52 (1), 399-407. XI-24

Resonance Raman effect and
resonance fluorescence in halogen
gases.

10 Лазаров. 2007

CA, 1970, 72, N10, 49383C

u. n. (I_2 , Br_2 , Cl_2) 11 1970

Holzer W., Murphy W.F., ~~XI~~ 245

Bernstein H.F.

ЕСТЬ ОРИГИН.

J. Chem. Phys, 1970, 52, 41, 469-470

Resonance fluorescence of iodine,
bromine and chlorine gases obtained
with argon-ion laser excitation.

Ru Xu, 1970, 135203

10 (9)

Br₂ 2

1970

4 Д440. Изучение с помощью ЭВМ диссоциации Br₂ в ударной волне. Ир J. K. K., Burns George. Computer study of Br₂ shock wave dissociation. «Can. J. Chem.», 1970, 48, № 18, 2860—2865 (англ.)

Рассчитан профиль ударной волны в Br₂ с использованием двух параметров: времени релаксации колебаний и средней энергии диссоциации молекул. Учтена сильная диссоциационно-колебательная связь, существенно меняющаяся заселенность колебательных уровней и колебательную т-ру. Расчет проведен в предположении, что имеются две колебательные т-ры: для верхних возбужденных и нижних уровней. Расчеты сопоставляются с эксперим. данными. Приведены измеренные значения коэф. поглощения на длине волны 440 мкм паров Br₂, нагретых в печи до т-р 300—1250° К и в ударной волне. Ю. Н. Живлюк

Д₀ в
уд. волне

ор. 1971. ЧД

Br₂

BP-XI-75

1970

мисл
физик
лазер
Боголюбог

71788f Simultaneous observation of resonance fluorescence and resonance Raman effect in gaseous bromine. Kiefer, Wolfgang; Schroetter, Heinz W. (Sekt. Phys., Univ. Muenchen, Munich, Ger.). *J. Chem. Phys.* 1970, 53(4), 1612-13 (Eng). A study of the scattering spectrum of Br gas at ~150-torr pressure with a quasicontinuous ruby laser indicates that the fundamental and first 2 overtones show a doublet structure; the band at 308 cm⁻¹ is depolarized and the 2nd band at 319 cm⁻¹ polarized; the former band and its overtones are due to fluorescence while the latter band and its overtones are due to a resonance Raman effect.

CJN

Gerstein

C.A. 1970.73.14

2 Б203. Одновременное наблюдение резонансной флуоресценции и резонансного комбинационного рассеяния в газообразном бrome. Kiefer W., Schröter H. W. Simultaneous observation of resonance fluorescence and resonance Raman effect in gaseous bromine. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 4, 1612—1613 (англ.)

Исследовано резонансное КР в газ. Br_2 при возбуждении линией $\lambda=694,3$ нм (область перехода $^3\Pi_{1u}$ Br_2) рубинового лазера средней мощности ~ 200 мвт. Измерения степени деполяризации линий, а также исследование влияния увеличения давления или добавления посторонних газов (криптона) на спектр позволили установить, что линии $\Delta\nu=308$ см^{-1} , 616 см^{-1} , 923 см^{-1} и 1229 см^{-1} — линии резонансной флуоресценции, а линии $\Delta\nu=319$ см^{-1} , 636 см^{-1} , 953 и 1270 см^{-1} — основной тон и обертоны резонансного КР. Небольшая интенсивность линий флуоресценции связана, по-видимому, с тем, что она начинается с высших кол. уровней $\nu''=5, 6, 7 \dots$ (переход на уровень $^3\Pi_{0u}+$).

А. Бобров

X. 1974. 2

BP-XI-306

I970

Br₂

LeRoy R.J., Bernstein R.B.

J.Chem.Phys.Lett., 5,42;

g₀
~~Dissociation energies of diatomic
molecules from vibrational spa-
cings of higher levels.~~

(Cu, Cl₂) IV
(Fe) -

1970

Br₂

149144k Flash photolysis of thiophosphoryl bromide. Malicet, Jacques; Prudhomme, Jean C.; Mongin, Jacques (Lab. Chim. Phys., Fac. Sci., Reims, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. C* 1970, 271(25), 1510-13 (Fr). Flash photolysis of a gaseous mixt. of PSBr₃ and Ar gave evidence of an absorption spectrum contg. 2 systems of bands. One system of ~50 bands is attributed to ${}^2\pi_{out} - {}^1\Sigma_g^+$ of Br₂, complicated by the existence of the 2 isotopes ${}^{79}\text{Br}$ and ${}^{81}\text{Br}$. The other system is evidently caused by an undetd. free radical.

A. J. Miller

M.N.

⊕ III, esuy

C. A. 1971. 74.26



1970

Br₂

7 Д424. Спектры комбинационного рассеяния Br₂ и CS₂ в твердом и жидком состоянии при высоких давлениях. Melveger A. J., Brasch J. W., Lippincott E. R. Laser Raman spectra of liquid and solid bromine and carbon disulfide high pressure. «Appl. Optics», 1970, 9, № 1, 11—15 (англ.)

Исследованы спектры комб. рас. Br₂ и CS₂ в твердом и жидком состоянии при давлениях до 17 кбар. Спектры комб. рас. в кювете с алмазными окнами малой площади удалось зарегистрировать благодаря использованию интенсивных лазерных источников. Спектры комб. рас. жидкого Br₂ содержат одну линию, обусловленную единичным колебанием ν_1 . При увеличении давления Br₂ кристаллизуется и линия ν_1 расщепляется на 2 компо-

 ν_1

ф. 1970. 78

+1

[X]

ненты, что обусловлено межмолекулярным взаимодействием в кристаллах Br_2 . Компоненты расщепления имеют разную степень деполяризации, что указывает на их разную симметрию. Полносимметричные колебания ν_1 линейных молекул CS_2 имеют дублетную структуру как в жидкости, так и в кристаллич. фазе. Степень деполяризации компонент дублета одинакова, что позволяет связать расщепление с наличием смеси двух изотопов серы в составе CS_2 . Интенсивное облучение кристаллов CS_2 при высоком давлении вызывает необратимые структурные изменения, приводящие к появлению включений темно-коричневого цвета. Библ. 18. С. П.

B₁₂

Steinfeld Y.Y.

1970

и.и.,
ср-иш
потенц.
энергии

Int. J. Quantum
Chem., Symp., 1969,

(Pub. 1970), 3, Pt 2, 615.

(C₆₀ H₂)_{IV}

XI-758

1970

Br₂, CN / ф-улы нонел.
Ж.)

Vaidyan V.K., Santaram L.,
Indian J. Pure Appl. Phys.,
1970, 8, N 4, 233-4

ЕСТЬ ф. н.

10

Br_2 ; N_2^+ ; P_2 (ap-yuu noterus. sherpun) 1970
Vaichyan V.K.; Santaram C. 13 11
Proc. Phys. Soc., London (At. Mol. Phys.)
1970, 3(1), 16-20. [J. Phys., (B)]

Estimated potential energy curves
of diatomic molecules: a simplified
procedure.

10



6 Oct 1970
CA, 1970, 72, N12, 592954.

Br₂

I970

Vaidyan V.K., Santaram C

J.Chem.Phys., 52, 3068

Rapid method to construct "True"
potential curves of diatomic mo-
lecules.

(cell, CN) III

1971

Bu₂-
cu. red ob.

Boyd R.F.,
Whitehead M.A.

J. Chem. Soc.,

1971, A, ~22, 3549.

(Cu. BM) III

Сравнение орбит. первых и новых
попыток новонаблюдения (9V)
Система паралеллов.

М-ла	Орбит.	I	II	III	IV	Желер.
Вч ₂	Пг	11.13		11.44		10.71 Пг
	Пн	13.82		13.51		12.52 Пн
	Сг	13.83		13.51		14.44 Сг
	Сн	20.42		21.90		
	Сд	29.50		25.98		

XI-883

1971

Br₂ (смерть)

Capelle G., Sakurai K.,
Broida H.P., J. Chem. Phys.,
1971, 54, N4, 1728-30

$F_2, Cl_2, Br_2, IBr, I_2 (A)$ $\frac{11}{11}$ 2678 1971

$F_2 (D_0)$
Chupka W. A. Berkowitz J.
J. Chem. Phys., 1971, 55, N6, 2724-33
(ann.)

Electron affinities of halogen
diatomic molecules as deter-
mined by endoergic charge
transfer.

1-0 10



CA, 1971, 75, N18, 113065

Br₂ (u. n.)

11

1971

XI 802

Coxon J. A.,

J. mol. Spectrosc.,

1971, 37, v. 1, 39-62
(avv)

The B³Π (O_u⁺) ← X¹Σ_g⁺ system
of ⁷⁹Br ⁷³Br.

у неєсїб
в мїсїс
в мїсїс

Есть оригинал.

Результат

Результат, 1971, 156123

Есть оригинал.

10

⊕

XI 902

1971

Cl_2 , Br_2 (критическое давление.)

Coxon J. A.

J. Quant. Spectrosc. Radiant Transf.

1971, 11(5), 443-62

pacem was. imprints, vol. 11, no. 11 / 1971
(F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 , ClF , BrF , IF , $BrCl$,
 ICl , IBr , ClF_3 , BrF_3 , IF_3 , ClF_5 , BrF_5 , IF_5 ,
 IF_7 , BrF_7 , ClF_7) " XI-1492

Del B.M., Coulson C.A.,

J. Chem. Soc., 1971, A, 18, 958-970 (auth).
CNDO/2 and INDO allvalence-electron
calculations on the geometry and proper-
ties of some inter-halogens
J. Chem. Soc., 1971, 21530
10

F_2, Cl_2, Br_2, I_2 (A) Cl, Br, I Σ 905 1971
chem. properties (all) F, F

DeLorpo H. J., Franklin J. L., 4 10
J. Chem. Phys., 1971, 54(5), 1885-8 (am)

Electron affinities of the halogen
molecules by dissociative electron
attachment

(chem. properties) 10 6 CA, 1971, 24(20) 103199

(F₂, Cl₂, Br₂, I₂, ICl, IBr) $\bar{x}$ 2743 1971

Dibeler V.H., Walker J.A., McCullon K.E.,
Rosenstock H.M.

3rd Int. Conf. Vacuum Ultraviolet
Radiat. Phys., Tokyo, 1971, Conf.

dig., Tokyo, 1971, 1pA1-4/1-1pA1-4/4
(carew.)

Effect of hot bands on the ion-
ization threshold of some diatomic
halogen molecules.

See Xuv, 1972, 65118

to 9



F₂, Cl₂, Br₂, ICl, IBr (Do, I) " 1971

Dibeler V.H., Walker J.A., McCullon
K.E., Rosenstock H.M., XI 2744

Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.
1971, 7, N3, 209-219 (ann.)

Effect hot bands on the ionization threshold of some diatomic halogen molecules.

Proc Phys, 1972, 3D332 to 5 (4)

J, u. n, Ei (Cl_2 , Br_2 , I_2 , ICl , IBr_2) ¹⁹⁷¹

Evans S, Orchard A F. XI 1513

Inorg. chim. acta Revs, 1971, 5, v1
81-85 (annu.)

The helium (I) photoelectron
spectra of some halogens and
diatomic interhalogens.

● 10

Pmc quz., 1971, 11 359

Emm f. k.

Br_2

Cheska W. A., et al. 1971

I^-

J. Chem. Phys., 1971,
55, ~6, 2724.

● $(\text{C}_{60}\text{H}_{12})^{\text{II}}$

Br₂

1971

check

81342r Lifetime and self-quenching cross sections of vibrational levels in the B state of bromine excited by a tunable dye laser. Capelle, Gene; Sakurai, Katsumi; Broida, H. P. (Dep. Phys., Univ. California, Santa Barbara, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(4), 1728-30 (Eng). A tunable dye laser was used to excite selected vibrational levels between $v' = 1$ and 31 of the $B^3\Pi_{0u}^+$ state of Br₂. Lifetimes and self-quenching cross sections were measured by observing the direct decay of fluorescence as a function of pressure. Large variations of lifetimes and cross sections were found; the lifetimes varied by a factor of 8, ranging from $>1.2 \mu\text{sec}$ near $v' = 27$ to $<0.15 \mu\text{sec}$ near $v' = 14$. Two min. of lifetimes near $v' = 1$ and 14 can be explained by decay of the B state by means of spontaneous predissocn. through dissociative states.

RCJQ

(+1) III, obs

C.A. 1971. 74. 16



1971

Вч₂

8 Д821. Изучение рекомбинации атомов брома в широком интервале температур с помощью импульсного фотолиза. III. Br₂ в Xe, CF₄ и SF₆. Chang S. K., Clarke A. G., Burns G. Recombination of Br atoms by flash photolysis over a wide temperature range. III. Br₂ in Xe, CF₄, SF₆. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 4, 1835—1837 (англ.)

иссл.
фотолиз

Методом импульсного фотолиза изучена температурная зависимость коэф. скорости рекомбинации атомов брома в области от 300 до 1273° К в присутствии Xe и до 800° К в присутствии CF₄ и SF₆. Даны эмпирич. ф-лы, хорошо описывающие эксперим. результаты. Показано, что константа скорости рекомбинации увеличивается с ростом молекулярного веса инертного газа и что CF₄ и SF₆ являются самыми эффективными из изученных в-в, за исключением Br и Br₂. Результаты объяснены с точки зрения образования промеж. комплекса радикал—молекула. Ч. II см. РЖФиз, 1970, 4Д273. П. Ш.

Ф. 1971. 870

Br₂

1971

5 Д241. Возбуждение молекул брома в электронное состояние $B^3\Pi(O_u^+)$ при рекомбинации атомов Br, находящихся в основном состоянии $2P_{3/2}$. Clyne M. A. A., Coxon J. A., Woon-Fat A. R. Electronic excitation of bromine to the $B^3\Pi(O_u^+)$ state in the recombination of ground state $Br^2P_{2^3}$ atoms. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 11, 3155—3165 (англ.)

(спектр)

✓ Экспериментально исследуются спонтанные переходы с колебательных уровней $v \leq 9$ электронного состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ молекул Br_2 , образуемых в результате рекомбинации атомов Br ($2P_{3/2}$) при т-ре $298^\circ K$ и общем давлении ~ 1 мм рт. ст. С помощью принципа Франка — Кондона из измерений относит. интенсивностей линий на переходе $B^3\Pi(O_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ определены относит. заселенности различных колебательных уровней состояния $B^3\Pi(O_u^+)$. Эти заселенности для уровней $5 \leq v \leq 9$ характеризуются т-рой $298^\circ K$, однако заселенности нижних уровней $0 \leq v \leq 4$ значительно меньше равновесных. По мнению авторов, это говорит о том, что рекомбинация атомов Br в состояние $B^3\Pi(O_u^+)$ происходит в основном на 5-й колебательный уровень. Б. Ф. Горднеев

Ф. 1972.5D

Вч₂

спектр

РЖ, 1972, №9

9 Б160. Возбуждение электронного состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ молекул брома при рекомбинации атомов Br в основном состоянии $^2P_{3/2}$. Clyne M. A. A., Coxon J. A., Woon-Fat A. R. Electronic excitation of bromine to the $B^3\Pi(O_u^+)$ state in the recombination of ground state $Br^2P_{3/2}$ atoms. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 11, 3155—3165 (англ.)

Обнаружено излучение из состояний $B^3\Pi(O_u^+)$, $v' \leq 9$ молекул Br_2 , образованных при рекомбинации атомов Br ($^2P_{3/2}$) при т-ре 298° К и давлении ~1 мм. Из относит. интенсивностей колебательных полос системы $B \rightarrow X$ с использованием вычисленных факторов Франка—Кондона оценены заселенности колебательных состояний уровня $B^3\Pi$. Отмечено, что заселенность уровней с $5 \leq v' \leq 9$ подчиняется распределению Больцмана, а заселенности уровней с $v' \leq 4$ ниже больцмановских. Рассмотрены различные механизмы возбуждения молекул Br_2 и показано, что наиболее вероятен механизм столкновительного возбуждения с прохождением через барьер ~600 см⁻¹.

М. Р. Алиев

1761

Br₂

1941

85746 Electronic excitation of bromine to the $B^3\Pi(0_u^+)$ state in the recombination of ground state $Br\ ^2P_{3/2}$ atoms. Clyne, M. A. A.; Coxon, J. A.; Woon-Fat, A. R. (Queen Mary Coll., Univ. London, London, Engl.). *Trans Faraday Soc.* 1971, 67(Pt. 11), 3155-65 (Eng). Emission was obsd. from $v' \leq 9$ of the $B^3\Pi(0_u^+)$ state of Br_2 formed in the recombination of 2 ground-state $Br(^2P_{3/2})$ atoms at 298°K and near 1 torr total pressure of Ar. Measurements of relative band intensities of the $Br_2(B \rightarrow X)$ system were combined with Franck-Condon factors to show that the vibrational population distribution is thermal for 298°K in the range $5 \leq v' \leq 9$, but that the lower levels $0 \leq v' \leq 4$ are populated to only a small extent under these conditions. The results suggest that recombination of 2 $Br(^2P_{3/2})$ atoms into the $B^3\Pi(0_u^+)$ state occurs in the vicinity of $v' = 5$ via a potential energy barrier of approx. 600 cm^{-1} .

C. A. 1942. 76.2

971

Br₂

12 Д127. Расчет кривых потенциальной энергии двухатомных молекул: применение к молекулам галогенов. Сохон J. A. The calculation of potential energy curves of diatomic molecules: application to halogen molecules. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1971, 11, № 5, 443—462 (англ.)

расчет
потенц.
кривых

Рассмотрены существующие методы вычисления поворотных точек потенциала двухатомной молекулы, знание которых необходимо для построения кривых потенц. энергии методом Ридберга—Клейна—Риса. Получены приближенные аналитич. выражения для поворотных точек через энергии колебательных уровней, которые использованы для вычисления положений поворотных точек потенц. кривых для основных электронных состояний Cl₂, Br₂, J₂ и возбужденных состояний ³Π(O_u⁺) Cl₂ и Br₂.

М. Р. Алиев

● см. также Cl₂ (iii)

Ф. 1971. 12 Д

ⓧ

Br₂

Bqp-802-XI

1971

u.u.]

36584k $B^3\Pi(0_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ system of molecular bromine-79.
Coxon, John A. (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 37(1), 39-62 (Eng). The ($B^3\Pi(0_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) absorption system of $^{79}\text{Br}_2$ has been recorded at high resolu. between 6350 and 7700 Å. More than 4500 lines with $J \leq 120$ from 28 new bands were analyzed and measured to within 0.02 cm^{-1} . The 1st accurate data for the vibrational levels ($1 \leq v' \leq 9$ and $4 \leq v'' \leq 10$) were obtained. The derived consts. reproduce all the obsd. lines to within 0.02 cm^{-1} . Rotational consts. of the ground state from a resonance fluorescence series of Br_2 are not compatible with the present data. Potential energy curves for the 2 rotationless states are reported, and new consts. are listed. RCKP

C.A. 1971. 74. 8

Вар-802-XI

1971

15 Б123. Система $B^3\Pi(O_u^+) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ Br⁷⁹Br⁷⁹. Соп-
 обп J. A. The $B^3\Pi(O_u^+) X^1\Sigma_g^+$ system of ⁷⁹Br⁷⁹Br. «J.
 Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 1, 39—62 (англ.)

В области 6350—7700 Å исследован с высоким разре-
 жением спектр поглощения молекулы ⁷⁹Br₂. Идентифи-
 цирована колебательная структура системы полос
 электронного перехода $B^3\Pi(O_u^+) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ и вращатель-
 ная структура 28 новых колебательных полос этой си-
 стемы. Определены значения констант молек. постоянных:
 $T_e'(B) = 15902,51 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e'' = 325,29$, $\omega_e' = 167,55$, $\omega_e''x_e'' =$
 $= 1,072$, $\omega_e'x_e' = 1,265$, $B_e'' = 0,082121$, $B_e' = 0,059579$,
 $10^4\alpha_e'' = 3,223$, $10^4\alpha_e' = 4,868$, $10^8D_e'' = 2,095$, $10^8D_e' =$
 $= 3,09 \text{ см}^{-1}$; $R_e'' = 2,2808$ и $R_e' = 2,6777$ Å. Методом Рид-
 берга — Клейна — Риса построены кривые потенциа-
 льной энергии уровней B и X. М. Р. Алиев

X.1971.15

ВФ-802-XI

1971

Br₂

У 8 Д360. Спектр поглощения молекулы $^{79}\text{Br}_2$ (система $B^3\Pi(0_u^+) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$). Сохон J. A. $B^3\Pi(0_u^+) X^1\Sigma_g^+$ system of $^{79}\text{Br}^{79}\text{Br}$. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 1, 39—62 (англ.)

(M. n.) Получены спектры полос поглощения молекулы ^{79}Br в области 6350—7710 Å (переход $B^3\Pi(0_u^+) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$) с дисперсией 0,63—0,95 Å/мм. Впервые зарегистрированы более 4500 вращательных линий с $J \leq 120$ для 28 новых полос ($1 \leq v' \leq 9$ и $4 \leq v'' \leq 10$) с точностью до $0,02 \text{ см}^{-1}$. На основании анализа структуры полос рассчитаны надежные вращательные и колебательные константы, а также потенц. кривые верхнего $B^3\Pi(0_u^+)$ - и нижнего $X^1\Sigma_g^+$ -

состояний молекулы $^{79}\text{Br}_2$. Приведены спектры поглощения и таблицы частот вращательных линий; рассчитаны константы состояний $X^1\Sigma_g^+$ и $B^3\Pi(0_u^+)$ для молекул $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$ и $^{81}\text{Br}_2$. Библ. 25. В. Александров

Ф. 1971. 82

1924

9 Д175. Электронное сродство молекул галоидных соединений, определенное из реакций диссоциативного прилипания электронов. DeCorpo J. J., Franklin J. L. Electron affinities of the halogen molecules by dissociative electron attachment. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 5, 1885—1888 (англ.)

С помощью масс-спектрометра времяпролетного типа определено электронное сродство (ЭС) молекул галогенов. ЭС определялось из процесса $RX_2 + e \rightarrow X_2^- + R$, где $(R)X_2 = (CCl_2)Cl_2, (CBr_2)Br_2, (CJ_2)J_2, (CHJ)J_2, (BF)F_2$, измерением потенциалов появления и средней поступательной энергии. Найденные значения ЭС равны в (эВ) 2,5 (Cl_2), 2,9 (Br_2), 2,6 (J_2), 2,9 (F_2). Табулированы ранее известные ЭС.

А. Резников

см. также Cl_2

+ 3.



Ф. 1971. 92

Br. ~~II~~ (2i, J)

XI 808 1971

Joshi Y. N., Budhiraja C. J.,

Can. J. Phys., 1971, 49,

N6, 670-77

10

Есть оригинал.

Вч₂

1971

межъядер.
потенциал

6 Б24. Анализ дальнотействующих межъядерных потенциалов в состоянии $B(^3\Pi_{ou}^+)$ молекул Br_2 и Cl_2 . Le Roy Robert J. Analysis of the longrange internuclear potentials of $B(^3\Pi_{ou}^+)$ -state Br_2 and Cl_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 39, № 1, 175—179 (англ.)

Графическим методом Ствалли (см. РЖХим, 1971, 10Б61) определены постоянные C_6 при члене R^{-6} в дальнотействующей части межъядерного потенциала состояния $B(^3\Pi_{ou}^+)$ молекул Cl_2 и Br_2 . Найденные значения C_6 равны соотв. $0,42 \cdot 10^6$ и $1,01 \cdot 10^6 \text{ А}^6 \cdot \text{см}^{-1}$.

А. Резников

(+1)

(см. Cl_2 , III)

РЖХ, 1972, 26

Cl₂, Br₂, I₂ (Do) XI 793 1971

LeRoy R.Y., Bernstein R.B.,

J. Mol. Spectrosc., 1971, 37, No. 1,
suppl. 109-30 (ann.)

Dissociation energies and
long-range potentials of
diatomic molecules from
vibrational spacings: halogens.

10

(D)

CA, 1971, 74, N8, 36529W

Br₂

Mulliken R. S. [1971]

G. P. S.

J. Chem. Phys., 1971,
55, 288

43

Br₂ m. n.

Вч₂

1971
Харманов м.с.
и др.

м.
ср-ра;
у

Тер. и экперим.
химия 1971, I, №
240-243.

• (См. С₂)IV

$I_2, Cl_2, Br_2, ICl, IBr$ (I, Vi, ^{нормену.}
_{кривие}) 1971

Potts A.W., Price W.C., XI 2648

Trans. Faraday Soc., 1971, 67, N5,

1242-1252 (ann.)

Photoelectron spectra of the
halogens and mixed halides
 ICl and IBr .

BrePuz, 1972, 10369

10 | 2 (P).

Br₂

1974

de

(25631t) Systematic error in beam-gas experiments: the electron affinity of molecular bromine. Comments. Rothe, Erhard W.; Fenstermaker, Roger W. (Res. Inst. Eng. Sci., Wayne State Univ., Detroit, Mich.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(10), 4520-2 (Eng). The discrepancy of 0.6 eV for the electron affinity of Br₂, as obtained from a beam-gas expt. and from crossed beams, is ascribed to thermal motion of the targets. The cross beam technique can be considered for threshold expts. For the highest accuracy, the thermal distribution should be folded in.

C.D. 1974. 75. 4.

1971

Br₂

21 Б965. Систематическая ошибка в экспериментах с газовыми пучками. Сродство к электрону Br₂. Rothe Erhard W., Fenstermaker Roger W. Systematic error in beam-gas experiments: the electron affinity of Br₂. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 10, 4520—4522 (англ.)

Обсуждается различие в 0,6 эв величины сродства к электрону Br₂, полученных при столкновении молекул Br₂ с атомами щел. металлов в прямом пучке и скрещенных пучках. Различие связывается с учетом тепловой скорости движения атомов щел. металлов в 1-м методе.

Ю. Г. Афанасенкова

(A)

III



X-1971-21

1971

Br₂⁻ (aq)

93336e Unstable intermediates. LXXXII. Electron spin resonance spectra of the species Br₂⁻, I₂⁻, BrOH⁻, and IOH⁻ in γ -irradiated frozen aqueous solutions of alkali-metal halides. Symons, Martyn C. R.; Marov, I. N. (Dep. Chem., Univ. Leicester, Leicester, Engl.). *J. Chem. Soc. A* 1971, (1), 201-4 (Eng). Exposure of aq. solns. of alkali-metal bromides or iodides to ⁶⁰Co γ -rays at 77°K gave OH radicals, Br₂⁻ or I₂⁻, and species identified as BrOH⁻ or IOH⁻. The resulting magnetic parameters are compared with those for V_K centers in alkali halide crystals, and with ClOH⁻ in SrCl₂.6H₂O. Argentite and mercuric iodide complexes in frozen aq. soln. gave only I₂⁻ under these conditions. RCGF

(73)

C. S. 1971. 74. 18



$I_2, Br_2, Cl_2, K_2, Na_2, Li_2, Cs_2, NO_2,$
 $ClO_2, BaO, MgO, PbO, AlO, TiO,$
 CuO (u.u.) VII 6530

Sakurai K.,
Bunko Kenkyu, 1971, 20, N3,

113-20
Spectroscopy of Laser induc-
ed fluorescence

to (97)

CA72

Br₂

1971

(53088q) Ion decay studies in photoionized bromine. Truby, Frank K. (Sandia Lab., Albuquerque, N. Mex.). *Phys. Rev. A* 1971, [3]4(1), 114-21 (Eng). The loss processes of ions obsd. in photo-ionized Br₂ have been studied by detg. the time dependence of the ion no. ds. in the afterglow using quadrupole mass anal. techniques. The most abundant initially obsd. neg. ion was Br⁻. This species was found to convert to Br₃⁻ in the afterglow by the 3-body reaction $\text{Br}^- + 2\text{Br}_2 \rightarrow \text{Br}_3^- + \text{Br}_2$. The coeff. for the process was $k_c = 2.9 \times 10^{-29} \text{ cm}^6/\text{sec}$ at 296°K. The neg.-ion-pos.-ion ambipolar diffusion coeffs. (D_{ap}) for Br⁻ and Br₃⁻ were 12.9 and 7.5 cm² torr/sec, resp. The Br₃⁻ species decays mainly by ion ambipolar diffusion. The pos. ion species Br⁺, Br₂⁺, and Br₃⁺ were obsd. in the afterglow. Of these, the Br₂⁺ ion was initially most abundant. Although a rapid reaction involving Br⁺ takes place in the early afterglow, Br₂⁺ and Br₃⁺ decay mainly by diffusion. D_{ap} for the Br₂⁺ was detd. to be 12.6 cm² torr/sec for the case where the electron no. d. has decayed to zero and the predominant neg. ion was β₃⁻. The ambipolar diffusion coeff. for Br₃⁺ was essentially identical to that for the Br₃⁻ ion under the conditions where the Br₃⁺ ion and Br₃⁻ ion were the predominant ion species present.

promono
reerayes

C. A. 1971. 45

Cl₂

Br₂

BP- XT-2951 1982

Br₂

I₂

IBr

O₂

NO₂

(A)

24937b Adiabatic electron affinities of molecular chlorine, molecular bromine, molecular iodine, iodine bromide, nitrogen dioxide, and molecular oxygen. Baede, A. P. M. (FOM-Inst. Atoom-Molecuulfys., Amsterdam, Neth.). *Physica (Utrecht)* 1972, 59(3), 541-4 (Eng). Electron affinities reported previously (B. and Los, J., 1971; Moutinho, A. M. C., B., and L., 1970) are cor. for the effect of the thermal motion of the target gas. Improved (lower) values are reported for the adiabatic electron affinities of Br₂, Cl₂, I₂, and IBr, and for the electron affinities of O₂ and NO₂.

C.A. 1982. 77.4



(+5)



Br₂

1972

92373u Extreme red absorption spectrum of molecular bromine, $A^3\Pi(1_u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Coxon, J. A. (Queen Mary Coll., Univ. London, London, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(3), 548-65 (Eng). The ($A^3\Pi(1_u) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$) absorption band system of Br₂ was fully investigated for the 1st time at high resolution. About 1500 lines with $J'' \leq 79$ of 32 bands were measured to ≤ 0.02 cm⁻¹. Accurate vibrational terms and rotational consts. of the A state of ⁷⁹Br₂ were found for $7 \leq v' \leq 24$. Two bands of ⁸¹Br₂ were also analyzed, and confirm the numbering of the A-state vibrational levels. The derived consts. reproduce the obsd. lines to within 0.03 cm⁻¹.

$A^3\Pi - X^1\Sigma_g^+$
g

C. A. 1972.76.16

Br_2

✓ 1 Д305. Спектр поглощения Br_2 в крайней красной области: переход $A^3\Pi(1u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Сохон J. A. The extreme red absorption spectrum of Br_2 , $A^3\Pi(1u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 41, № 3, 548—565 (англ.)

1972

м. н.

Впервые полно исследован спектр поглощения молекулы Br_2 в красной области (переход $A^3\Pi(1u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$). Использование прибора высокой разрешающей силы, многоходовой кюветы, варьруемой т-ры и разделенных изотопов $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$ позволило провести детальный анализ структуры 32 полос. Приведены таблицы частот вращательных линий и рассчитанные значения колебательных и вращательных констант состояний $A^3\Pi(1u)$ и $X^1\Sigma_g^+$. Выполнен также анализ двух полос системы $A^3\Pi(1u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ молекулы $^{81}\text{Br}_2$. С помощью полученных констант зарегистрированный спектр воспроизводится с точностью до 0.03 см^{-1} . Библ. 16. В. Александров

Р.М.Ф/993. 1

1972

Br₂

1 Б172. Спектр поглощения Br₂ в крайней красной области. Система полос $A^3\Pi(1_u) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. Сохон J. A. The extreme der absorption spectrum of Br₂, $A^3\Pi(1_u) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 41, № 3, 548—565 (англ.)

m.v.

Исследован с высоким разрешением спектр поглощения молекулы ⁷⁹Br₂ в крайней красной области. Проведен анализ вращательной структуры ряда колебательных полос системы электронного перехода $A^3\Pi(1_u) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$. Определены значения вращательной B_v и центробежных D_v и H_v постоянных; а также постоянной Ω -удвоения уровня $A^3\Pi(1_u)$. Исправлена существующая в лит-ре нумерация ряда полос.

М. Р. Алиев

x. 1973 N1

1979

Br₂

92437t Franck-Condon factors and r -centroids for halogen molecules. III. $A^3\Pi(1)-X^1\Sigma^+$ system of molecular bromine-79, -81. Coxon, J. A. (Queen Mary Coll., Univ. London, London, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(3), 566-76 (Eng). New spectroscopic data for the vibrational and rotational const. of

noivenu, quail

oo
partopon oo
1-12

$Br_2 A^3\Pi(1_u)$ have allowed a calcn. of the 1st Rydberg-Klein-Rees-Vanderslice potential energy curve for this state. A semiempirical method for extrapolation of the rotational const. to the potential min. is described. Franck-Condon factors and r -centroids for the $A^3\Pi(1)-X^1\Sigma^+$ system of $^{79}Br^{81}Br$ are reported for vibrational quantum nos. $0 \leq v'' \leq 23$, $0 \leq v' \leq 28$. An est. for the radiative lifetime of the A state is reported.

L. J. J. J.

C.A. 1972. 76. 16

Br₂

B9-2465-XI 1972

160268r Franck-Condon-factors and r-centroids for halogen molecules. II. $B^3\Pi(0^+_{\mu})-X^1\Sigma^+_g$ system of $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$. Coxon, J. A. (Queen Mary Coll., Univ. London, London, Engl.). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1972, 12(4), 639-50 (Eng). Franck-Condon factors and r centroids are reported for the $B^3\Pi(0^+_{\mu}) - X^1\Sigma^+_g$ system of $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$. The ranges of vibrational quantum nos. considered are $0 \leq v' \leq 44$ and $0 \leq v'' \leq 27$.

quantum
no. - K.

C. A. 1972-76. 26

1972

М. Р. Алнев

X. 1882. 19

I_2^+ ; Br_2^+ ; Cl_2^+ ; I_3^+ ; Br_3^+ ; Cl_3^+ ; I_2F_2 ; $\text{XI } 3786$
 $\text{Cl}_3^+ + \text{AsF}_6^-$; $\text{Cl}_2\text{F}^+ + \text{AsF}_6^-$; $\text{ClF}_2 + \text{AsF}_6^-$;
 $\text{BrF}_2 + \text{AsF}_6^-$; $\text{ICl}_2^+ + \text{SbCl}_6^-$;
 $\text{I}_2\text{Cl} + \text{SbCl}_6^-$ (vi, сел. ное) $\text{XI } 3786$

Gillespie R. J.; Morton M. J.;
Lowa J. M., Nelson. Raman
Spectrosc., 1972, 1, 539-45-

10 (CP)

5 CUTS

1972.

Br₂notenys.
krub.

158215y Outer vibrational turning points near dissociation in the $B(^3\Pi_{0u}^+)$ state of molecular bromine and molecular chlorine. Goscinski, O. (Dep. Quantum Chem., Univ. Uppsala, Uppsala, Swed.). *Mol. Phys.* 1972, 24(3), 655-9 (Eng). A [1, 0] Pade approximant to the long-range interaction energy was used to describe the outer limb of the Rydberg-Klein-Rees curve of the state $B(^3\Pi_{0u}^+)$ of Br₂ and Cl₂. Empirical values of C_3 and C_6 are obtained.

C.A. 1972. 77, N24.

⊕ ⊗

Br_2

1972.

З Д156. Внешние колебательные точки поворота вблизи границы диссоциации для $B(^3\Pi_{0u}^+)$ состояния молекул Br_2 и Cl_2 . Goscinski O. Outer vibrational turning points near dissociation in the $B(^3\Pi_{0u}^+)$ state of Br_2 and Cl_2 . «Mol. Phys.», 1972, 24, № 3, 655—659 (англ.)

потенц.

Ридберга

Предлагается использовать аппроксиманту Паде (или аппроксимацию $V(R) = (C_n/R^n) \{1 - (C_p/C_n) R^{p-n}\}^{-1}$) для аналитич. описания потенциала Ридберга — Клейна — Риса состояния $B(^3\Pi_{0u}^+)$ молекул Br_2 , Cl_2 на больших расстояниях вблизи границы диссоциации. Найдены величины постоянных C_5 и C_6 ; при этом отмечается достоинство предлагаемой аппроксимации, связанное с тем, что C_5 , C_6 определяются свойствами разделенных атомов.

А. Зембеков

ф. 1973. № 3 -

(+1)



$\text{Cl}_2, \text{Br}_2, \text{I}_2$ (Bv, parrem) / $\bar{x} 3073$ 1972

de Roy R. J.,

Can. J. Phys., 1972, 50, N10, 953-959
(anul.)

Dependence of the diatomic
rotational constant B_0
on the long-range internu-
clear potential.

JHEPUS, 1972, 11D176 10

7 (9)

O_2, Br_2, N_2, PN, Pa (p-уни numbers.) 1972
Szoke S., ^{неприм} $\overline{X} 3084$

Acta Chim. (Budapest), 1972, 71, N2,
231-8 (anim.)

545

Semiempirical method for constructing potential energy functions of diatomic molecules

10



CA, 1972, 76, N20, 117716 Y

~~Factorial~~ F_2, Cl_2, Br_2, I_2 (D₀, M.N.) 1972

Turner Y. (J.B.) XI 3086.

MTP (Med. Tech. Publ. Co.) Int. Rev. Sci.:
Inorg. Chem., Ser. One, 1972, 3, 253-91
(anal.)

Physical and spectroscopic
properties of the halogens.

10
~~for optical~~



3

CA, 1972, 76, 119139m

Br_4 (Kr).
 Br_2

1972

сущ.

19 Б197. Ультрафиолетовые спектры простых и двойных молекул газообразного брома. Wen Walter Y., Noyes Richard M. Ultraviolet spectra of single and double molecules of gaseous bromine. «J. Phys. Chem.», 1972, 76, № 7, 1017—1018 (англ.)

УФ-спектры поглощения брома, измеренные в парах при 30° в области 220—290 нм, показывают значит. отклонение от закона Ламберта — Беера в коротковолновой области спектра, что объясняют образованием димерных молекул Br_4 . Рассчитана константа равновесия реакции $2\text{Br}_2 \rightleftharpoons \text{Br}_4$ и показано, что насыщ. пары брома содержат $\sim 1\%$ Br_4 .
Н. А. Туманова

X. 1972. 19

1982

Br₂

133785a Ultraviolet spectra of single and double molecules of gaseous bromine. Wen, Walter Y.; Noyes, Richard M. (Dep. Chem., Univ. Oregon, Eugene, Oreg.). *J. Phys. Chem.* 1972, 76(7), 1017-18 (Eng). The absorption spectrum of Br vapor between 220 and 290 nm was measured at 30°. Deviation from the Beer-Lambert law was interpreted in terms of the formation of double mols. of Br₂, and the relative contributions of single and double mols. of Br₂ to the obsd. absorption were assigned.

C.A. 1982. 76. 22

ВР-Х/1-3005-1972

I_2

Br_2

Cl_2

М.Н.

✓ 16 Б152. Системы полос $E \rightarrow B$ (4000—4360 Å) и $F \rightarrow X$ (2530—2740) молекул I_2^{127} и I_2^{129} и соответствующая система полос $E \leftrightarrow B$ молекул Br_2 и Cl_2 . Wieland K., Tellinghuisen Joe T B., Nobs A. The band systems $E \rightarrow B$ (4000—4360 Å) and $F \rightarrow X$ (2530—2740 Å) of $^{127}I_2$ and $^{129}I_2$, and the corresponding system $E \leftrightarrow B$, of Br_2 and Cl_2 . «J. Mol. Spectrosc.», 1972. 41, № 1, 69—83 (англ.)

Исследованы эмиссионные спектры молекул хлора, брома и йода в разряде низкого давления. Выполнен анализ колебательной структуры систем полос $E \leftrightarrow B$ и $F \leftrightarrow X$ молекул I_2^{127} и I_2^{129} и системы $E \leftrightarrow B$ молекул Cl_2 и Br_2 . Измеренные изотопич. сдвиги полос I_2 согла-

Х. 1972. 16

суются с вычисленными. Получены значения молек. по-
 стоянных J_2 T_e (см^{-1}), ω_e (см^{-1}), $\omega_e x_e$ (см^{-1}), r_e (А) со-
 отв. для состояний $X(^1\Sigma_g^+)$ 0, 214,548, 0,61626, 2,67;
 $B(^3\Pi_u)$ 15769,5, 125,531, 0,7339, 3,03; $E(^3\Pi_g)$ 41411,8,
 101,59, 0,2380, 3,7; $F_i(^1\Sigma_u^+)$ 47217,8, 95,955, 0,3623, 3,6.
 Определены также предв. значения молек. постоянных
 для системы полос $E \leftrightarrow B$ молекул Cl_2 (2130—2600А) и
 Br_2 (2410—2950 А).

М. Р. Алиев

1973

Вч₂

Обзор современной литера-
туры за период до декабря
1971г., а в некоторых
главах до 1972г.

колебл. -
вращат.
структ.:

London Chem Soc 1973,
xvi 622 pp ill (англ)

(м.п)

(см Cl₂, III)

Br₂
J₂

(de⁻)

18 B73. Фрагментация отрицательных ионов, образованных в столкновениях атомов щелочных металлов и молекул галогенов. Baede A. P. M., Augerbach D. J., Los J. Fragmentation of negative ions formed in collisions of alkali atoms and halogen molecules. «Physica», 1973, 64, № 1, 134—148 (англ.)

Методом скрещенных молек. пучков с масс-спектрометрич. регистрацией измерены полные сечения σ процессов $M+X_2 \rightarrow M^+ + X_2^-$ (1) и $M+X_2 \rightarrow M^+ + X^- + X$ (2), где $M=K, Na, Li$, $X_2=Br_2, J_2$, при относит. энергиях столкновения E от пороговой до ~ 20 эв. На основании измерений пороговых энергий определены величины адиабатич. сродства к электрону X_2 (эв): Br_2 $2,55 \pm 0,1$; J_2 $2,52 \pm 0,1$. Эти значения согласуются с лит. данными. Значения σ для процессов типа (1) и (2) близки. Найдено, что характер зависимости σ процесса (2) от E существенным образом зависит от M . Для р-ции K обнаруживается резкий максимум σ в области пороговой энергии. Для р-ций Na и Li максимум более широк и сдвинут в область больших E . Это различие зависимостей σ от E интерпретировано на основании модифицированной модели пересечения поверхностей потенциальной энергии, соотв-щей реакции (2). В. Е. Скурат

1973

* 4-503

См. Takmel F₂; III

(+1)

⊗

X. 1973
N 18

Br_2

(20)

14 Б144. Энергии диссоциации газообразных Br_2 и J_2 .
Barrow R. F., Brody D. F., Pederson L. B.,
Yee K. K. The dissociation energies of gaseous Br_2 and
 J_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1973, 18, № 3, 357—358 (англ.)

Проведен вращательный анализ систем $B^3\Pi_0^+u-$
 $X^1\Sigma_g^+$ для Br_2^{79} ; Br_2^{81} и J_2^{127} . Плотность колебатель-
ных состояний вблизи предела диссоциации соответст-

вует распределению Лероя — Бернштейна для $n=5$.
Короткая экстраполяция дала следующие величины
энергий диссоциации для основного состояния:
 $D_0(\text{Br}_2^{79}\text{Br}_2^{81}) = 15895,6 \text{ см}^{-1}$ и $D_0(\text{J}_2^{127}) = 12440,1 \text{ см}^{-1}$.

Резюме

⊕

☒

1973

отмечен 3022

Х. 1973 № 14

см. также J_2 ; III

Br₂

1973

6 Д309. Энергия диссоциации паров Br₂ и J₂. В а г -
 row R. F., Brody D. F., Pederson L. B., Yee K. K.
 The dissociation energies of gaseous Br₂ and J₂. «Chem.
 Phys. Lett.», 1973, 18, № 3, 357—358 (англ.)

Выполнен анализ вращательной структуры полос
 системы $B^3\Pi_0^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекул ⁷⁹Br₂, ⁸¹Br₂ и ¹²⁷J₂
 вблизи границы диссоциации (соответственно до 1, 2, 85
 и 5 см⁻¹ от диссоциационного предела). Показано,
 что дальноедействующее взаимодействие между парами
 атомов действительно определяет плотность колебатель-
 ных уровней вблизи границы диссоциации и соответ-
 ствует модели Ле—Роя и Бернштейна для $n=5$. Благо-
 даря малой области экстраполяции рассчитаны более
 точные значения констант диссоциации из основного
 состояния: $D_0(^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}) = 15895,6 \text{ см}^{-1}$ и $D_0(^{127}\text{J}_2) =$
 $= 12440,1 \text{ см}^{-1}$. Библ. 7. В. Александров

D₀, м.и.

Витыски 3022

Ф. 1973 №6

① M

Вх. 2

12 Б19. Двухатомные интергалогены: систематика и рассмотрение спектроскопических межатомных потенциалов и пересечения потенциальных кривых. Child M. S., Bernstein R. B. Diatomic interhalogens: systematics and implications of spectroscopic interatomic potentials and curve crossings. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 11, 5916—5925 (англ.)

потенц.

Кривые

Проведена систематика обнаруженных спектроскопически основных и нижних возбужденных состояний двухатомных интергалогенов с учетом спин-орбитальных состояний атомных продуктов их диссоциации.

Be, предсказаны.

Потенциальные кривые (ПК) состояний построены либо методом РКР, либо методом отражений (методом Кондона) в гармонич. приближении (при определении наклона отталкивательной ветви ПК слева от точки минимума). На основе анализа ПК всего семейства интергалогенидов предсказано наличие связанного состояния $^3\text{Po}^+$ у молекулы F_2 ($r_e \approx 1,9 \text{ \AA}$; $D_e \approx 3300 \text{ см}^{-1}$). У ряда интергалогенов установлено сильное взаимодействие связанного состояния $^3\text{Po}^+$ с отталкивательным состоянием $\text{Y}(\text{O}^+)$, что приводит к образованию нового состояния $\text{B}'(\text{O}^+)$. Анализ взаимодействий проведен пу-

X. 1974

N 12

1973

+9

X

тем перехода от адиабатич. к диабатич. ПК, что позволило определить положение r_x точек пересечения и величину недиагонального матричного элемента $V_{12}(r_x)$, характеризующего расхождение адиабатич. ПК в точке пересечения. Представлен график зависимости энергий диссоциации D_e в основном состоянии $X'\Sigma$ от равновесного расстояния r_e и корреляц. сетка-диаграмма зависимости D_e от r_e для связанных состояний ${}^3\Pi_0+$. В поведении отталкивательных ветвей изученных четырех семейств состояний (${}^3\Pi_0+$, ${}^1\Pi_1$, $\Upsilon(O^+)$ и более высоко лежащих Z-состояний) обнаружены отчетливые закономерности, связанные прежде всего со стерическими эффектами, т. е. с «увеличением» или «уменьше-

нием» одного из партнеров в ряду молекул XY. Дана интерпретация возможных типов преддиссоциации молекулы Bg_2 , обсуждена необходимость уточнения некоторых спектроскопич. постоянных, и предложен эксперимент по рассеянию атомов галогенов в основном состоянии, в к-ром должны отчетливо проявиться три энергетич. порога.

М. Е. Ерлыкина

библ.

1973

Вх. 2

6 Д392. Двухатомные гетероядерные молекулы галогенов: систематика и извлечение из спектроскопических данных межатомных потенциалов и пересечений кривых. Child M. S., Bernstein R. B. Diatomic interhalogens: systematics and implications of spectroscopic interatomic potentials and curve crossings. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 11, 5916—5925 (англ.)

Определяемые из спектроскопич. данных потенциальные кривые нижних возбужденных состояний гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул галогенов систематизированы с точки зрения спинового состояния продуктов диссоциации. Отмеченные закономерности предсказывают существование связанного состояния $V^3\Pi_0 + F_2$ с параметрами $r_e' \approx 1,9 \text{ \AA}$ и $D_e' \approx 3300 \text{ см}^{-1}$. В некоторых гетероядерных молекулах наблюдается сильное взаимодействие состояний $V^3\Pi_0 +$ и $Y(O^+)$, приводящее к образованию нового состояния $V'(O^+)$. Анализ такого взаимодействия позволяет определить точку пересечения потенциальных кривых r_x и величину взаимодействия $V_{12}(r_x)$, которая зависит от состоя-

9

8

Ф. 1974 № 6

ний атомных продуктов диссоциации. Обсуждается
связь полученных результатов с явлениями предиссо-
циации и необходимость дальнейших теоретических и
эксперим. исследований в этом направлении. Библ. 60.
В. А.

I_2 ; IBr ; ICl ; Br_2 , $BrCl$, Cl_2 F_2
 FI ; FBr , ClF .



$I_2; Br_2; Cl_2; F_2; YCl;$
 $YBr; BrCl; ClF; BrF; YF$ (I, A) 1973
(Ogop) $\bar{x} 3768-BP$
Coron Y. A., om m. 3882

Mol. Spectrosc., 1973, 1, 177-228
(ann.)

Low-lying electronic states
of diatomic halogen mole-
cules.

10 (F) CA, 1973, 79, N22, 130784a

1973

Вч₂

8 Б1067. Селективное изотопное молекулярное возбуждение лазером, действующим в режиме генерации отдельных мод. Dworetzky S. H., Hozack R. S. Selective isotopic molecular excitation with a single — moded laser. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 7, 3856—3858 (англ.)

спектр
флуоресценции

С помощью аргонового ионного лазера достигнуто возбуждение двухатомных молекул Br_2 , избирательное в отношении изотопного состава <ИС> последних. Для возбуждения использованы отдельные продольные моды в пределах доплеровской ширины линии 514,5 нм от указанного лазера. В этих пределах размещается ~60 таких мод, отстоящих друг от друга на ~100 мГц. В спектрах флуоресценции Br_2 , интенсивность к-рой дана как функция номера моды, отчетливо обнаруживаются полосы, соотв-щие испусканию молекул Br_2 различного ИС. Показано, что избирательно возбуждаются два перехода в $^{79,79}\text{Br}_2$, один — в $^{79,81}\text{Br}_2$ и один — в $^{81,81}\text{Br}_2$. Как отмечают авторы, полученные результаты существенны для изучения резонансного КР вблизи порога диссоциации двухатомных молекул. Х. В. Протопопов

Х. 1974
№ 8

1973

Br₂

Chemmp

21040e Selective isotopic molecular excitation with a single-modulated laser. Dworetzky, S. H.; Hozack, R. S. (Bell Lab., Murray Hill, N.J.). *J. Chem. Phys.* 1973, 59(7), 3856-8 (Eng). Selective isotopic mol. excitation in Br₂ was obsd. by using the various individual longitudinal modes of an Ar-ion laser at 4145 Å: the $R(32 \pm 2)$ and $R(42 \pm 2)$ transitions in ⁷⁹Br₂, the $R(19 \pm 2)$ transition in ⁷⁹Br⁸¹Br, and the $P(16 \pm 2)$ and $P(39 \pm 2)$ transitions in ⁸¹Br₂ were selectively excited. All transitions originated in the $v = 0$ level. Preliminary polarization studies indicate no large scale resonance Raman scattering in this region.

C.A. 1974. 80. N4

Br_2^+

1973

curr.
natu.
re

Gillespie R. J.; et al.
adv. Raman. Spectrosc.
Vol 1, Proc 3rd Int.
Conf. Reims, 1972,
London, e.a. 1973, 539-45



$(\text{cur } \text{I}_2^+; \text{III})$

40123.7233
Ch, Ph, TE

Br₂

и. и. 49969

1973

1611

Hooydonk G. van.

On an ionic approximation to
homonuclear bonding.

"Z. Naturforsch.", 1973, 28a, N 11, 1836-1842

(англ.)

0030

009 010

023

ВИНИТИ

31211.8329
TE, Ch, Ph, MGU

Br₂ 40892
Ae

1973

1459

Hughes B.M., Lifshitz C., Tiernan T.O.
Electron affinities from endothermic
negative-ion charge-transfer reactions.
III. NO, NO₂, SO₂, CS₂, Cl₂, Br₂, I₂,
and C₂H.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 6, 3162-3181
(АНГЛ.)
1021 БЛК

1005 1006

ВИНИТИ

Bk₂

number 1580

1973

Kulkarni R.V., Sarna G.R.

Semiempirical methods in molecules

"J. Phys. Chem. and Mol. Phys.",

1973, 6, VII, 2577-2581.

неприс
сблн

ommene 1992 . 1973

Br₂

Kulkarni K.S

Sarma C.R; et al.

merus
cheyu

"Indian J. Pure Appl.
Phys"

1973, 11, N6,

431-32.

Br₂

Omniuck 3883

1973

Le Roy R.J.

u.r.

Mol. Spectrosc. Vol. 1
London, 1973, 113-176.
Energy levels of a diatomic near dissociation

(cm⁻¹ at.; u.r.)

$\text{Cl}_2; \text{F}_2; \text{Br}_2; \text{I}_2$ (u.n., Do, pacrim) 1973
X14091

Sannigrahi A.B., Mohammad S.N.,

Int. J. Quant. Chem., 1973, 7, N6, 1183
- 1192 (ann.)

Selected valence electron split-
shell molecular orbital calcula-
tions on the diatomic interhalo-
gen molecules.

Ble Puz, 1974, 10D209

11

(9)

31002.7344
Ch, Ph, SIS, TE

Br₂

(1204)

29864

1973

Spurling Thomas H., Snook Ian K.

INDO calculations on F₂, Cl₂, Br₂ and
I₂ using the Deb-Coulson parameters.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1973,
Part 2, 69, N 8, 1183-1186 (англ.)

0972

См. Таблицы
F₂, III

958 960

39 6 5

ВИНИТИ

Br₂

1973.
Van Labeke Daniel,
Jacen Marcel.

спектры
колебл.
рассеяны

"Opt. Commun"
"1973, 9, N4, 400-403.

(см. I₂, III)

1973

1494

(+)

4 Д143. Анализ дальнедействующей части потенциалов РКР для состояния $B^3\Pi_{0+u}$ молекул Br_2 и Cl_2 .
 Yee K. K., Stone T. J. Analysis of RKR long-range potentials of the $B^3\Pi_{0+u}$ states of Br_2 and Cl_2 . «Mol. Phys.», 1973, 26, № 5, 1169—1176 (англ.)

По литературным данным для спектроскопич. постоянных методом Ридберга — Клейна — Риса построена кривая потенц. энергии электронного состояния $B^3\Pi_{0+u}$ молекулы $^{35}\text{Cl}_2$, охватывающая колебательные уровни с $v \leq 31$. Новая потенц. кривая Cl_2 и литературные данные по потенц. кривой РКР состояния $B^3\Pi_{0+u}$ молекулы Br_2 моделированы обратным степенным рядом вида $D - C_5/r^5 - C_6/r^6 - C_8/r^8$ и методом наименьших квадратов вычислены значения энергии диссоциации D и параметров C_n . Показано, что дальняя ветвь потенциала РКР для Cl_2 и Br_2 , соответствующая значениям межъядерного расстояния вне области перекрывания электронного распределения, полностью описывается обратным степенным рядом, содержащим члены вплоть до C_8/r^8 . Полученные значения C_5 согласуются с результатами теоретич. расчета. Отмечена значительная корреляция между значениями C_5 и C_6 .

М. Р. Алиев

Br₂

диссоциация

М.п.
потенц.
кривыеФ. 4974
N 4

1973

Br₂Cl₂

(60°)

commun 1494

BP-XI-38 CF

125097v Analysis of Rydberg-Klein-Rees(Rklt) long-range potentials of the B ³Σ_g⁺ states of bromine and chlorine molecules. Yee, K. K.; Stone, T. J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, Engl.). *Mol. Phys.* 1973, 26(5), 1169-76 (Eng). Dissocn. energies (D) and interaction consts. (C) in the long-range potential $G(v) = D - C_5/r^5 - C_6/r^6 - C_8/r^8$, (r = internuclear distance), were obtained from least-squares fits to the attractive part of the RKR potentials. The term in r^6 was not negligible even at large r corresponding to the last few vibrational levels. The validity of the long-range inverse power expansion in r was examd. The expansion was valid outside the electron overlap region.

④

ⓧ

C.A. 1974, 80 N 22

Вч 2

аттест 2391

1974

(м.н.)

1 Д357. Система $B^3\Pi_{u^+} - X^1\Sigma_g^+ Br_2$: анализ вращательной структуры, факторы Франка — Кондона и действующий потенциал для состояния $B^3\Pi_{u^+}$. Barrow, R. F., Clark T. C., Coxon J. A., Yee K. K. The $B^3\Pi_{u^+} - X^1\Sigma_g^+$ system of Br_2 : rotational analysis, Franck — Condon factors, and long range potential in the $B^3\Pi_{u^+}$ state. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 51, № 3, 428—449 (англ.)

С целью получения максим. информации о состоянии $B^3\Pi_{u^+} Br_2$ исследованы полосы поглощения системы

ф. 1975 № 1

$B^3Po_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ изотопов $^{79}Br_2$ и $^{81}Br_2$, включающих уровни $0 \leq v \leq 10$ состояния X и $0 \leq v \leq 55$ состояния B . Молекулярные константы возбужденного состояния определялись различными эксперим. методами и путем расчетов по теории возмущений исходя из данных о кривых потенц. энергии. Рассчитанные значения γ -центroids и факторов Франка — Кондона находятся в согласии с экспериментально найденными для прогрессии $v' = 40$ при возбуждении флуоресценции излучением ионного Ar-лазера. Плотность уровней вблизи диссоциационного предела состояния B свидетельствует о том, что для описания дальнего действующего потенциала взаимодействия атомов $B^2(^3P_{3/2})$ и $B(^2P_{1/2})$ недостаточно одночленного приближения. Библ. 22. В. А.

Br₂

М.Н.

вытиски 2391

х. 1975. N1

1 Б143. $B^3\Pi_{ou+} - X^1\Sigma_{g+}$ система Br₂. Вращательный анализ, факторы Франка—Кондона и потенциал поля дальнедействующих сил $B^3\Pi_{ou+}$ состояния. Bagrow R. F., Clark T. C., Coxon J. A., Yee K. K. The $B^3\Pi_{ou+} - X^1\Sigma_{g+}$ system of Br₂: rotational analysis, Franck—Condon factors and long range potential in the $B^3\Pi_{ou+}$ state. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 51, № 3, 428—449 (англ.)

Выполнен согласованный анализ трех спектров поглощения, полученных в разное время для полос $B^3\Pi_{ou+} - X^1\Sigma_{g+}$ для Br₂⁷⁹ и Br₂⁸¹ вблизи предела диссоциации. Для молекулы Br₂⁷⁹ проанализировано 88 полос с $0 \leq v'' \leq 10$ (11 уровней) и $1 \leq v' \leq 55$ (53 уровня) и для молекулы Br₂⁸¹ проанализировано 25 полос с $0 \leq v'' \leq 3$ (4 уровня) и $9 \leq v' \leq 54$ (22 уровня). Приведены определенные различными методами значения колебательных и вращательных постоянных для состояний X и B. Вычислены факторы Франка—Кондона и r -центроиды для B—X систем в области $0 \leq v'' \leq 10$ и $0 \leq v' \leq 51$. С. Н. Мурзин.

вытиски 2270

1974

40918.3776
Ch, Ph, TC

Br₂

96201 02

1974

* 4-6277

Brith M., Schnepf O., Stephens P.
Magnetic circular dichroism spectra of
the halogen molecules, I₂, Br₂ and Cl₂.
Resolution of overlap-
ping σ_u^+ ($^3\Pi$) and $^1\Pi$ bands.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 26, N 4, 549-552
(англ.)

0192

157 153

34

ВИНИТИ

XI - 5582

1974

Ac⁻ (Cl₂, Br₂)

Disperst H., Laccmann.

Chem. Phys. Lett., 1974, 44; №3

533-6'

ЕСТЬ КОПИЯ.

РЖХим, 1974, 2151053

10

оттиски 2647 1974

Br_2

2 Д345. Сверхтонкая структура спектра паров брома вблизи 633 нм. Eng R. S., LaTourrette J. T. Hyperfine spectra of bromine vapor near 633 nm. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 52, № 2, 269—276 (англ.)

Для изучения сверхтонкой структуры двухатомной молекулы Br_2 с ядерным спином $3/2$ использован метод насыщенного поглощения. Вследствие одинакового знака квадрупольного и магн. моментов спин-вращательное расщепление уровней возбужденного состояния приводит к переналоженнию компонент сверхтонкой структуры вращательных линий; для $\lambda=633$ нм рассмотрены переходы $\text{Br}_2^3\Pi_{0+u} - \text{Br}_2^1\Sigma_g^+$ $^{79}\text{Br}_2P(57)$ (17—7) и $^{81}\text{Br}_2P(129)$ (12—4). Определены константы сверхтонкой структуры и положение центра линий, которое имеет важное значение для расчета колебательных и вращательных постоянных молекулы Br_2 . Библи. 15. В. А.

(м.н.)
h264-1X

Ф. 1975. №2

Вх. 2

4264

(м.п.)

X1-19

4 Б164. } Сверхтонкая структура спектров паров брома
вблизи 633 нм. Eng R. S., LaTaungrette J. T.
Hyperfine spectra of bromine vapor near 633nm. «J. Mol.
Spectrosc.», 1974, 52, № 2, 269—276 (англ.)

С помощью метода насыщ. поглощения (метод провала Лэмба) измерена СТС спектров паров $^{79}\text{Br}_2$ [линия (17—7)P(57)] и $^{81}\text{Br}_2$ [линия (12—4)P(129)]. Обе линии отнесены к электронному переходу $B^3\Pi_o^+$ и $X^1\Sigma_g^+$ вблизи 633 нм. Проведенный на базе ядерных квадратурных и спин-вращательных взаимодействий анализ спектра является ценным источником информации относительно величин постоянных СТС и центров линий для каждого молек. перехода. Последний параметр используется для точного определения величин колебательно-вращательных молек. констант.

Р. Г. М.

ж. 1975. №4.

ВФ-Х1-4368

1974

Br₂

12 Б120. Уровни колебательной энергии молекулы $^{79,81}\text{Br}_2$ в основном электронном состоянии. Хачку-рузов Г. А. В сб. «Работы по термодинам. и кинетике хим. процессов». Л., 1974, 3—14

Рассмотрены опубликованные в лит-ре спектральные данные об уровнях колебательной энергии и значениях вращательной постоянной молекулы $^{79,81}\text{Br}_2$ в основном электронном состоянии. На их основе заново определены наиболее достоверные значения уровней колебательной энергии молекулы $^{79,81}\text{Br}_2$ при $V=0-36$. Резюме

(м.п.)

Х. 1975. № 12

50213.4756

Ch, Ph, TC, MGU

96625 GR

02

1974

Br₂ (снимок
в матрице)

*4-8124

Howard Wilmont F., Jr., Andrews Lester.Matrix Raman spectra of the molecular ha-
logens: resonance Raman spectra of 
isolated and aggregated I₂. "J. Raman
Spectrosc.", 1974, 2, N 5, 447-462

(англ.)

0303 пик

(см. I₂; III)

276 278

ВИНИТИ

1974.

Br₂

Joy R.C; Schutze P.D;
et al.

геометр.

J. Chem. Phys. " 1974, 60,
N 8, 3174 - 77

(cr. CBr₂; III)

40510.1385

B22 38106 02

1974

Ph, Ch, TE, MGU

Раман-спектр

*45004

Kiefer W. — Laser-excited resonance
Raman spectra of small molecules and
ions. A review.

"Appl. Spectrosc.", 1974, 28, N 2, 115-134

(см. I_2 ; III)

(англ.)

0108

086

089

0100

ВИНИТИ

$(Br^- - Br^-)$ omnen 2243. 1974.

Kim Vung Sik.

nomens.

Lyannig - "J. Chem. Phys"

1974, 60 N 11

4332-44.

40919.1945

Ch, TC, MGU, Ph

Br 242531

02

1974

2429

Leone Stephen R., Moore C. Bradley. Iso-
topically selective photochemistry of
bromine.

"Phys. Rev. Lett.", 1974, 33, II 5, 269-
272 (англ.)

0193

160 162

0185

ВИНИТИ

Br₂

Cl₂

I₂

(μ, n)

43-4601

1974.

125112w Long-range potential coefficients from RKR [Rydberg-Klein-Rees] turning points. C_6 and C_8 for $B(^3\Pi_{0+})$ -state molecular chlorine, bromine, and iodine. Le Roy, Robert J. (Dep. Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, Ont.). *Can. J. Phys.* 1974, 52(3), 246-56 (Eng). Methods of analyzing long-range RKR turning points (Le R., 1973) to determine the inverse-power intramol. potential-energy coeffs. have always required an implicit assumption about the relative magnitudes of higher-power coeffs. However, its effect on the derived constants has never been examd. A generalization of a method of O. Goscinski (1972) is introduced, in which this assumption is explicitly introduced as the parameter α . Application of the new procedure to B -state Cl₂, Br₂, and I₂ yields improved estimates of their potential-energy consts. C_6 and C_8 ; such results can be strongly dependent on the assumed value of α . In a search for a priori method for estg. α , the empirical relation $(C_{10}/C_8)/(C_6/C_8) \approx 4/3$ between the theoretically known potential constants was found for the interactions of pairs of S-state atoms.

C. A. 1974. 80N22

(+2) ☒

1974

Br₂

(chem)

177659r Photofragment spectrum of bromine. Oldman, R. J.; Sander, R. K.; Wilson, K. R. (Dep. Chem., Univ. California, La Jolla, Calif.). U. S. N. T. I. S., AD/A Rep. 1974, No. 02229/3GA. 41 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Govt. Rep. Announce. (U. S.) 1975, 75(3), 59. The photofragment spectrum of Br₂ at visible and near uv wavelengths was measured by using the absorption of a single photon to probe ungerade states and double photon absorption to probe gerade states invisible in the ordinary absorption spectrum. In these expts. a pulsed polarized

laser beam intersects a mol. beam in a vacuum chamber and Br atoms photodissocn. fragments are detected with a mass spectrometer as a function of the angle between the light polarization direction and the recoil path of the detected atoms. They have also found double photon dissocn. processes involving absorption of one 18,780 and one 9390/cm photon as well as such processes involving two 18,780/cm photons. Calcs. following Mulliken, of the approx. vertical energies of the newly obsd. final dissociative states in these double photon processes are in accord with expl. observations.

C.A. 1975 82. N26

50211.6669

Ch, Ph, TC

Br₂ - 54969 02.

1974

ЖУ-8070

Rackwitz R., Feldmann D., Heinicke E.,
Kaiser H.J. Photodissoziation bei
zweiatomigen negativen Halogenmolekülio-
nen. "Z. Naturforsch.", 1974, 29a,
N 12, 1797-1802 (англ.) 0298 пик

266 270

0 2 9 0

ВИНИТИ

Br-Br

1974

ЭН. перех.

9 Д133. Энергии перехода в ионизованной квазимолекуле Br—Br. Soff G., Müller B. Transition energies in the ionized Br+Br quasi-molecule. «Lett. Nuovo. sim.», 1974, 9, № 14, 557—560 (англ.)

В связи с экспериментом (РЖФиз, 1973, 11 Д561) рассматриваются свойства квазимолекулы Br—Br в приближении объединенного атома. Численное решение ур-ния Хартри — Фока — Слэтера позволило найти энергию уровня $1s$ и энергии перехода $2p_{1/2}—1s_{1/2}$, $3p_{3/2}—1s_{1/2}$ в объединенном атоме как ф-цию степени ионизации внешних оболочек.

Ф. 1974. №9

50113.8706
Ph, TC, MGU

42529 02

1974

Br 2 (y)
(ан. клип) * 45-8000

Spence David.

Systematics of Feshbach resonances in
the molecular halogens.
"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1974, 10, N 4,
1045-1052

(англ.)

(см. F₂; III)

0279 ДИК

255 259 0 2 7 9

ВИНИТИ

HF, HCl, HBr, HI, H₂, F₂, Cl₂, Br₂, I₂,
Y₂, FCl, FBr, FI, ClBr, ClI, BrI (2e, 80, 74).

Straub P.A., McLean A.D.,

Theor. chim. acta, 1974, 32 (3),

227-42.

Electronic structure of linear halogen
compounds. I. Diatomic halides, inter-
halogens, and halogen hydrides.

C.A. 1974. 80. N22. 1262194. 10

⊕

1974

8067 McLean

Bz₂

1974

Vilesov F.I.

помощь
судам.

Тезисы Докл. Междунар.
конф. Opt. рентгеновских
лучей. Микроанал. 7th
1974, 7-8 (Russ)

(all H₂; III)

Bz₂

потенц.
кривые

Vee K. K.

1974

Mol. Phys. 1974, 28(2)

513-25 (Eng)

(see T₂; III)

I₂, Br₂, Cl₂, H₂ (nommes.
круппе) 1974.
XI-5323

Yee K.K.,
Mol. Phys., 1974, 28 (2), 513-25
Representation of long-range
potentials by (1,0) Padé approxi-
mant.

C.A. 1975.82w16.103392b . 10



50703.7570

Ch, Ph, MGU, TC

41125

Вч₂

(ч.н)

1975

* 5-9307

Ault Bruce S., Howard Wilmont F., Jr,
Andrews Lester. Laser-induced fluores-
cence and Raman spectra of chlorine and
bromine molecules isolated in inert mat-
rices. "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 55,
N 1-3, 217-228 (англ.)

0401 ПИК

(с.с. с.с. 2/110) 377 378 393

ВИНИТИ

*43-8314

1975

Br₂

131406c Hot band and isotopic structure in the resonance Raman spectrum of bromine vapor. Baierl, P.; Kiefer, W. (Sekt. Phys., Univ. Munchen, Munich, Ger.). *J. Chem. Phys.* 1975, 62(1), 306-8 (Eng). The resonance Raman spectrum of Br₂ vapor, excited with the 488-nm Ar ion laser line, was recorded in the anti-Stokes and Stokes region. For the fine structure of the Br₂ fundamental region, several highly polarized bands are clearly resolved and can be assigned to the Q branch fundamental vibrations ($\Delta J = 0$) and their hot bands of the 3 isotopic species ⁷⁹Br₂, ⁷⁹Br⁸¹Br, and ⁸¹Br₂ with natural abundance of approx. 1:2:1. The obsd. peak positions are compared with values derived from the spectroscopic constants which were obtained for the electronic ground state from high resolution absorption spectra. In all cases, the calcd. wavenos. differ from the obsd. peak positions by approx. 1 cm⁻¹. The calcd. values further show that the transitions $\nu + 1 \leftarrow \nu$ for ⁸¹Br₂, $\nu + 2 \leftarrow \nu + 1$ for ⁷⁹Br⁸¹Br, and $\nu + 3 \leftarrow \nu + 2$ for ⁷⁹Br₂ occur at nearly the same frequency, giving rise to bands of fairly high intensity.

(M.N.)

4444
1-11-11
11-11

C.A. 1975. 82. N20

* 4 - 8314

1975

Вч₂

(спектр)

4444
X-11-4444
B-93-11-4444

7Д394. Горячие полосы и изотопная структура в спектрах комбинационного рассеяния паров брома. Baierl P., Kiefer W. Hot band and isotopic structure in the resonance Raman spectrum of bromine vapor. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 1, 306—308 (англ.)

С помощью Ar^+ -лазера ($\lambda = 4880 \text{ \AA}$) исследованы спектры резонансного комб. рас. паров Br_2 при давлении 140 мм рт. ст. в области $\pm 1500 \text{ см}^{-1}$. В спектрах комб. рас. наблюдалась последовательность линий, обусловленная возбуждением обертонов валентного колебания молекул Br_2 (310 см^{-1}). Тщательное исследование линии рассеяния 1-го порядка позволило обнаружить дополнительную структуру, обусловленную одновременным присутствием изотопов ^{79}Br и ^{81}Br . Со- поставление с расчетом показывает, что в использованных условиях (мощность лазера 1,6 Вт) существенная часть процессов комб. рас. обусловлена переходами между возбужденными колебательными уровнями.

С. П.

P 1975 N 7

*4-8314

1975

15 Б236. «Горячая» полоса и изотопическая структура в резонансном спектре комбинационного рассеяния паров брома. Baierl P., Kiefer W. Hot band and isotopic structure in the resonance Raman spectrum of bromine vapor. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 1, 306—308 (англ.)

Получен резонансный спектр КР (λ 4880А) паров Br_2 (давл. 140 мм). Наблюдали серию обертонов до $\Delta\nu=5$ ($\nu=322,4 \text{ см}^{-1}$) со стоксовой стороны и до $\Delta\nu=3$ — с антистоксовой. В области более высоких частот от Q ветви проявляются неразрешенные S-ветви. Подробный анализ контура основной полосы $\Delta\nu=1$ позволил выделить линии, относящиеся к колебаниям Br_2^{79} , $\text{Br}^{79}\text{Br}^{81}$ и Br_2^{81} , отношение интенсивностей к-рых отвечает относит. содержанию изотопов (1:2:1), а также линии «горячих» переходов $\nu+1 \leftarrow \nu$ для Br_2^{81} , $\nu+2 \leftarrow \nu+1$ для $\text{Br}^{79}\text{Br}^{81}$ и $\nu+3 \leftarrow \nu+2$ для Br_2^{79} . Последние связаны с высокой т-рой ($\sim 1100 \text{ K}$) в фокусе лазерного пучка (т-ру определяли по распределению интенсивностей линий в чисто вращательных спектрах O_2 и N_2 , к-рые добавляли к Br_2).

А. Бобров

Вч 2

44-11-17

(м.п.)

В-40-11-17

X. 1975
N 15

Вч₂

(м.и.)

6 Б209. Резонансное комбинационное рассеяние от изотопически чистых и естественных паров брома. Baieri P., Kiefer W. Resonance Raman scattering from isotopically pure and natural bromine vapor. «J. Raman Spectrosc.», 1975, 3, № 4, 353—369 (англ.)

Получены резонансные спектры КР молекул $^{79}\text{Br}_2$, $^{81}\text{Br}_2$ и естественного Br_2 в газ. состоянии при возбуждении в области континуума состояния $B(^3\Pi_{ou}^+)$ ($\lambda_{\text{возб}} = 4880\text{Å}$). В спектрах наблюдаются серии обертонов колебания $318,5\text{ см}^{-1}$ до 10 включительно, при этом хорошо проявляется ТС полос, к-рая связана с Q, S и O-ветвями, а также «горячими» полосами. Рассчитанные значения w_e , $w_e x_e$, $w_e y_e$, а также B_e и α_e для состояния $x(^1\Sigma_g^+)\text{Br}_2$ хорошо согласуются с лит. данными. Оценена спектроскопич. т-ра и исследована ее зависимость от мощности возбуждающего лазерного излучения. Изучена зависимость интенсивности линии от частоты возбуждающего света. При изменении $\lambda(\text{возб.})$ от 4579 до 5017Å происходит перераспределение интенсивностей компонент ТС полос, обусловленное преобладанием того или другого «горячего» перехода.

А. Бобров

X 1976 N 6

1975-55-501-84

*45 - 10555

1975

Br₂Raman -
- creep

170446f Resonance Raman scattering from isotopically pure and natural bromine vapor. Baierl, P.; Kiefer, W. (Sekt. Phys., Univ. Muenchen, Munich, Ger.). *J. Raman Spectrosc.* 1975, 3(4), 353-69 (Eng). The high-resoln. resonance Raman spectra was recorded for the Br mol. in its natural abundance and as pure isotopic mols. ⁷⁹Br₂ and ⁸¹Br₂ with excitation by light which is in resonance with the continuum of the $B(3\pi^{+ou})$ -state. The obsd. spectra are characterized by a progression of vibrational lines up to the tenth harmonic. These lines display complex structure which can be explained in terms of Q branches, S band heads, unresolved O branches and vibrational hot bands. The assignment of all obsd. lines is based on Fortrat diagrams which were calcd. by using spectroscopic constants derived from high resoln. absorption spectra and on depolarization measurements. The vibrational const. ω_e , ω_{exe} and ω_{eye} and the rotational const. B_e and α_e for the $X(1\Sigma^+_g)$ -state of Br were detd. independently from the Raman spectra. Variations of the spectral band shape of the fundamental and the overtones were obsd. by using 5 different exciting lines of the Ar ion laser. The band shapes were also studied while changing the laser power which affects the spectroscopic temp. A qual. discussion of the obsd. changes is given.

C.A. 1975. 83 N20

Br₂

43-10411

1975

123640e Pure rotational raman spectra of molecular bromine-79 and molecular bromine-81. Baierl, P.; Hoche-
mbleicher, J. G.; Kiefer, W. (Sekt. Phys., Univ. Muenchen,
Munich, Ger.). *Appl. Spectrosc.* 1975, 29(4), 356-7 (Eng).
The pure rotational Raman spectra of ⁷⁹Br₂ and ⁸¹Br₂ were
obtained directly with photoelec. recording and 488-nm laser
excitation. The rotational consts. *B*, 0.0819 and 0.0801 cm⁻¹ and
centrifugal distortion consts. *D*, 2.077 and 1.992, resp., were detd.

(u.n)

BP-NI-4478

C. A. 1975. 83 N 14

*13-10411

1975

Br₂

3 Д383. Вращательные спектры комбинационного рассеяния молекул $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$. Baierl P., Hochenbleicher J. G., Kiefer W. Pure rotational Raman spectra of $^{79}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$. «Appl. Spectrosc.», 1975, 29, № 4, 356—357 (англ.)

вращат.
спектры
м.п.

Получены спектры вращательного комб. раё. изотопов $^{79}\text{Br}_2$ (I) и $^{81}\text{Br}_2$ (II) при возбуждении лазерным излучением 488,0 нм мощностью 2—5 Вт и фотоэлектрич. регистрации. Давление паров брома не превышало 90—130 мм рт. ст. Вычислена вращательная постоянная B_e , равная 0,0819 см⁻¹ (I) и 0,0801 см⁻¹ (II). Для постоянной D_e получены значения 2,077 · 10⁻⁸ см⁻¹ (I) и 1,992 · 10⁻⁸ см⁻¹ (II). По распределению интенсивности вращательных линий оценена спектроскопич. т-ра системы, которая составляет ~1000 ± 150° К. Библ. 14. И. В. А.

BR-XI-4478

X 1976 13

*3-10411.

1975

Br 2/48

-44/1

(м.п.) X 1

Br 1

6 B210. Чисто вращательные спектры комбинационного рассеяния света $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$. Baierl P., Hochenbleicher J. G., Kiefer W. Pure rotational Raman spectra of $^{79}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$. «Appl. Spectrosc.», 1975, 29, № 4, 356—357 (англ.)

Измерены чисто вращательные спектры КР $^{79}\text{Br}_2$ (I) и $^{81}\text{Br}_2$ (II) в области частот $\pm 60 \text{ см}^{-1}$ при возбуждении спектров 488 нм линией 2 вт аргонового лазера. Определены вращательные постоянные B_e (см^{-1}) для I: $0,0819 \pm 0,0005$, для II: $0,0801 \pm 0,0005$ и постоянные центробежного искажения D_e (в единицах 10^{-8} см^{-1}) 2,077 и 1,992 для I и II соответственно. Измеренные величины B_e и D_e находятся в хорошем согласии с величинами, полученными из спектров поглощения. Из данных по распределению интенсивности в спектре КР оценена спектроскопич. т-ра: $T \approx 1000 \pm 150^\circ \text{ K}$, что связано с использованием мощного лазера.

С. Н. Мурзин

X 1976 N 6

Br₂

1975

спектр
химии.

Белокрыцкий Н. С.
Бобровшев А. И.

"Изв. АН СССР. Сер. физ."
1975, 39, №11, 2351-53;

(см. Т₂; III)

Br₂

Bugrim M.

1975

J. Tinkera

Opt and Spectrosc.

1975, 39 15

Efficiency of deactivation
of the B² $\Pi_{u,1/2}$ state of Br₂
in collisions

50324.9091

96201

1975

Ph, Ch, TC

Br₂

* 4-8333

Clark David T., Muller Jiri.

A non-empirical LCAO MO SCF investigations of electronic relaxations accompanying core ionizations in the series X_2 and HX ($X=F$, Cl and Br). "Chem. Phys. Lett.", 1975, 30, N 3, 394-397

(англ.) 0324 пик

307 307

0316

ВИНИТИ

50730.9082

Ph, Ch, TC, MGU

Br₂ 96201

(M.H.; D₀) X 4-9503

1975

Coxon J.A. Dissociation energies
of diatomic halogen fluorides.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 33, N 1,
136-140

англ.)

0422 пик

383 383

ВИНИТИ

Br₂

1975

Ewig Carl S.

Van Wazer John R.

perum
ex. empoc.

"J. Chem Phys" 1975, 63
N9 4035-4041
(aew)

(aew F₂; III)

Br_2

J_2

JCl

JBr

фотоэлектронный
спектр.

(+3)



ф 1976 №6

- 1975

6 Д203. Полуколичественная модель спин-орбитального взаимодействия в дублетных состояниях и ее применение к фотоэлектронным спектрам двухатомных галогенидов. Hall Michael B. A semiquantitative model of spin-orbit coupling in doublet states and its application to the photoelectron spectra of diatomic halogens. «Int. J. Quantum Chem. Symp.», 1975, № 9, 237—243 (англ.)

Полуэмпирический вариант метода Хартри—Фока в базисе одноэлектронных волн. ф-ций с учетом одних только одноцентровых интегралов применен для вычисления спин-орбитального расщепления линий фотоэлектронных спектров двухатомных галогенидных молекул: с помощью теоремы Купмана параметры модели выражены через потенциалы ионизации различных электронных состояний. Выполнены численные расчеты констант спин-орбитального расщепления для молекул Br_2 , J_2 , JCl и JBr и получено удовлетворительное согласие с эксперим. данными.

М. Р. Алиев

BZ-BZ

077.4824

1975

Kerr J. A., et al.

(Do)

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75

1975

Br₂

* U-11790

7 Д362. Идентификация селективно возбуждаемых переходов в изотопах Br₂ при 5145 Å. Lum R. M., Hozack R. S. Identification of selectively excited transitions in Br₂ isotopes at 5145 Å. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 58, № 2, 325—327 (англ.)

предиссоц

Идентифицированы селективно возбуждаемые Ag⁺-лазером (5145 Å) переходы изотопов Br₂, обнаруженные ранее при исследовании резонансной флуоресценции и спонтанной преддиссоциации молекул Br₂ (см. РЖФиз, 1974, 4Д355; 1976, 5Д315).

Р 1976 N7

Br₂

* 4-11790

1975

84: 24021t Identification of selectively excited transitions in diatomic bromine isotopes at 5145 Å. Lum, R. M.; Hozack, R. S. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 58(2), 325-7 (Eng). Precise rotational and vibrational assignments of 5 transitions in bromine isotopes (2 in ^{79,79}Br₂, 1 in ^{79,81}Br₂, 2 in ^{81,81}Br₂) using the various longitudinal modes of the 5145-Å line of an Ar-ion laser, were made based on the comprehensive anal. of the $B^3\Pi_{0(u)}^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ system for ⁷⁹Br₂ and ⁸¹Br₂ performed by R. F. Barrow et al. (1974).

(u.n.)

C.A. 1976. 84. 74

Br_2

$(\text{Br}^3\text{P}_{04}^+ - \text{X}^1\Sigma_9^+)$

1975

13 Б153. Идентификация селективно возбуждаемых переходов в изотопозамещенных молекулах Br_2 при 5145 Å. Lum R. M., Hozack R. S. Identification of selectively excited transitions in Br_2 isotopes at 5145 Å. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 58, № 2, 325—327 (англ.)

Установлено соответствие между селективно возбуждаемыми переходами в изотопозамещ. молекулах брома ($^{79,81}\text{Br}$, система $\text{Br}^3\text{P}_{04}^+ - \text{X}^1\Sigma_9^+$) и отдельными модами аргонового лазера (5145 Å), проведено точное отнесение их по ν' и l' . Используя высокую точность определения энергии отдельной моды ($< 0,005 \text{ см}^{-1}$), уточнены положения переходов. В. М. Ковба

X1976 N13

Br₂

1975

frequency

84: 51728k Direct measurement of spontaneous predissociation using coaxial laser-molecular beams. Lum, R. M.; McAfee, K. B., Jr. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *J. Chem. Phys.* 1975, 63(11), 5029-33 (Eng). Radiationless transitions of isolated mols. have been obsd. using a laser-mol. beam technique. Transitions of the laser excited beam mols. leading to predissocn. and other unimol. processes are detected as a modulation of the mol. beam. Within the 0.05 Å Doppler width of the 5145 Å line of an Ar-ion laser, spontaneous predissocn. of the $B^3\Pi_{0u+}$ state of bromine has been directly obsd. at wavelengths which produce selective excitation of the individual Br₂ isotopic species. The peaks in the modulated mass signal amplitude corresponding to the predissocn. process have a width of approx. 500 MHz. Our measurements indicate that predissocn. is the predominant decay mechanism of the Br₂ $B^3\Pi$ state at 5145 Å.

C.A. 1976 84 N8

1975

Вч₂

5 Д315. Прямое измерение спонтанной преддиссоциации с использованием коаксиальных молекулярного и лазерного пучков. Lum R. M., McAfee K. B., Jr. Direct measurement of spontaneous predissociation using coaxial laser — molecular beams. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 11, 5029—5033 (англ.)

преддиссоц.

Описан метод исследования мономолекулярных процессов в изолированных молекулах с помощью коаксиальных лазерного и молекулярного пучков. Молекулы пучка возбуждаются лазером непрерывного действия, а последующая преддиссоциация возбужденных молекул, как и ряд других мономолекулярных процессов, регистрируются как модуляции молекулярного пучка. Описана аппаратура и приведены результаты исследования спонтанной преддиссоциации молекул $\text{Br}_2(\text{B}^3\Pi_{0u}^+)$. Изменения интенсивности молекулярного пучка измеряли с помощью квадрупольного масс-фильтра и фазочув-

Ф. 1976. №5.

☑ (+1) лазерн. спектроск.

ствительной системы регистрации. Внутри диапазона 0,05 Å (доплеровская ширина линии 5145 Å Аг-лазера) непосредственно наблюдали преддиссоциацию селективно возбужденных изотопов $^{79,79}\text{Br}_2$, $^{79,81}\text{Br}_2$, $^{81,81}\text{Br}_2$. Ширина максимумов в спектре модулированного сигнала равна 500 МГц. Установлено, что при $\lambda = 5145$ Å преддиссоциация является доминирующим процессом распада состояния $\text{Br}_2(B^3\Pi)$. Оценка значения сечения прямой фотодиссоциации Br_2 , которая также проявляется в модуляции масс-сигнала, дала значение $\sigma \sim 1 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$.
Библ. 19.

В. С. И.

50318.8448

Ch, Ph, TC

30526GR

Br₂

1975

* 4-8322

Manne Rolf, Wittel ~~Klaus~~ Klaus, Mohanty B.S.
Spin-orbit interaction in molecular photo-
electron spectra an intermediate coupling
approach.

"Mol. Phys.", 1975, 29, N 2, 485-500

(англ.)

292 298

316

0324

ВИНИТИ

Br_2

* 4-10892

1975

5 Д422. Фотофрагментарный спектр Br_2 . Old-
man R. J., Sander R. K., Wilson K. R. Photofrag-
ment spectrum of bromine. «J. Chem. Phys.», 1975, 63,
№ 10, 4252—4260 (англ.)

фото-
диссоц.

Фотодиссоциация молекул Br_2 в видимой и близкой
УФ-областях исследована методом фотофрагментарной
спектроскопии. Атомы Br , образующиеся в результате
фотодиссоциации молекул Br_2 -пучка, пересекающегося
в вакуумной камере с импульсным поляризованным ла-
зерным пучком, регистрировались масс-спектрометри-
чески в зависимости от угла между направлением поля-
ризации света и направлением вылета детектируемого
атома (I), а также от времени после окончания лазер-

ф. 1976, № 5

ного импульса (II). На основании I определялись квантовые числа Ω возбужденных молекулярных состояний, по II — атомные состояния, с которыми коррелирует диссоциирующее состояние молекулы. Двух- и однофотонное поглощение использованы для исследования четных (не проявляются в обычных спектрах) и нечетных состояний Br_2 соответственно. Эксперим. результаты, полученные при $18\,700$, $21\,450$ и $28\,810\text{ см}^{-1}$, подтверждают интерпретацию Маллика, в соответствии с которой видимый спектр поглощения молекулы Br_2 есть результат наложения трех переходов в состояния: $A1_u(^3\Pi)$, $B0_u(^3\Pi)$ и $1_u(^1\Pi)$. Двухфотонная фотодиссоциация обнаружена при $18\,700+9390\text{ см}^{-1}$ и $18\,700+18\,700\text{ см}^{-1}$. Выполнено предположительное отнесение четных диссоциирующих молекулярных состояний. Библ. 27.

Bu₂

*3-10892

1975

9 B154. Фотофрагментарный спектр брома. Old (man R. J., Sander R. K., Wilson K. R. Photofragment spectrum of bromine. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 10, 4252—4260 (англ.)

(м.н.)
Методом фотофрагментарной спектроскопии исследованы молек. состояния Bu₂ при однофотонном поглощении на частотах 18 780, 21 450, 28 810 см⁻¹ и при двухфотонном поглощении на частотах 28 170, 37 550 см⁻¹. Результаты, полученные в случае однофотонного поглощения, подтверждают данные др. экспериментов, что поглощение Bu₂ в видимой области спектра связано с переходами в состояния A 1_u(³Π), B 0_u⁺(³Π) и 1_u(¹Π). Процессы диссоциации при двухфотонном поглощении происходят с участием фотонов 18 780 и 9390 см⁻¹ и двух фотонов 18 780 см⁻¹. С. Н. Мурзин

X 1976 №9

*45-10892

1975

Br₂

(cnicmp)

84:81891a Photofragment spectrum of bromine. Aldman, R. J.; Sander, R. K.; Wilson, K. R. (Dep. Chem., Univ. California, La Jolla, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1975, 63(10), 1252-60 (Eng). The photofragment spectrum of Br₂ was measured at visible and near uv wavelengths by using the absorption of a single photon to probe ungerade states and double photon absorption to probe gerade states invisible in the ordinary absorption spectrum. In these expts., a pulsed polarized laser beam intersects a mol. beam in a vacuum chamber, and Br atom photodissocn. fragments are detected with a mass spectrometer (i) as a function of the angle between the light polarization direction and the recoil path of the detected atoms, measuring the Ω quantum no. of the excited mol. state, and (ii) as a function of time after the laser pulse, measuring the Λ states with which the mol. state correlates. The expt. results at 18,780, 21,450, and 28,810 cm⁻¹ are in accord with the

predictions of Mulliken that the visible absorption spectrum of Br₂ is due to transitions to the A 1_u(³Π), B 0_u+(³Π), and 1_u(¹Π) states. Double photon dissocn. processes involving absorption of one 18,780 and one 9390 cm⁻¹ photon, as well as such processes involving two 18,780 cm⁻¹ photons were found. Calcns., following Mulliken, of the approx. vertical energies of the newly obsd. final dissociative states in these double photon processes are in accord with our exptl. observations.

C.A. 1976 84
N12

70214.3655

Ch, Ph, TC

96200

Br₂ (номер
правда)

1976

#9-17266

Aten J. A., Hubers M. M., Kleyn A. W.,
Lom J. Simple trajectory calculations
on ion pair formation in alkali atom-
halogen molecule collisions. "Chem. Phys."
1976, 18, N 3-4, 311-319 (англ.)

0809 пик

795 795

1

ВИНИТИ

Bz₂

Boiurl P.

1976

экземп
к.р.

" Proc 5th Int. Conf.
Raman Spectrosc., Freiburg,
1976 " Freiburg-Breisgau,
1976, 316-317 (ann)

● (see Cl₂; III)

Br₂

* 19-14778

1976

2 Б127. Спектры возбуждения и излучательные времена жизни $\text{Br}_2\text{B}^3\Pi(\text{O}_u^+)$ в твердых инертных газах. Bondybey V. E., Bearder S. S., Fletcher Christine. $\text{Br}_2\text{B}^3\Pi(\text{O}_u^+)$ excitation spectra and radiative lifetimes in rare gas solids. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 12, 5243—5246 (англ.)

Исследованы спектры возбуждения и испускания $\text{Br}_2\text{B}^3\Pi(\text{O}_u^+)$ в матрицах неона, аргона и криптона.

Показано, что испускание во всех случаях происходит с уровня $v=0$. Это связывают с быстрой колебательной релаксацией. В отличие от хлора, безизлучательные переходы в др. электронные состояния, в том числе компоненты триплета, отсутствуют. Полученные из анализа спектров молекулярные постоянные Br_2 в $\text{B}^3\Pi(\text{O}_u^+)$ - и $\text{X}^1\Sigma^+$ -состояниях хорошо согласуются с данными по газовой фазе. Определены излучательные времена жизни $\text{Br}_2\text{B}^3\Pi(\text{O}_u^+)$ $v=0$ в Ne, Ar- и Kr-матрицах, равные соотв. 8,6; 7,6; 6,4 мксек. Путем экстраполяции для газовой фазы получено значение 12 ± 2 мксек.

В. М. Ковба

спектры
возбуждения
и испускания

X 1977 N 2

Вч 2

ХС-14778.

1976

1 Д764. Спектр возбуждения $\text{Br}_2\text{B}^3\Pi(O_u^+)$ и радиационные времена жизни в твердых инертных матрицах. Bondybey V. E., Bearder S. S., Fletcher Christine. $\text{Br}_2\text{B}^3\Pi(O_u^+)$ excitation spectra and radiative lifetimes in rare gas solids. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 12, 5243—5246 (англ.)

В инертных матрицах возбуждение молекул Br_2 в состояние $\text{B}^3\Pi(O_u^+)$ (как на различные колебательные уровни, так и в диссоциационной области) приводит к излучению с уровня $v=0$ этого состояния. Исследование спектра возбуждения флуоресценции $\text{B}^3\Pi(O_u^+)$, $v=0$, выполненное с помощью перестраиваемого лазера на красителе, позволило непосредственно измерить вклад состояния B в видимое поглощение молекул Br_2 . Полученные результаты подтверждают правильность отнесения длинноволн. плеча в видимом спектре поглощения Br_2 к переходу в состояние $\text{B}^3\Pi(O_u^+)$. Определено время жизни состояния $\text{B}(O_u^+)$, $v=0$, которое в Ar -матрице равно 7,3 мксек. Экстраполяция результатов полученных в матрицах, дает оценку (12 ± 2) мксек для времени жизни этого состояния в газовой фазе.

Библ. 11.

спектр
возбужд.

ф. 1977
N 1

1976

Br₂сметр
прислуж.

87: 191534f Selective excitation of gaseous bromine by the single longitudinal mode 4145 Å radiation of an argon ion laser. Chang, Hua; Hwang, Dah-Min (Dep. Chem., Natl. Tsing Hua Univ., Hsinchu, Taiwan). *Chin. J. Phys. (Taipei)* 1976, 14(4), 57-67 (Eng). Three new transitions in gaseous Br₂ excited by the single longitudinal mode 4145 Å radiation of an Ar ion laser were found in addn. to the 5 known transitions. The new transitions are *P*(30), *P*(37) and *P*(18) transitions which are excited up to $v = 42, 44$ and 40 of the *B*³II electronic state of the ⁸¹Br⁸¹Br, ⁷⁹Br⁸¹Br and ⁷⁹Br⁸¹Br isotopic mols., resp. and the obsd. transition frequencies are 19,429.615, 19,429.925 and 19,429.925 ± 0.007 cm⁻¹ compared with the calcd. values 19,429.62, 19,429.87 and 19,429.84 cm⁻¹. The fluorescence of the progression was also measured up to $\Delta v = 13$ for each of the 8 transitions. The obsd. and the calcd. line positions of the *P*, *R* doublets agreed with each other within the exptl. error. The relative intensities also agreed with the known Franck-Condon factor except those of a few weak lines.

C.A. 1977, 24, N24

B72

1976

Durand Ph., et al.

(corr.
civ. uoer.)

Localiz. and Delocaliz.
Quant. Chem. Vol. 2, D-B.
1976, 91-124

● (all. H₂O; III)

1976

Br₂

2 Д734. Одновременное наблюдение резонансного комбинационного рассеяния и релаксации флуоресценции Br₂, изолированного в матрице. Friedman J. M., Rousseau D. L., Bondybey V. E. Simultaneous observation of resonance Raman scattering and relaxed fluorescence in matrix isolated Br₂. «Proc. 5th Int. Conf. Raman Spectrosc., Freiburg, 1976». Freiburg — Breisgau, 1976, 284—285 (англ.)

спектр
в матрице

Получены спектры вторичного излучения молекул Br₂ в матрице аргона, связанные с флуоресценцией и комб. рас. при резонансных условиях возбуждения. При возбуждении в область дискретных колебательных уровней состояния В происходит быстрая релаксация в состояние $v=0$ с последующим переходом с излучением в состояние Х. Интенсивность одновременного комб. рас. очень мала, что затрудняет точное определение времени колебательной релаксации. При возбуждении в область зелено-голубого континуума в комб. рас. наблюдается большое кол-во обертонов. Замечено изменение контуров колебательных полос при изменении частоты возбуждающего света. Библ. 4.

М. В. Тонков

ор. 1977. №2

Вк₂

7 Д462. О природе длинноволнового смещения профилей возбуждения линий резонансного спонтанного комбинационного рассеяния относительно полос электронного поглощения. Friedman J. M., Rouseau D. L., Bondybey V. E. Origin of resonant Raman excitation profiles red-shifted from optical absorption profiles. «Phys. Rev. Lett.», 1976, 37, № 24, 1610—1613 (англ.)

1976

2, 4, 11.

Изучены спектры резонансного спонтанного комб. рас. молекул Br_2 (I), изолированных в аргоновой матрице при $T = 5-10^\circ \text{K}$ и возбуждении набором излучений Ar^+ , Kr^+ -лазеров и лазеров на растворах родаминов 6Ж и 110. Построен профиль возбуждения линии $\sim 315 \text{ см}^{-1}$ I, причем в качестве внутреннего эталона использована линия 657 см^{-1} сероуглерода (при равном содержании CS_2 и I в матрице). Обнаружено, что профиль возбуждения линии $\sim 315 \text{ см}^{-1}$ не совпадает с контуром полосы электронного поглощения и имеет максимум на частоте 18900 см^{-1} . Предположено, что частотный ход интенсивности линии $\sim 315 \text{ см}^{-1}$ в обла-

КСХ-1-57

сти $19000-22000 \text{ см}^{-1}$ обусловлен интерференцией вкладов различных ($^3\text{P}_0 + u$ и $^1\text{P}_1 + u$) электронных состояний I. Библ. 14.

И. В. А.

ф. 1977. № 2

Br₂

1846

87: 175195r Simultaneous observation of resonance Raman scattering and relaxed fluorescence in matrix isolated molecular bromine. Friedman, J. M.; Rousseau, D. I.; Bondybey, V. E. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *Proc. Int. Conf. Raman Spectrosc.*, 5th, 1976, 284 b (Eng). Edited by Schmid, Eduard D.; Brandmueller, J.; Kiefer, W. Hans Ferdinand Schulz Verlag: Freiburg/Br., Ger. The simultaneous observation of resonance Raman scattering and relaxed fluorescence in matrix isolated Br₂ in Ar yielded a vibrational relaxation time of upper limit ~10 pscc. A study of the changes in the Raman intensity as a function of incident frequency showed that the excitation profile of the fundamental vibration of Br₂ has a sharp max. near the red edge of the $^3\pi_{0+u}$ absorption. This result is interpreted as having a similar origin as equiv. behavior obsd. in charge transfer complexes, namely increased broadening of the vibrational states with vibrational quantum no.

Chemical
physics
bulletin

C.A. 1977. 87. N22

70118.6637

TC, Ph, Ch

96201

Br₂

1976

* 4-16296

Gordeev R.P., Umansky S.Ya.,
Voronin A.I. Calculations of Cl₂ and
Br₂ potential curves. "Chem. Phys.
Lett." 1976, 44, N 1, 36-40
(англ.)

(см. cl₂; 10)

755 756

0792 БИНИТИ

70106.3787

Ch, Ph, TC, MGU

Br₂ 96200 (номер)
Br₂ (Круб.)

1976

Хз-16323

Ae

Hubers M.M., Kleyn A.W., Los J.
Ion pair formation in alkali-halogen
collisions at high velocities.

"Chem. Phys.", 1976, 17, N 3, 303-325
(англ.)

(см. Cl₂; III)

0788 ммк

744 745 7 80

ВИНИТИ

60504.7267
Ch, TC

Br_2 29864

1976

* 4-12815

Hyde Robert G., Peel J. Barrie.

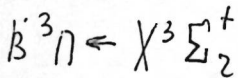
Non-empirical valence-electron
calculations on the diatomic halogens and
interhalogens.

(сщ. F_2 , III)

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1976, Part 2,
72, N 3, 571-578 (англ.)

586 591 605. 0613 ГРН ВИНІТИ

Br_2



Innes K. K.

1976

J. Quant Spectrosc
Radiat Transfer 1976,
16(5) 443-50 (eng)

(all Cl₂; III)

Br₂

#4-16667

1976

Krubec
nomes.
freper

Kahn L. R.; et al.
J. Chem. Phys.
1976, 65 n10

3826-52

Br₂

1976

85: 132998w Diatom potential curves and transition moment functions from continuum absorption coefficients: molecular bromine. Le Roy, Robert J.; Macdonald, R. Glen; Burns, George (Guelph-Waterloo Cent. Grad. Work Chem., Univ. Waterloo, Waterloo, Ont.). J. Chem. Phys. 1976, 65(4), 1485-500 (Eng). A program for calcg. u.v. mol. absorption coeffs. by using exact numerically computed radial wave functions was developed and used to examine crit. a no. of approxns. which are frequently used in absorption coeff. calcns. These tests showed that both use of the delta function approxn., and fixing the rotational quantum no. in the radial overlap integrals at $J = 0$, introduce errors of $\approx 4\%$ - 6% of the absorption coeff. max. ϵ_{max} . Similarly, errors of $\approx 1-2\%$ of ϵ_{max} are introduced by either fixing the initial state J at the average value for the given temp., or by using Gislason's Airy-function approxn. for the unbound state wave function. A simple procedure for shrinking the sum over initial state J 's without significant loss of accuracy was therefore devised. These techniques were then applied to the anal. of the visible absorption continuum of Br₂, and a nonlinear least-squares fitting procedure used to det. optimized final state potential curves and transition moment functions for the 2 overlapping electronic transitions. In the region to which the data are

nomens,
p-yus

C.A. 1976
85 N18

sensitive, $2.10 \leq R \leq 2.55$ Å, the transition moments so obtained (in debyes, lengths in angstroms) are $M_0(R) = 0.3905 + 0.265(R-2.3)$ for the $B(^3\Pi^+_{ou}) \leftarrow X(^1\Sigma^+_g)$ transitions and $M_1(R) = 0.5060 - 0.154(R-2.3)$ for the $^1\Pi_{1u} \leftarrow X(^1\Sigma^+_g)$ spectrum. The concomitant repulsive potential curves for the $B(^3\Pi^+_{ou})$ and $^1\Pi_{1u}$ states are, resp. (in cm^{-1} , expressed relative to the ground state dissocn. limit; lengths in angstroms): $V_0(R) = -1174 + 5494 \exp[-5.807(R-2.3)]$ and $V_1(R) = 7654 \exp[-4.637(R-2.3) - 0.879(R-2.3)^2]$, where the former expression applies only to the region inside the B -state inner turning point for $v = 8$, $R_1(8) = 2.4485$ Å. Comparisons with exptl. relative intensities in the discrete portion of the B - X spectrum, and with mol. beam photofragment spectroscopy measurements of the relative strengths of the 2 electronic transitions, are also reported.

1976

 Br_2

2 Д189. Определение потенциальных поверхностей и моментов перехода из коэффициентов поглощения: Br_2 . Le Roy Robert J., Macdonald R. Glen, Burns George. Diatom potential curves and transition moment functions continuum absorption coefficients: Br_2 . «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 4, 1485—1500 (англ.)

Предложен приближенный метод вычисления сечения фотодиссоциации. При расчете использованы полученные численно радиальные волн. ф-ции связанного и несвязанного состояний. Проведено сравнение коэф. поглощения ϵ системы Br_2 , рассчитанных в рамках различных приближенных методов. Показано, что метод Франка — Кондона и метод, пренебрегающий вращательной структурой состояний, приводят к ошибке в 4—6% для $\epsilon_{\text{макс}}$. Метод расчета ϵ при тепловом значении j -вращательного квантового числа приводит к ошибке в 1—2%. Осуществлена обратная процедура: по эксперим. значению ϵ определены поверхности потенц. энергии и моменты перехода в системе Br_2 . И. В. Лебедь

расчет
потенц.
энергии

ф. 1977. N 2

Вч₂

* У-12657

1976

8 Д853. Времена жизни и перенос энергии вблизи предела диссоциации брома. McAfee K. B., Jr, Hozack R. S. Lifetimes and energy transfer near the dissociation limit in bromine. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 6, 2491—2495 (англ.)

В газообразном бrome измерены длительности флуоресценции и поперечные сечения тушения отдельных колебательных и вращательных уровней состояния $B^3\Pi_{0u}+$ вблизи предела диссоциации. Обнаружено монотонное уменьшение длительности флуоресценции и увеличение поперечного сечения тушения при приближении к пределу диссоциации. Изучен перенос энергии между отдельными квантовыми состояниями брома. Библ. 14.

Резюме

(+1)

X

ф.1976. №8.

*4-12657

1976

Br₂nonres.
irrad.

181: 157602e Lifetimes and energy transfer near the dissociation limit in bromine. McAfee, K. B., Jr.; Hozack, R. S. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(6) 2491-5 (Eng). The fluorescence lifetime and quenching cross sections of several specifically excited vibrational and rotational states in the bromine $B^3\Pi_{000}^+$ state were measured near the dissociation limit. The lifetime is found to depend sharply upon J' and v' allowing the relationship between predissociation rates and quantum states to be examined in detail. Lifetimes decrease monotonically as the dissociation limit is approached. However, 1 state within a few wavenumbers of the limit was found to reverse the monotonically decreasing series. Quenching cross sections increase symmetrically as the limit is approached. Collisional energy transfer between specific quantum states is observed, but does not interfere with lifetime measurements.

C.A. 1976 84 N22

60607.1286

38100

1976

Ex-AR/KP-z, Ph, TC, MGU

Br₂⁺

*

8-13215

Murray J.R., Swingle J.C., Turner C.E., Jr. Laser oscillation on the 292-nm band system of Br₂⁺. "Appl. Phys. Lett.", 1976, 28, N9, 530-531 (англ.)

• 0630 п.к.

622

614 617

ВНИТИ

61129.3347
Ch, Ph, TC, NGU

30526GR

1976

Bx 2

* 4-15593

K p. N 61129.3346
Powles J. G., Rickayzen G.

Slow-neutron scattering by molecules. II.
Vibrating homonuclear diatomic molecules.
"Mol. Phys.", 1976, 32, N 2, 323-342

(англ.)

0756 пик

709 722

7 4 8

ВИНИТИ

* 4-16637

1976

Br₂

... Исследование спектра поглощения молекулы брома применительно к лазерному разделению изотопов. Suzuki Kazuo, Kim Pil Hyon, Taki Ko, Namba Susumu. Study of absorption spectrum of bromine molecule for laser isotope separation. «Jap. J. Appl. Phys.», 1976, 15, № 11, 2255—2256 (англ.)

Спектр поглощения молекулярного брома ($^{79}\text{Br}_2$) и с природным содержанием изотопов ^{79}Br и ^{81}Br исследован в области длин волн 5400—5700 Å при разрешении 0,1 Å. Поглощение в указанной спектральной области соответствует переходам между основным состоянием $^1\Sigma(\text{O}_g^+)$ и преддиссоциационными уровнями состояния $^3\pi(\text{O}_u^+)$ молекулы Br_2 . Исследование предпринято с целью определения предельного значения коэф. разделения изотопов при селективном однофотонном возбуждении. Показано, что при облучении природного брома лазерным светом с длиной волны, соответствующей началу полосы 1—18 перехода $^{79}\text{Br}_2(^1\Sigma - ^3\pi)$, предельное значение коэф. разделения изотопов равно 1,23. Действительное значение коэф. разделения может быть понижено в последующих химич. реакциях.

М.П.

ф. 1977
IV 6

B₂

* 8 - 17089

1976

|Re|²

186: 23964g Transition moment, radiative lifetime, and quantum yield for dissociation of the $B^1\Pi_u$ state of molecular bromine-81. Zaraga, Federico; Nogar, N. S.; Moore, C. Bradley (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 63(3), 564-71 (Eng). The elec. dipole moment of the $B \rightarrow X$ transition of B_2 was calcd. from the measured absorption of single vibration-rotation lines with a YAG laser at 558 nm to be $|R_e|^2 = 0.12 \text{ D}^2$. The corresponding radiative lifetime is $\tau_{\text{rad}} = 20 \text{ } \mu\text{s}$. Fluorescence decay times were measured, as a function of pressure, with a narrowband, N-pumped, dye laser, for vibrational levels $v' = 16, 19, 23$. The quantum yield for predissocn. at zero pressure is near unity.

C.A. 1977 86 N4

12 Б1208. Момент перехода, излучательное время жизни и квантовый выход диссоциации ${}^3\Pi_{0+}^-$ -состояния

молекулы ${}^{81}\text{Br}_2$. Zaraga Federico. Nogar N. S., Moore C. Bradley. Transition moment, radiative lifetime, and quantum yield for dissociation of the ${}^3\Pi_{0+}^-$

state of ${}^{81}\text{Br}_2$. «J. Mol. Spectrosc.» 1976, 63, № 3, 564—571 (англ.)

При использовании неодимового лазера с удвоением частоты в области 558 нм проведены измерения интенсивностей поглощения отдельных колебательно-вращательных линий ${}^{81}\text{Br}_2$ при давл. 2—10 мм. По этим данным найдено, что электр. дипольный момент перехода $B \rightarrow X$ в ${}^{81}\text{Br}_2 |R_e|^2 = 0,12 D^2$, а соотв. излучательное время жизни $\tau_{\text{изл}} = 20$ мксек. С помощью узкополосного лазера на красителе, накачиваемого лазером на N_2 , изучена кинетика затухания флуоресценции (Фл) с различных колебательных уровней в зависимости от давл. Главным каналом дезактивации возбужденного состояния $\text{Br}_2 {}^3\Pi_{0+}^-$ является преддиссоциация, квантовый

выход к-рой при нулевом давл. близок к 1. Времена жизни Фл для различных колебательных уровней воз-

Br_2

преддиссоц.

X. 1977. N12

1976

68071-528

бужденного состояния сильно зависят от колебательно-го квант. числа, составляя при нулевом давл. 0,11; 0,31 и 0,5 мксек соотв. для уровней $\nu' = 16, 19$ и 23. Для уровней $\nu' \geq 40$, согласно лит. данным, эти времена намного больше. Сечения тушения Фл молекулами Br_2 близки к газокINETИЧ. Установлены оптим. условия и ограничения разделения изотопов ^{79}Br и ^{81}Br путем изотопно-селективного возбуждения перехода $B \rightarrow X$ в молекулах Br_2 . 1) Отношение коэф. поглощения в максимуме пика и в континууме для перехода $P(49)$ в полосе 19—1 равно ~ 8 и не повышается существенным образом в областях более длинных и коротких волн. 2) Абс. коэф. поглощения $k_0/p = 0,007 \text{ см}^{-1} \cdot \text{мм}^{-1}$, т. е. для эффективного поглощения фотонов произведение давл. Br_2 и оптич. длины пути должно превышать 150 см·мм. Произведение фактора Франка—Кондона и факторов колебательной и вращательной заселенности для перехода $P(49)$ полосы 19—1 близко к максимально возможному. Поэтому оптим. для разделения является спектральная область 558 нм, где наряду с неодимовым с высокой эффективностью работает ряд лазеров на красителях. 3) Квантовый выход фотодиссоциации велик и возникающие при этом атомы Br могут быстро реагировать с добавкой HJ , давая HBr . В прямой р-ции Br_2^* с HJ не происходит образования HBr . Кроме того, при давл. выше 0,3 мм Br_2^* дезактивируются в основном соударениями. Т. обр., изотопно-селективная фотодиссоциация Br_2 в присутствии HJ может быть использована для разделения изотопов брома.

В. Е. Скурат

1976

Br₂

6 Д834. Момент перехода, радиационное время жизни и квантовый выход диссоциации состояния $^3\Pi_{0u}^+$ молекулы $^{81}\text{Br}_2$. Zaragoza Federico, Nogar N. S., More C. Bradley. Transition moment, radiative lifetime, and quantum yield for dissociation of the $^3\Pi_{0u}^+$ state of $^{81}\text{Br}_2$. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 63, № 3, 564—571 (англ.)

По результатам измерений поглощения лазерного излучения в одиночных колебательно-вращательных линиях перехода $^{81}\text{Br}_2(B-X)$, выполненных в области 558 нм с разрешением $\sim 1 \text{ см}^{-1}$, определен электрич. дипольный момент перехода $|\text{Re}|^2 = 0,12 \text{ (ед. Дебая)}^2$. Соответствующее радиационное время жизни равно $\tau_{\text{рад}} = 20 \text{ мксек}$. С помощью узкополосного перестраиваемого лазера на красителе измерены кривые распада флуоресценции с уровней $v' = 16, 19, 23$ в зависимости от давления паров Br_2 . Аппроксимация к нулевому давлению дает для квантового выхода преддиссоциации значение, близкое к единице. Рассмотрены приложения результатов к вопросам лазерного разделения изотопов брома. Библ. 16.

$|\text{Re}|^2$
кв. выход
преддисс.

ф. 1977
№ 6

68041-54

1977

Br_2
(cncurp)

87: 159529x Evidence for excited electronic state interference in resonance Raman scattering. Baierl, P.; Kiefer, W.; Williams, P. F.; Rousseau, D. L. (Sekt. Phys., Univ. Muenchen, Munich, Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 50(1), 57-60 (Eng). The complex resonance Raman spectra of Br_2 was analyzed quant. and a clear demonstration of interference in the Raman intensity from the $B(^3\Pi_{0+u})$ and $^1\Pi_{1u}$ excited states was found.

C.A. 1977 L7 N 20

1974

Br₂

1 Д402. Проявление интерференции возбужденных электронных состояний в резонансном комбинационном рассеянии. Baierl P., Kiefer W., Williams P. F., Rousseau D. L. Evidence for excited electronic state interference in resonance Raman scattering. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 1, 57—60 (англ.)

С помощью Ar⁺-лазера ($\lambda = 4880$ и 4579 Å) исследованы спектры резонансного комб. рас. молекул Br₂ в газообразном состоянии. Полученные спектры содержат серии колебательных линий, обладающих тонкой структурой, возникающей в результате переходов между различными компонентами колебательно-вращательных уровней. Проведен теоретич. анализ формы наблюдаемых линий комб. рас. Показано, что согласие теории с экспериментом может быть достигнуто только при одновременном учете в качестве промежуточных состояний двух возбужденных состояний молекул Br₂ (³P_{0u}⁺ и ¹P_{1u}). Вычисление формы линий комб. рас. проводилось с учетом интерференции вклада этих двух промежуточных состояний в амплитуду рассеяния. Библ. 18. С. П.

Спектры
резонансн.
комб. рас.

ф. 1978
N 1

Br₂

1944

Bhattacharyya S. P. et. al

J. Phys. Chem. 1944, 48,
N16, 1602-1604 (ann.)

J.M.N

cell Fe - III

Br₂

1977

87: 208887y Temperature dependence of the deactivation effectiveness of the $B^3\pi_{ou}^+$ state of iodine and bromine molecules excited by a helium-neon laser. Bugrim, E. D.; Makrenko, S. N.; Tsikora, I. L. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1977, 43(3), 424-30 (Russ). Using monochromatic laser excitation ($\lambda = 0.63 \mu$) the fluorescence of Br₂ was studied at 600 K in pure Br₂ and in mixts. of Br₂ with inert gases. The fluorescence of I₂ was studied at 300-600 K. Data on the temp. dependence cross section of self quenching and the rate of dissocn. of electron-excited I₂ was obtained. The dependence of quenching cross section of Br₂ in relation to the Selagn parameter was studied at 600 K.

смет
г. 1977



C.A., 1977, 27, 126

Вч₂

мтмси 5448

1978

UD771. Резонансная флуоресценция газообразного брома, возбуждаемая излучением 5145 Å продольно одномодового Ar⁺-лазера. Chang Hua, Hwang Dah-Min. Resonant fluorescence of gaseous bromine excited by the 5145 Å radiation of a single longitudinal mode argon ion laser. «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 65, № 3, 430—436 (англ.)

С помощью продольно одномодового Ar⁺-лазера, перестраиваемого внутри профиля линии 5145 Å, исследованы спектры резонансной флуоресценции газообразного Br₂. В дополнение к пяти известным переходам обнаружены три новых. Для всех 8 переходов измерены частоты возбуждения и положения линий флуоресценции с $\Delta\nu = 1 \div 9$. Идентифицированы линии различных изотопов и колебательно-вращательные состояния, участвующие в переходах. С точностью $\pm 0,2 \text{ см}^{-1}$ положения линий согласуются с расчетными. Относит. интенсивности линий в каждой прогрессии также согласуются с известными значениями коэф. Франка—Кондона.

В. С. Иванов

м.м.

Ф. 1978
N1

Br₂

mm. 5448

1977

(M.N)

87: 13784e Resonant fluorescence of gaseous bromine excited by the 5145 Å radiation of a single longitudinal mode argon ion laser. Chang, Hua; Hwang, Dah-Min (Dep. Chem., Natl. Tsing Hua Univ., Hsinchu, Taiwan). *J. Mol. Spectrosc.* 1977, 65(3), 430-6 (Eng). The resonant fluorescent spectra of gaseous Br₂ excited by the single longitudinal mode 5145 Å radiation of an Ar ion laser were reinvestigated. Three new transitions were found in addn. to the 5 previously reported. The excitation frequency and the fluorescent line positions from $\Delta v = 1$ - $\Delta v = 9$ were carefully measured for each of the 8 transitions. The fluorescent lines of $\Delta v = 5$ and $v = 10$ are too weak to be detected. The isotopic mols. and the vibration-rotation states involved were assigned. All the fluorescent line positions up to $\Delta v = 10$ were calcd., and they agreed with the obsd. values to within 0.2 cm⁻¹. The relative intensities in each progression also agreed with the known Franck-Condon factors.

C.A. 1977 SE N2

1977

Br₂ 2 (743)

M. H. J.

5 Д374. Исследование колебательно-вращательной структуры газообразного брома по спектрам резонансного комбинационного рассеяния. Chang Hua, Hwang Dah-Min. Resonant Raman study on vibrational-rotational structure of gaseous bromine. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 8, 3624—3628 (англ.)

Получены спектры резонансного комб. рас. паров брома при давл. 49 мм рт. ст., возбужденные линией 488 нм лазера Ar⁺ мощностью 3 Вт с разрешением 0,6—2,5 см⁻¹ в интервале частот от 1000 см⁻¹ в антистоксовой области до 3000 см⁻¹ в стоксовой, содержащей 9 колебательных гармоник. Определенная по отношению интенсивностей антистокс/стокс первых трех гармоник спектроскопич. т-ра составляла 1300° К. Приведены спектры основного тона, первого, второго и пятого обертонов и частоты компонент их полос. Отождествлены максимумы отдельных компонент О, Q и S-ветвей. Измеренные частоты полос сравнены с рассчитанными с помощью известных для 3 изотопич. молекул брома постоянных, отмечается их удовлетворительное согласие.

М. Тонков

Ф. 1978/15

Chemica 5116

Rüspert H.,

Laemann K.

1944

Br_2^-

Br_2

($A\bar{e}$)

"Chem. Phys. Lett.",
1977, 47, N 3, 533-536.

1K-2855-41
B9-5582-41



($car. Cl_2^-$) III

1977

Br₂

CNCNIP

88: 81613u Construction and evaluation of a high resolution pressure tuned dye laser: spectroscopic studies of the B ³II(O_u⁺) state of molecular bromine. Heaven, M.; Clyne, M. A. A. (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, Engl.). *Lasers Chem., Proc. Conf.* 1977, 107-11 (Eng). Edited by West, Michael A. Elsevier: Amsterdam, Neth. A N-pumped multielement dye laser is described. The laser is designed for use in both high (0.04 cm⁻¹) and low resolu. (0.4 cm⁻¹) spectroscopy. Bandwidths >0.001 nm have been achieved, and the laser may be pressure scanned with a linearity error of <0.3%, over a wavelength scan range of up to 30 cm⁻¹ (1 nm at 580 nm). The evaluation of this laser is described, together with recently completed high resolu. studies of the Br₂ B ³II(O_u⁺) state, using B-X fluorescence.



C.A., 1978, 22, N12

Br₂

оттиск 5705

1977

2 Д323. Лазерная фотодиссоциационная спектроскопия: Br₂. Lindeman T. G., Wiesenfeld J. R. Laser induced photodissociation spectroscopy: Br₂. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 3, 364—367 (англ.)

Измерены относит. интенсивности переходов $B^3\Pi_{0+u} \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ и $^1\Pi_{1u} \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ в непрерывном диссоциационном спектре поглощения молекулы Br₂. Под действием излучения импульсного лазера на красителе молекулы Br₂ диссоциируют на Br ($4^2P_{1/2}$) + Br ($4^2P_{3/2}$) или 2 Br ($4^2P_{3/2}$) при переходах в состояние $^3\Pi$ и $^1\Pi$ соответственно. Концы атомов Br ($4^2P_{1/2}$) и Br ($4^2P_{3/2}$) контролировались с помощью разрешенной во времени резонансной абсорбционной спектроскопии. Измеренные значения отношения интенсивностей переходов $^3\Pi/^1\Pi$ при 18350, 21010 и 22125 см⁻¹ равны 0,4; 13 и 1,8 соответственно.

В. С. Иванов

лазерная
фотодиссоциационная
спектроскопия

ф. 1978
№ 2

1944

Br₂

ommuca 5705

саяер бозо.
чиркит
гомогенно

87: 191814x Laser induced photodissociation spectroscopy: molecular bromine. Lindeman, T. G.; Wiesenfeld, J. R. (Dep. Chem., Cornell Univ., Ithaca, N. Y.). *Chem. Phys. Lett.* 1977, 50(3), 364-7 (Eng). The continuous absorption spectrum of mol. Br was examd. using laser induced photodissocn. spectroscopy. In this technique, Br₂ mols. are photolyzed using a flashlamp-pumped dye laser; the at. products of the dissocn. are then monitored by time-resolved resonance absorption spectroscopy in the vacuum UV. The relative absorptivities for the transitions $B^3\Pi_{0+u} \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ and $^1\Pi_{1u} \leftarrow X^1\Sigma_g^+$ were obtained at 18,350, 21,010 and 22,125 cm⁻¹.

C.A., 1944, 17, V24

Br₂

М. И.

2. 1048
113

3 Б159. Спектроскопия фотодиссоциации индуцированной лазером. Br₂. Lindeman T. G., Wiesenfeld J. R. Laser-induced photodissociation spectroscopy: Br₂. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 3, 364—367 (англ.)

Измерены относит. коэф. поглощения $\epsilon(^3\Pi)/\epsilon(^1\Pi)$ для переходов $B^3\Pi_{O+} - X^1\Sigma_g^+$ и $^1\Pi_{1u} - X^1\Sigma_g^+$ молекулы Br₂ в области континуума (450—480 нм). Состояние $B^3\Pi_{O+}$ Br₂ коррелирует с Br(⁴2P_{1/2}) + Br(⁴2P_{3/2}), а состояние $^1\Pi_{1u}$ — с Br(⁴2P_{3/2}) + Br(⁴2P_{3/2}). Методом атомно-абсорбц. спектроскопии с временным разрешением измерялась концентрация атомов брома в основном (⁴2P_{3/2}) и возбужденном (⁴2P_{1/2}) состояниях, образующихся в результате фотодиссоциации молекул брома под действием импульсного лазерного излучения. Значения $\epsilon(^3\Pi)/\epsilon(^1\Pi)$ при 18 350, 21 010, 22 125 см⁻¹ равны 0,4; 13; 1,8. Константа скорости дезактивации Br(⁴2P_{1/2}) за счет столкновений с молекулами брома ($p_{Br_2} = 0,008—0,020$ мм) равна $(1,1 \pm 0,1) \times 10^{-12}$ см³ молекула⁻¹ сек⁻¹.

В. М. Ковба

1977

5705

оттиски

Br_2

ommuch 5757

1977

Lowe J. P.

(Ae; J)

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

Br₂

(OM. 37566)

1977

Macdonald R.G., Burns G.,
Boyd R.L.,

J. Chem. Phys., 1977, 66, N8,
3598 - 3608

Dissociation of
Waves.

Br₂ in shock

Br₂

ommueu 5694

1977

Sanyal Nitish K. et al.

"Indian J. Pure and Appl.
Phys." 1977, 15, N 4, 242-245
(amcl.)

ссыл. посыл.
ср. ампл.
квалит.

ам. Cl₂ - III

Br₂

ommu 5415 1977

Tellinghuisen J.

Chem. Phys. Lett., 1977

49, N3; 485-490

The ultraviolet laser transitions in I₂ and Br₂
(see I₂; iii)

70422.7515
Ph, Ch, TC

30526GR

1977

Br₂ (кв. сек.
расчет)

4-18035

K p.N. 70422.7514

Teichteil Ch., Malrieu J.P.,
Barthelat J.C.

Non-empirical pseudopotentials for molecular calculation. II. Basis set extension and correlation effects on the X₂ molecules (X=F, Cl, Br, I).

"Mol. Phys.", 1977, 33, N 1, 181-197
(англ.)

coll. F2, III

813 816

850

0859 ПКК

ВИНИТИ

Вх 2

оттиски 5674

1977

4 Д323. Эффект Ханле для молекул брома. Vlieger G. de, Eisendrath H. Hanle effect in bromine molecules. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1977, 10, № 12, L463—L467 (англ.)

Методом Ханле исследованы некоторые колебательно-вращательные уровни состояния $^3\pi_{0u} +$ молекул $^{81}\text{Br}_2$ и $^{79}\text{Br}_2$, возбуждаемые излучением $d=5145 \text{ \AA}$ одномодового Ar^+ -лазера. Определены g -факторы и сечения деполяризующих столкновений. Показано, что наличие сверхтонкой структуры не искажает заметным образом форму сигнала Ханле и не меняет величину g -факторов. Большие значения измеренных g -факторов (от 1,54 до 2,7) объяснены близостью исследованных уровней к диссоциационному пределу молекулы.

ф. 14, 1978

1977

Ommen 5674

Br₂

87: 191441y Hanle effect in bromine molecules. De Vlieger, G.; Eisendrath, H. (Vrije Univ. Brussel, Brussels, Belg.). *J. Phys. B* 1977, 10(12), L463-L467 (Eng). Hanle-effect studies of several vibration-rotation sublevels of the $B^3\Pi_{ou}^+$ state of $^{79}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$ gave values of the rotational Lande factor and the cross section for collisional destruction of alignment. The fluorescence spectra of $^{79}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$ as well as $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$ were also obsd. States were populated by exploiting the coincidence of the 5145-Å Ar⁺ laser line with the electronic transition $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^3\Pi_{ou}^+$.

check
grayspecs.

C.A., 1977, 24, N24

Вч₂

Lommuu 8416 | 1978

М.Н.

05304

Раман-
спектр

Asundi R.K., et al.

Indian J. Pure and Appl.

Phys., 1978, 16, p.142-150.

Br₂

Lammere 8415 | 1978

Asundi R.K., et al.

Обзор.
вращ. пост.
Синх. вращ.
разрешения

Indian J. Pure
and Appl. Phys.
1978, 16, 135-141

1978

Br₂

92: 188713m Theoretical analysis of the resonance Raman spectra of bromine vapor. Baierl, P.; Kiefer, W. (Physiol. Inst., Univ. Muenchen, D-8000 Munich, 2 Fed. Rep. Ger.). *Proc. Int. Conf. Raman Spectrosc.*, 6th 1978, 2, 118-19 (Eng). Edited by Schmid, Eduard D.; Krishnan, R. S.; Kiefer, W. Heyden: London, Engl. Exptl. obsd. and theor. calcd. resonance Raman spectra of Br₂ vapor are presented. This work represents the 1st observation of interference effects in a system simple enough that fundamental quant. calens. could be made. The results indicate the need for great care when attempting to interpret resonance Raman data.

(cuvet)

CA 1980 92 v22

Br₂

1948

Bhattacharyya S.P.

Indian J. Chem. Sect A.
1948, 16A(1), 4-6

(4)

кб. мех.
повреж.

см. Br F - III

Br₂

OMMUCK 7447

1978

laser log
cmmip

90: 46174w Kinetics of excited states of bromine using laser excitation. Part 1. System description and rotationally-dependent lifetimes in bromine(B). Clyne, Michael A. A.; Heaven, Michael C. (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1978, 74(11), 1992-2013 (Eng). A pressure-tuned narrow-band dye laser was used to provide linear scans, free of mode-hops, of parts of the Br₂ (B-X) band spectrum in laser-induced fluorescence. The resoln. of the system was Doppler-limited. Measurements of the collision-free lifetimes of Br₂(B) excited mols. were made over a range of rotational states for several vibrational states. A strong dependence between the inverse lifetimes and rotational quantum no. was found which was attributed to heterogeneous predissocn. of the emitting B³Π(O_u⁺) state by a Π(1_u) state. The mean value of the radiative, rotation-free lifetime was 8.1 μs over the range of vibrational states studied. Virtually all the band absorptions of Br₂ between 540 and 590 nm lead to formation of ²P_{3/2} + ²P_{3/2} Br atoms via predissocn.

CA. 1979, 90, N6

Br₂ 2

спектр
флуоресценции

1978

11 Б1318. Изучение кинетики возбужденных состояний Br₂ при помощи лазерного возбуждения. Часть 1. Описание системы и зависящие от вращательных состояний времена жизни Br₂(B). Clyne Michael A., Heaven Michael C. Kinetics of Excited States of Br₂ using laser excitation. Part 1. System description and rotationally-dependent lifetimes in Br₂(B). «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, 74, № 11, 1992—2013 (англ.)

При помощи перестраиваемого импульсного узкополосного (спектральная ширина излучения 1 пм) лазера на красителе в области 540—590 нм изучены спектры возбуждения флуоресценции Br₂ при т-ре 298° К и давл. ~10 мкм в переходе $B^3\Pi(O_u^+) - X^1\Sigma_g^+$. Эта область длин волн соответствует полосатому спектру поглощения Br₂, лишь в ее коротковолновой части имеется значительный вклад от соседнего континуума. Измерены бесстолкновительные времена жизни τ_0 возбужденных молекул Br₂* [$B^3\Pi(O_u^+)$] в зависимости от вра-

2.1979, N11

щательного квант. числа J' для различных колебатель-
 ных уровней $\nu' = 11-23$. Обнаружена сильная зависи-
 мость величины $\Gamma_0 = 1/\tau_0$ от J' , к-рая приписана гетерог.
 предиссоциации излучательного состояния $B^3\Pi(O_u^+)$
 вследствие пересечения его потенц. поверхности с по-
 верхностью оттакливательного состояния $^1\Pi(1_u)$. По-
 лученные результаты могут быть представлены соотно-
 шением $\Gamma_0 = \Gamma_R + k_\nu J'(J'+1)$, где средняя величина из-
 лучательного времени жизни в отсутствие вращатель-
 ного возбуждения $\tau_R = 1/\Gamma_R = 8,1$ мксек при $\nu' = 11-24$.
 Показано, что в бесстолкновительных условиях (давл.
 $Brg_2 \leq 1$ мкм) квант. выход флуоресценции при возбуж-
 дении в области 540—590 нм не велик: он равен 0,052
 для наименее предиссоциирующего уровня $\nu' = 24$ и
 0,043 для наиболее предиссоциирующего уровня. Таким
 образом, основная доля ($\sim 95\%$) молекул $Brg_2[B^3\Pi(O_u^+)]$
 должна предиссоциировать. Отсюда сделан вывод о
 возможности инициирования фотохим. р-ций с участи-
 ем атомов Вг путем облучения Brg_2 длинноволновым све-
 том в области 600 нм.

В. Е. Скурат

Br₂

7 Д768. Исследование кинетики возбужденных состояний молекул Br₂ методом лазерного возбуждения. Ч. I. Описание методики и получение времен жизни Br₂ (B), зависящих от вращательного возбуждения. Clyne Michael A. A., Heaven Michael C. Kinetics of excited states of Br₂ using laser excitation. Part 1. System description and rotationally-dependent lifetimes in Br₂ (B). «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1978, Part 2, 74, № 11, 1992—2013 (англ.)

1978

Описана конструкция импульсного лазера на красителе, перестраиваемого путем изменения давления газа, заполняющего часть объема лазерного резонатора. Спектральная область перестройки лазера 573—605 нм. С разрешением, ограниченным лишь доплеровским уширением, получены спектры флуоресценции паров Br₂, возбуждавшиеся излучением упомянутого лазера. Полосы спектров отнесены к системе переходов $B \rightarrow X$ ($23 \geq v' \geq 11$). Исследование кинетики затухания компонентов тонкой структуры спектров позволило установить сильную зависимость времен жизни уровней от степени вращательного возбуждения. Среднее время жизни колебательных уровней $23 \geq v' \geq 11$ ($J' = 0$) составляет 8,1 мксек. Установлено, что поглощение молекулами Br₂ излучения в спектральной области 540—590 нм приводит к образованию атомов Br в состоянии $^2P_{3/2}$ через преддиссоциацию. Библ. 26.

спектр
флуоресценции

рнс Физ,
1978
№ 7

М. Т.

Br₂

Number 6773

1978

Schaeferberge P.

Theor. chim. acta, 1978, 49,

115-22.

издано
павлов,
конспект

Br_2^-

1948

Tam W.-Ch., Wong S. F.

J. Chem. Phys., 1948, 68, n 12,
5626-5630 (англ.)

обрат.
ионов



(св. Cl_2^- ; 11)

ВФ-Х1-6344 1948

Br₂

5 Д1099. УФ-лазерные переходы в J₂ и Br₂. Tel-linghuisen J. Ultraviolet laser transitions in I₂ and Br₂. «High-Power Lasers and Appl. Proc. 4th Colloq. Electron. Transit. Lasers, Munich, 1977». Berlin e. a., 1978, 110—113 (англ.)

спектр.
постоян.

Исследована структура эмиссионных спектров молекул ^{127,127}J₂ и ^{79,79}Br₂ в полосах 3400 и 2900 Å соответственно. Определены спектроскопич. константы переходов и оценено радиационное время жизни верхних уровней обеих молекул (~20 нсек). Сделан вывод, что указанные переходы принадлежат к системе D¹→A¹, а не E→B, как предполагалось ранее. Рассмотрены особенности генерации лазерного излучения при переходах D¹→A¹ в молекулах J₂ и Br₂. Отмечено, что низкая выходная мощность и малая эффективность существующих J₂- и Br₂-лазеров в определенной степени обусловлены поглощением лазерного излучения молекулами, находящимися в возбужденных состояниях, в частности, в состоянии D¹.

С. Л.

(+1) [X]

ф. 1049, 115

1979

Br₂Raman
excitp

91: 29892g Resonance Raman spectra of bromine: scattering cross-sections for simultaneous resonance with two excited states, $B^3\Pi(O^+)$. Coxon, J. A.; Gramari, N.; Jacou, M. (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can.). *J. Raman Spectrosc.* 1979, 8(2), 63-72 (Eng). A quant. interpretation is presented of the resonance Raman excitation profile (REP) of Br₂. This is the 1st example of a diat. mol. where 2 excited electronic states, $B^3\Pi$ and $^1\Pi$, strongly intervene in the Raman tensor. The numerical calcs. of all the Franck-Condon factors and densities for both excited electronic states using RKR methods are presented. The results are then applied to the calcs. of the REP. This rigorous calcn. is compared with an approx. method, the reflection approxn. The main properties of the REP, in particular the presence of a strong max. on the red wing of the absorption band, are accounted for by the present theory and the contributions of the 2 excited electronic states are discussed.

O.A. 1979, 21, N4

Вч₂

Вшшшш 8242
оттшшш 8226

1979

10 Д223. Эффективные колебательные потенциалы для брома в аргоне. Расчет методом Монте-Карло для смешанного ансамбля. Freasier B. C., Jolly D. L., Hamer N. D., Nordholm Sture. Effective vibrational potentials of bromine in argon. Monte Carlo simulation in a mixed ensemble. «Chem. Phys.», 1979, 38, № 3, 293—300 (англ.)

Методами статистич. механики рассмотрено влияние среды на внутренние свойства примесных молекул в

плотных газах или жидкостях. Межмолекулярный потенциал выбран в виде ф-ции Леннард-Джонса. С использованием метода Монте-Карло вычислены плотность вероятности различных значений длины связи и эффективная потенц. энергия молекул Br_2 в аргоне при различных т-рах и плотностях смеси. М. Р. Алиев

длина
связи,
колебат.
потенц.

Ф.1049/110

Br₂

1979

10 Д78. Анализ дальнего действующего потенциала [молекулы] $^{79}\text{Br}_2$ в $B^3\Pi^+_{0u}$ -состоянии и молекулярные константы трех изотопных разновидностей брома: $^{79}\text{Br}_2$, $^{79,81}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$. Analysis of the long range potential of $^{79}\text{Br}_2$ in the $B^3\Pi^+_{0u}$ state and molecular constants of the three isotopic bromine species $^{79}\text{Br}_2$, $^{79,81}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$ / Gerstenkorn S., Luc P. // J. phys. (Fr.).— 1979.— 50, № 12.— С. 1417—1432.— Англ.; рез. фр.

С помощью мультипольного разложения энергий взаимодействия вплоть до слагаемого C_{10}/R_v^{10} при пренебрежении энергией обмена и влиянием сверхтонкой структуры проведен анализ внешней ветви потенциала молекулы $^{79}\text{Br}_2$ в состоянии $B^3\Pi^+_{0u}$. Показано, что значение предела диссоциации D_c и величины коэф. C_n не зависят от числа рассматриваемых точек возврата. В соответствии с классич. изотопными соотношениями вычислены колебательные энергии и

М.П.

фр. 1989, № 10

вращательные постоянные молекул $^{181}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$ при известных константах для молекулы $^{79}\text{Br}_2$. Найдено, что относительно основного уровня $X^1\Sigma^+_g$ ($v=0$, $J=0$) предел диссоциации D'_0 -состояния B , принадлежащего молекуле $^{79}\text{Br}_2$, равен $19579,692(10)$ см^{-1} , в то время как значения величин D_c'' , D_c' и $T_{c,c}$ равны соответственно $3839,592(8)$, $16056,926(14)$ и $15902,480(6)$ см^{-1} . Кроме того, с использованием теории возмущений вычислены константы D_v , H_v , L_v , M_v и приведен набор молекулярных постоянных, позволяющих заново вычислить спектр поглощения естественного брома.

А. Т.



1979

Br₂

спектр

23 Б140. Измерение поглощающей способности континуума $A^3\Pi_{1u}-X^1\Sigma_g^+$ в Br₂. Hemenway C. P., Lindeman T. G., Wiesenfeld J. R. Measurement of the $A^3\Pi_{1u}-X^1\Sigma_g^+$ continuum absorptivity in Br₂. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 7, 3560—3561 (англ.)

Измерено слабое непрерывное поглощение в области перехода $A^3\Pi_{1u}-X^1\Sigma_g^+$ молекулы Br₂, с помощью непрерывного перестраиваемого лазера с полушириной 0,03 нм. Для подавления тесной вращательной структуры системы B—X, перекрывающей континуум A—X, внутри резонатора лазера помещали поглощающую ячейку с окна под углом Брюстера, наполненную Br₂ при давл. 2 мм. Поглощение измеряли во внерезонаторной ячейке длиной 1 м, наполненной Br₂ до давл. 22 мм. Рассчитаны молярные коэф. поглощения при 10 длинах волн от 616,3 до 570,3 нм, изменяющиеся от $1,75 \pm 0,24$ до $6,42 \pm 0,19$ моль⁻¹ см⁻¹ соотв. Показа-

X. 1979 N 23

но, что наблюдаемое поглощение связано только с переходом $A-X$. Континуум $A-X$ составляет 40—70% поглощения в спектре низкого разрешения $Bг_2$ в области 590 нм, что качественно согласуется с результатами, полученными др. методами. Контур поглощения представлен в виде: $\varepsilon(\nu) = K \exp[-(\nu - \nu_0)^2 / \Delta^2]$, где K — амплитуда, ν_0 — положение, Δ — полуширина. Определены параметры $K = 5,1 \pm 0,3 \times 10^{-4}$ моль $^{-1}$, $\nu_0 = 18\,590 \pm \pm 75$ см $^{-1}$, $\Delta = 1,8 \pm 0,1 \cdot 10^3$ см $^{-1}$. Полученные результаты в пределах эксперим. ошибки хорошо согласуются с лит. данными.

С. Б. Осин

1979

Br₂

11 Д460. Измерение поглощения в континууме Br₂(A³Π_{1u}—X¹Σ_g⁺). Hemenway C. P., Lindeman T. G., Wiesenfeld J. R. Measurement of the A³Π_{1u}—X¹Σ_g⁺ continuum absorptivity in Br₂. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 7, 3560—3561 (англ.)

измерение
поглощ.

С помощью непрерывного перестраиваемого лазера на красителе измерены коэф. поглощения в континууме Br₂(A³Π_{1u}—X¹Σ_g⁺) в области 616,3—570,3 нм. Ширина полосы лазера 0.03 нм была недостаточна для того, чтобы разделить дискретное поглощение B—X и континуальное A—X. Для устранения излучения, приходящегося на переходы B—X, внутрь резонатора была помещена кювета (длина 34 см), наполненная парами (давл. 2 мм рт. ст.) Br₂. Отсутствие поглощения B—X подтверждено отсутствием флуоресценции, возбуждаемой при этом переходе.

В. С. Иванов

Ф.1079/НН

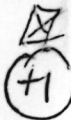
Br₂

1979

(11-Д525.) Лазерные исследования эффекта клетки в газах при высоких давлениях. Фотодиссоциация иода и брома. A laser study of the cage effect in high-pressure gases. Iodine and bromine photodissociation. Hipp-ler H., Luther K., Maier M., Schroeder J., Troe J. «Laser-Induced Process. Mol.: Phys. and Chem. Proc. Eur. Phys. Soc. Div. Conf., Edinburgh, 1978». Berlin e. a., 1979, 286—289 (англ.)

Эффект клетки, т. е. эффект уменьшения в плотных средах выхода фотофрагментов вследствие их обратной рекомбинации, исследован для J₂ и Br₂ в различных газах (при давл. 0,1÷200 мм рт. ст.) в зависимости от длины волны фотолизирующего излучения. Установлено, что: 1) пороговые плотности эффекта клетки уменьшаются при увеличении длины волны возбуждающего излучения; 2) форма кривой зависимости квантового выхода фотофрагментов от давления заметно меняется при изменении длины волны и 3) квантовый выход при больших плотностях практически не зависит от длины волны.

В. С. Иванов

фотодис-
социация

ф. 1981, 18, №11.

1979
15 B1186. Наблюдение анти-стоксова резонансного комбинационного рассеяния газообразного брома при возбуждении в области 5145Å. Observation of anti-stokes resonance raman signals of gaseous bromine with 5145 Å excitation. Hwang Dah-Min, Chang Hua. - «J. Chin. Chem. Soc.», 1979, 26, № 1, 1—4 (англ.)

Изучены резонансные спектры КР насыщ. паров Br_2 (I) при $T \sim 0^\circ$ (давл. ~ 49 Торр). Спектры возбуждали линиями $\lambda = 4880$ и 5145Å аргонового лазера, в спектрах проведены поляризац. измерения. В обоих случаях в спектрах наблюдали по 4 анти-стоксовых линии КР ($\Delta V = \text{от } -1 \text{ до } -4$) и по 6 стоксовых линий основного колебания $\Gamma \omega \sim 323 \text{ см}^{-1}$ и его обертонов. Распределение интенсивностей линий хорошо коррелирует со значениями факторов Франка—Кондона для Γ . Т. о., резонансный спектр КР Γ наблюдается и при возбуждении линией $\lambda = 5145\text{Å}$ ниже границы диссоциации Γ . Однако в стоксовой области он маскируется сильными линиями резонансной флуоресценции.

А. В. Бобров

Вз2
спектр
X. 1984, 19, N 15

Br₂

1979

91: 46713u Observation of anti-Stokes resonance Raman signals of gaseous bromine with 5145 Å excitation. Hwang, Dah-Min; Chang, Hua (Dep. Phys., Natl. Tsing Hua Univ., Hsinchu, Taiwan 300). *J. Chin. Chem. Soc. (Taipei)* 1979, 26(1), 1-4 (Eng). A 5145-Å laser line was used to excite gaseous Br₂ to observe the resonance Raman effect. In the Stokes side, strong resonance fluorescence is overwhelming. Therefore the resonance Raman scattering could not be detected. However, in the anti Stokes side, 4 resonance Raman peaks were obsd. The corresponding transitions are $\Delta v = -1$ to -4 . The resonance Raman spectrum excited by the 4880-Å laser line was presented for comparison.

lazer boz.

Cuear

C.A. 1949, 9, 1, N6

Br₂

1979

Rießer W., Baierl P.

Acta phys. austr., 1979, Suppl.
N^o 20, 43-73.

Chikmush
K. P.

●
1ccr. I₂ ; III)

1979

Br₂

92: 101798w Laser spectroscopic studies of bromine. Lindeman, Theodore George (Cornell Univ., Ithaca, NY USA). 1979. 86 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. 7926924. From *Diss. Abstr. Int. B* 1979, 40(6), 2689-90.

лазерная
спектроскопия

Запрет!
мич.

С.А. 1980.92.112

Br_2

4 Б128. Фотодиссоциация Br_2 в области видимого континуума. Lindeman T. G., Wiesenfeld J. R. Photodissociation of Br_2 in the visible continuum. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 6, 2882—2888 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера на красителях исследована фотодиссоциация молекул брома в области 434—511 нм с образованием атомов брома в основном ($4^2P_{3/2}$) и возбужденном ($4^2P_{1/2}$) состояниях. Измеряли поглощение резонансного излучения атомарного брома (переход $5^2P_{3/2} \rightarrow 4^2P_{3/2}$) в зависимости от частоты лазера. Фотодиссоциация является результатом трех электронных переходов: $X^1\Sigma^+ \rightarrow A^3\Pi_{1u}$, $B^3\Pi(O_u^+)$, Π_{1u} . В случае состояния $A^3\Pi_{1u}$ и $^1\Pi_{1u}$ при этом образуются два атома брома в основном состоянии, а в случае состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ — один. Проанализированы профили поглощения и вычислены относит. вклады каждого перехода в суммарный континуум. Значения ν_0 , $\Delta\nu$ (в см^{-1})

фотодиссоциация

X-1980.N4

и $K(\times 10^3 \text{ л моль}^{-1})$ для каждого перехода (в предположении, что полосы отдельных переходов имеют гауссовскую форму): $B \rightarrow X$ — 20 624, 1900, 3,41, $^1\Pi_{1u} \rightarrow X$ — 24032, 2480, 6,92, $A \rightarrow X$ — 19424, 1310, 0,772. Полученные данные согласуются с результатами измерений спектров магнитного КД и спектров испускания. Отмечается, что переход $A \rightarrow X$ вносит заметный вклад (15—20%) в общее поглощение в области 510 нм и его игнорирование приводит к существенной переоценке интенсивности перехода $B \rightarrow X$ в этой области. В. М. Ковба

1979

Br₂

12 Д857. Фотодиссоциация Br₂ в видимом континууме. Photodissociation of Br₂ in the visible continuum. Lindeman T. G., Wiesenfeld J. R. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 6, 2882—2888 (англ.)

Исследована фотодиссоциация молекул Br₂ в области 434—511 нм. Источником фотолизирующего излучения служил импульсный перестраиваемый лазер на красителе. Относит. выход атомов Br(⁴²P_{1/2}) определялся по результатам измерений во время изменения пропускания резонансного излучения Br(⁵²P_{3/2} → ⁴²P_{3/2}), λ = 148,9 нм. Оценены вклады отдельных переходов ¹Π_{1u}, B³Π_{0u}⁺, A³Π_{1u} ← X¹Σ_g⁺ в полное поглощение. Полученные результаты хорошо согласуются с данными других прямых измерений и свидетельствуют о том, что вкладом перехода A³Π_{1u} ← X¹Σ_g⁺ в видимый континуум молекулы Br₂ пренебрегать нельзя. Библ. 29.

В. С. Иванов

фото-
диссоц.

Ф. 1079, № 12

Br₂

1979

photo-
chemistry

90: 195537u Photodissociation of diatomic bromine in the visible continuum. Lindeman, T. G.; Wiesenfeld, J. R. (Dep. Chem., Cornell Univ., Ithaca, N. Y.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(6), 2882-8 (Eng). The photodissocn. of Br₂ at 434-511 nm was studied by using the technique of laser-induced photodissocn. spectroscopy. Following photolysis of Br₂ with a tunable dye laser, prodn. of Br atoms in the electronically excited $4^2P_{1/2}$, and ground, $4^2P_{3/2}$, states was monitored by observing the attenuation of the at. resonance emission line, $5^2P_{3/2} \rightarrow 4^2P_{3/2}$, at 148.9 nm. Anal. of the absorption profiles yielded the relative contribution to the visible continuum of the $B\ ^3\Pi_0 + u \leftarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ transition. Ests. of the abs. absorptivity for the transitions $1\Pi_{1u}$, $B\ ^3\Sigma_0 + u$, $A\ ^3\Pi_{1u} \leftarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ were obtained by application of the reflection principle. These results are in excellent agreement with previous direct measurements but suggest that models of the Br₂ absorption continuum which neglect the $A\ ^3\Pi_{1u} \leftarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ transition are likely to be in error.

C.A. 1979, 90, N24

Br₂

Lohr H. L., Jr.,
et al.

1979

кв. мех.
расчит
дл. эмпы.

Chem. Phys. Lett.,
1979, 62 (2), 333-38

(см. I_2 , III)

Br₂

ammun 8901

1979

CUA. Net.

Ohwada K.

Spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-57.

Br_2

номер 7788

1979

Sam C. L.; et al.

$\text{B} \rightarrow \text{X}$

исследования.

Chem. Phys. Lett.

при

1979, 61 (3), 509-512

гребенке

CBr_4 , CF_2Br_2

Br_2

21 Б138. Амплитуда дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения в молекуле брома. Stern Edward A., Heald Steve M., Bunker Bruce. Amplitude of the extended-X-ray-absorption fine structure in bromine molecules. «Phys. Rev. Lett.», 1979, 42, № 20, 1372—1375 (англ.)

1979

спектры
поглощения

Для выяснения различий между эксперим. и теор. амплитудой дальней ТС рентгеновского K -спектра поглощения (ДТСРСП) молекулы Br_2 проведены измерения ДТСРСП газ. и жидк. образцов Br_2 с возбуждением синхротронным излучением. Приняты спец. меры по устранению зависимости амплитуды ДТСРСП от вида образцов, их негомогенности, эффектов разупорядочения и небольших изменений эксперим. условий. Показано, что несоответствие с теорией в ранних исследованиях ДТСРСП Br_2 обусловлено эксперим. ошибками. Новые эксперим. данные хорошо согласуются с рассчитанными в одноэлектронном приближении амплитудами вблизи K -края и лежат на 20% ниже соотв-щих теор. значений при больших энергиях. Зависимость точности вычисленных амплитуд от энергии обусловлена пренебрежением в расчете многоэлектронными эффектами, оценка величины к-рых согласуется с наблюдаемой энергетич. зависимостью амплитуды эксперим. ДТСРСП.

20.10.79, ИИ

И. А. Тополь

BT 2

1979

Tellinghuisen Joel

спектр
уменьш.

Top Meet. Excim. Lasers.

Fig. Techn. Pap., Charleston.

S.C., 1979

см Xccl ; III

1979

Br₂

Wampler F.B; et al.

chem
gr. spectroscopy.

J. Chem. Phys., 1979,
71 (10), 3926-30.

(em. CF₂; III)

ammuc 9913

1980

Br₂

92: 188660s Continuum resonance Raman scattering of light by diatomic molecules. II. Theoretical study of the Q branches of $\Delta n = 1$ profiles of molecular bromine. Atabek, O.; Lefebvre, R.; Jacou, M. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(4), 2683-93 (Eng). The methods developed earlier for the calcn. of continuum resonance Raman scattering amplitudes are applied to the calcn. of the Q branches of the $\Delta n = 1$ profiles of Br₂ which were measured by Baierl and Kiefer (1975). While the amplitudes may vary substantially with the rotational no. of the initial state, almost no effect is introduced by taking into account the changes in rotational quantum nos. which accompany transitions between different electronic states. The profiles are then calcd. with the potentials available for the $^1\Pi_u$ and $B(^3\Pi_0^+)$ excited states which, as shown by previous workers, interfere strongly in producing the spectra. The effect can be examd. of (1) using semiclassical scattering amplitudes rather than the more accurate coupled channel results, (2) using

(cncwp)

BP-XI-6324

CA 1980 92 v22

k -dependent electronic transition moments instead of const. ones, (3) introducing the effect of the angular momentum quantum no. J instead of the using the amplitudes calcd. for $J = 0$, (4) choosing the potentials among those derived from absorption data. The semiclassical procedure is fairly accurate. This success indicates that a Raman profile for a given exciting wavelength represents in fact a very local test (over a range of $\sim 0.03 \text{ \AA}$) of the excited states potentials. Changing the wavelength from 5017 to 4579 $\text{\AA}$ (2 of the lines available from an Ar ion laser) amts. to scanning each of the potentials over a region of no more than 0.1 $\text{\AA}$. The changes in the scattering amplitudes brought about by the introduction of varying electronic transition moments can be correlated with the values taken by the moments at the radiative crossing points. The effect of J on the amplitudes is masked in the profiles as a result of superposition effects. None of the published potentials was able to fit all 5 profiles. A local downward displacement of the potentials for the $1\Pi_{1u}$ and $B(3\Pi_{0+u})$ states removes the main unsatisfactory features of the spectra.

Оттиски 9913

1980

Br₂теоретич.
исследов

Q-ветви

 $\Delta n = 1$ контур
молекулы

X. 1980 N 24

24 Б122. Непрерывное резонансное комбинационное рассеяние света двухатомными молекулами. II. Теоретическое исследование Q-ветвей $\Delta n = 1$ контуров молекулярного брома. Atabek O., Lefebvre R., Jacson M. Continuum resonance Raman scattering of light by diatomic molecules. II. Theoretical study of the Q branches of $\Delta n = 1$ profiles of molecular bromine. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 4, 2683—2693 (англ.)

Разработанные авторами методы вычисления амплитуд непрерывного РКР двухатомными молекулами, изложенные ранее, использованы для расчета Q-ветвей $\Delta n = 1$ контуров молек. брома при $\lambda = 4579, 4765, 4880, 4965, 5017 \text{ \AA}$, ($T = 700 \text{ K}$). Выбранные λ , соответствуют длинам волн, излучаемым Ar⁺-лазером, использовавшимся в экспериментах по РКР Br₂. В реальных условиях эксперимента молекулы Br₂ находятся в различных колебательно-вращательных состояниях, поэтому рассматривается также влияние вращения на амплитуды РКР и дифференциальные сечения. Обсуждаются использованные в расчете потенциалы для состояний ¹Π_{1u} и В³Π(O_u⁺) Br₂ и зависимость электронного момента пе-

139-11-6324

перехода от R (расчеты проводились также для постоянного электронного момента перехода). Вычисления профилей проводились как без учета вклада вращательной энергии в потенциалы, так и с учетом состояний с $I \leq 150$, однако существенных различий не наблюдалось. Отмечается, что подобный анализ профилей, соотв. заданному λ , является лишь очень локальным критерием для проверки потенциалов, а используемая авторами

полуклассич. процедура нахождения амплитуд применима только на очень узком участке потенциальной кривой.

Р. М. Ковба

Вч₂

оттиск 9913
ВР-Х1-6324

1980

понижен.
кривые

11 Д284. Непрерывное резонансное комбинационное рассеяние света двухатомными молекулами. Ч. II. Теоретическое изучение Q-ветвей $\Delta n=1$ контуров молекулы брома. Continuum resonance Raman scattering of light by diatomic molecules. II. Theoretical study of the Q branches of $\Delta n=1$ profiles of molecular bromine. Atabek O., Lefebvre R., Jacson M. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 4, 2683—2693 (англ.)

Предложенный в ч. I метод вычисления амплитуд непрерывного резонансного комб. рас. и квазиклассич. метод, основанный на представлении Эйри амплитуд Франка—Кондона, использован для теоретич. анализа ветвей Q в контурах $\Delta n=1$ молекулы Br₂. Проведено сопоставление результатов расчета с имеющимися эксперим. данными. Оба расчетных метода приводят к близким результатам, что свидетельствует о чувст-

Ф.1980 N11

вительности контура комб. рас. при данной длине волны возбуждающего излучения лишь к узкому ($\sim 0,003$ нм) участку потенц. кривой молекулы в возбужденном состоянии. Расчеты проводились для разных типов потенциала с учетом и без учета влияния вращательного движения на сечения рассеяния и зависимости электронного момента перехода от межъядерного расстояния R . Показано, что ни один из предложенных в литературе потенциалов для возбужденных состояний ${}^1\Pi_u$ и $B({}^3\Pi_{ou}^+)$ не позволяет достаточно хорошо описать эксперим. контуры; учет зависимости момента перехода от R и вращательной зависимости амплитуды рассеяния не приводит к существенному улучшению результатов. Ч. I. см. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 4, 2670—2682. Библ. 13. Н. Ф.

Br₂

1980

93: 210646m Analytical interpretation of predissociation rates: the $B^3\Pi(0_u^+)$ state of dibromine. Child, M. S. (Theor. Chem. Dep., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *J. Phys. B* 1980, 13(13), 2557-63 (Eng). Fluctuations of the predissocn. line width with vibrational quantum no., normally expected on semiclassical grounds, are suppressed over any energy region where the relevant repulsive curve is roughly parallel to the bound-state potential curve. Hence recovery of the repulsive potential curve using a Rydberg-Klein-Rees based method is simplified. Direct inversion of data for the heterogeneous predissocn. of the B state of Br_2 (Clyne, M. A. ., et al., 1980) gives a curve in good numerical agreement with that obtained by the numerical Franck-Condon technique.

frequency

C.D. 1980.93 v22

1980

Br₂

3 Д152. Аналитическая интерпретация скоростей преддиссоциации: состояние $B^3\Pi(O_u^+)$ молекулы Br_2 . Analytical interpretation of predissociation rates: the $B^3\Pi(O_u^+)$ state of Br_2 . Child M. S. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 13, 2557—2563 (англ.)

В полуклассическом приближении показано, что в случае, если отталкивательные ветви связанного и несвязанного состояний параллельны, то флуктуации в ширинах колебательных уровней, обусловленных преддиссоциацией, отсутствуют. Это позволяет упростить определение отталкивательного потенциала, что проиллюстрировано на примере преддиссоциации состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ молекулы Br_2 . Пересечение кривых $^3\Pi(O_u^+)$ и $\Pi(1u)$ наблюдается при $R=2,959 \text{ \AA}$, $E_x=776,7 \text{ см}^{-1}$ (по отношению к минимуму кривой B), параметр взаимодействия $V_{12}=4,68 \cdot 10^{-3} [J(J+1)]^{-1/2} \text{ см}^{-1}$. В. И. Бачиновский

М. И.

Ф. 1981 N 3

оттиск 9338

1980

Br₂

Э, Д.

7 D780. Динамика возбужденных состояний. Ч. 5. Долгоживущее состояние $A^3\Pi(1_u)$ молекулы Br_2 . Quantum-resolved dynamics of excited states. Part 5. The long-lived $A^3\Pi(1_u)$ state of Br_2 . Clyne Michael A. A., Heaven Michael C., Martinez Ernesto. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 2, 177—196 (англ.)

Исследована индуцированная лазером флуоресценция с индивидуальных колебательно-вращательных уровней (v', J') состояния $A^3\Pi(1_u)$ молекулы Br_2 . Колебательно-вращательные линии полосы $A-X$ в области возбуждения (705 нм) идентифицированы на основании вращательных комбинационных разностей и колебательного изотопич. эффекта. Получены новые данные об изотопич. расщеплении. Измерены времена жизни компоненты F^- состояния Br_2 ($A, v'=11, J'=23$) при различных

Ф. 1980. №

давлениях Br_2 и Ag . Определено радиационное время жизни молекулы $\text{Br}_2(A)$, $\tau_R = (347 \pm 50)$ мксек. Установлено, что при столкновении $\text{Br}_2(A)$ и $\text{Br}_2(X)$ происходит быстрый перенос колебательной энергии, $k_v \geq 2,4 \cdot 10^{-10}$ см³ молекул⁻¹сек⁻¹ при 293° К. Скорость колебательно-поступательного переноса энергии при столкновении $\text{Br}_2(A)$ с $\text{Br}_2(X)$ почти на порядок меньше. Электронное тушение $\text{Br}_2(A)$ атомами Ag и молекулами $\text{Br}_2(X)$ невелико. Для константы скорости электронного тушения $\text{Br}_2(A) + \text{Br}_2(X)$ получена оценка сверху $k_Q \leq 4,7 \cdot 10^{-12}$ см³ молекул⁻¹сек⁻¹. В свете полученных для Br_2 результатов, обсуждена предложенная ранее интерпретация эффектов, наблюдавшихся при исследовании индуцированной лазером флуоресценции молекул JCl ($A^3\Pi(1)$). Ч. 4 см. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», Part II, 1978, 74, 1644. Библ. 43.

В. С. Иванов

omnium 9338

1980

Br₂

92: 206291d Quantum-resolved dynamics of excited states. Part 5. The long-lived A³Π(1_g) state of bromine. Clyne, Michael A. A.; Heaven, Michael C.; Martinez, Ernesto (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, Engl. E1 4NS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1980, 76(2), 177-96 (Eng). Laser-induced fluorescence was obsd. from rotational-vibrational levels of excited Br₂ A³Π(1_g), as the A-X transition. Excitation was carried out near 705 nm. Identification of the A-X rotational-vibrational transitions was made through rotational combination differences and vibrational isotope splittings; and results of the latter are reported. The fluorescence decay was measured as a function of the pressure of Br and Ar as bath gases. Vibrational energy transfer in collisions of Br₂(A) with Br₂(X) is very efficient whereas vibration-to-translational transfer in Br₂(A)+Ar transitions is slower. Electronic quenching of Br₂(A) by Br₂ and Ar is slow and an upper limit for quenching was detd.

назв. б-го.
сущ. к-п

CA 1980 92 N24

Br_2

6 B987. Изучение молекул Br_2 методом лазерного возбуждения. Передача энергии в столкновениях с участием определенных квантовых состояний возбужденных молекул $\text{Br}_2[B^3\Pi(O_u^+)]$. Clyne Michael A. A., Heaven Michael C., Davis Steven J. Laser-excitation Studies of Br_2 Collisional Energy Transfer Involving Resolved Quantum States of Excited $\text{Br}_2 B^3\Pi(O_u^+)$. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 8, 961—978

Спектр
флуоресц.

Методом лазерно-стимулированной флуоресценции изучена передача колебательного, вращательного и электронного возбуждения молекул $\text{Br}_2(B^3\Pi(O_u^+))$ (I) при столкновениях с N_2 , Ar , He и Cl_2 . I возбуждались в определенное квантовое состояние (v, J) электронно-возбужденного уровня $B^3\Pi(O_u^+)$ излучением одночастотного импульсного или непрерывного лазера на красителях ($\lambda = 570\text{—}600$ нм). С использованием для возбуждения непрерывного лазера получены спектры флуоресценции молекул I и определены константы скорости (k) процессов $R\text{—}T$ и ступенчатой колебательной релаксации, значения к-рых значительно превосходят k тушения электронного возбуждения. Эффективность столкновений с молекулами N_2 в процессах колеба-

Т. 1981. № 6

1980
10382
Виталий

тельной релаксации $\text{Br}_2^*(v=11-15) \sim 0,1$ (переходы $\Delta v = +1$ менее вероятны, чем $\Delta v = -1$). Эффективность столкновений в $R-T$ -процессах значительно больше. При столкновениях I с молекулами Br_2 происходит эффективная дезактивация с очень малыми изменениями колебательных и вращательных чисел. В импульсном режиме измерена k тушения $\text{Br}_2^*(v=14)$ на молекулах Br_2 . При комн. т-ре $k = (4,2 \pm 1,3) \cdot 10^{-10}$ см³/сек. Установлено, что тушение происходит в результате

столкновительной преддиссоциации. Обсуждены механизмы тушения I при столкновениях с He, Ar и Cl₂. В случае He и Ar тушение происходит в результате столкновительной преддиссоциации. Для Cl₂ имеют место, как прямые электронные переходы, так и преддиссоциация.

И. О. Лейпунский

дал
лон

1980

Br₂

Clyne, Heaven, et al.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1 46, 961
1980

список
при лагери.
возбужд.

Br₂

1980

спект
флуорес

93: 194899p Fluorescence of the bromine molecules after selective excitation by a single-mode krypton ion laser. De Vlieger, G.; Claesens, F.; Eisendrath, H. (Dep. Phys., Vrije Univ., Brussels, Belg.). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 83(2), 339-42 (Eng). A fluorescence study yielded a list of vibrational and rotational assignments after excitation by the 5208-, 5309-, and 5682-Å lines of a single-mode Kr⁺ laser for ⁷⁹Br₂ and ⁸¹Br₂. The enumeration of anti-Stokes components, the comparison of Franck-Condon factors with the obsd. intensity distributions, and the comparison of obsd. and calcd. line positions allowed the detn. of vibrational assignments after *J* was identified from *P-R* sepns. Difficulties encountered in the identification of the different excited levels are discussed.

C. A. 1980, 93 iv 20

Br_2

(2i)

1980

10 B122. Флуоресценция молекул брома при селективном возбуждении одномодовым криптоновым лазером. De Vlieger G., Claesens F., Eisend-rath H. Fluorescence of the bromine molecules after selective excitation by a single-mode krypton—ion laser. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 339—342 (англ.)

Дан перечень переходов в молекулах $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$, возбуждаемых различными модами одномодового Kr^+ -лазера на линиях 5208, 5309 и 5682 Å. В. М. Ковба

2. 1981, N10.

1980

 Br_2

5 Д670. Флуоресценция молекул брома при селективном возбуждении излучением одномодового ионного Кг-лазера. Fluorescence of the bromine molecules after selective excitation by a single-mode krypton-ion laser. De Vlieger G., Claesens F., Eisendrath H. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 339—342 (англ.)

спектр
флуорес.

Исследована структура спектров флуоресценции молекул $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$ ($B^3\Pi_{0+} \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) при возбуждении линиями 5208, 5309 и 5682 Å излучения одномодового Кг⁺-лазера. Изменением т-ры внутреннего эталона достигалась перестройка лазера по модам, разделенным интервалом 115 МГц, внутри доплеровского профиля усиления шириной 6 ГГц. На основе полученных данных идентифицирован ряд колебательно-вращательных переходов в системе $B \rightarrow X$ молекул Br_2 . Измеренные с точностью $\pm 0,02 \text{ см}^{-1}$ энергии переходов сопоставлены с результатами теоретич. расчетов. С. Литке

Ф. 1981 и 5

оттис 9449

1980

Br₂

15 Б175. Br₂ в аргоновой матрице. Пример полного затухания амплитуды—резонансного комбинационного рассеяния для предельного случая дискретного резонанса. Friedman J. M., Bondybey V. E., Rousseau D. I. Br₂ in an Ar matrix: an example of complete damping of the resonance raman scattering amplitude in the discrete resonance limit. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 70, № 3, 499—503 (англ.)

спектр
в Ar матри-
це.

Исследованы спектры резонансного КР и термализованной флуоресценции (область — 12 000—13 000 см⁻¹) Br₂ в Ar-матрице при возбуждении области переходов из основного состояния X(¹Σ₀+_u) на различные колебательные подуровни (v=5—17) возбужденного B(³Π₀+_u) электронного состояния при T=4—10 К. Изучена зависимость интенсивности полос в спектрах от частоты возбуждающей линии. Спектры возбуждали перестраи-

№ 1980 N 15

ваемым (в области $\sim 16\,700\text{ см}^{-1}$) лазером на красителе мощностью $\sim 5\text{ мВт}$, внутренним эталоном интенсивности служил Cs_2 . В отличие от газ. Br_2 резонансного увеличения сечения КР или появления резонансной флуоресценции не наблюдали. В то же время характер зависимости относит. интенсивностей термализованной флуоресценции и КР от частоты возбуждающей линии указывает на то, что в Ag-матрице имеется дополнительный релаксац. процесс, приводящий к затуханию амплитуды КР. Основной вклад в затухание вносит, по-видимому, колебательная релаксация. Отсутствие в спектре полос, отвечающих резонансному рассеянию, не позволяет оценить вклад релаксац. процесса и чистой дефазировки колебания в полуширину однородно уширенной линии поглощения.

А. В. Бобров

Br_2

оттиск 9449

1980

8 Д340. Br_2 в аргоновой матрице: пример полного затухания амплитуды резонансного комбинационного рассеяния в дискретном резонансном пределе. Br_2 in an Ar matrix: an example of complete damping of the resonance Raman scattering amplitude in the discrete resonance limit: Friedman J. M., Bondybey V. E., Rousseau D. L. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 70, № 3, 499—503 (англ.)

Получены спектры резонансного комб. рас. (РКР) и флуоресценции (Ф) молекул Br_2 (I), изолированных в Ag-матрице при t -ре $4,2^\circ\text{K}$ и возбуждении в области

спектр
К.Р. и
флуоресц
в матрице.

ф 1980 №8

колебательных подуровней $v=3-20$ возбужденного электронного состояния $B(^3P_o + u)$. Излучениями лазеров на растворах родаминов 6Ж и 110. Исследованы изменения интенсивности линий Φ I в зависимости от меры остроты резонанса возбуждающего излучения с вибронными подуровнями электронного состояния $B(^3P_o + u)$; тогда как интенсивность РКР и резонансной Φ практически постоянна во всем интервале частот возбуждающего света. Проведено сопоставление спектров РКР газообразных и матрично-изолированных молекул I. Сделан вывод, что в твердой матрице интенсивность РКР I резко уменьшена вследствие активизации процесса колебательной релаксации (T_2) с участием набора энергетич. состояний матрицы. Библ. 36. И. В. А.

Br₂

[ommuck 10315]

1980

Gropen O. et al

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

Кв. мех.

расчет



Cu Cl₂ ; III

Br_2

оттиски 10032

1980

спектр
флуоресц.

1 Д644. Возбуждаемая Kr^+ -лазером флуоресценция Br_2 . Krypton ion laser-excited fluorescence in bromine. Hozack R. S., Kennedy A. P., McAfee K. B. Jr. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 239—243 (англ.)

Исследован спектр флуоресценции естественной смеси изотопов Br_2 в области $19\,200\text{--}14\,780\text{ см}^{-1}$, возбуждаемый Kr^+ -лазером. Проявившиеся в спектре 11 линий идентифицированы на основе результатов RKR -расчетов. Для всех трех изотопов получено хорошее соответствие между эксперим. и теоретич. результатами. При идентификации переходов с $^{81}\text{Br}_2$ использова-

ны RKR -потенциалы, определенные из данных для изотопа $^{79}\text{Br}_2$. А. В. Н.

Ф. 1981 N 1

Вч₂

оттиски 10032

1980

3 Б1285. Флуоресценция в бrome, возбуждаемая лазером на ионах криптона. Hozack R. S., Kennedy A. P., McAfee K. B. Krypton ion laser-excited fluorescence in bromine. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 239—243 (англ.)

Изучена флуоресценция (переход $X^1\Sigma_g^+ \leftarrow B^3\Pi_{ou}^+$) паров Br_2 (давл. 0,8 мм) при облучении светом лазера на Kr^+ (длины волн 5208, 5309, 5682, 6471, 6764 Å). Сравнение эксперим. и рассчитанных энергий флуоресцентных переходов показывает хорошее согласие. Отмечается, что наблюдение состояний с высоким вращательным квантовым числом может служить для проверки величины констант центробежного возмущения молекулы Br_2 .
Ю. И. Дорофеев

М.И.

X. 1981 N 3

Br₂

number 10437

1980

Pietro W. J., et al

расчет
равнов.
кон.

Inorg. Chem., 1980, 19,
n8, 2225-29.

● (see KH) III

1980

Br₂

Seeger G., et al

Rb. mex.
paper

Int. J. Quantum. Chem.,
1980, 17, N5, 955-68.



(see H₂) III

Br_2

Commen 10767 | 1980.

Vlieger C de; et al.

спектр
группы.

J. Mol. Spectrosc;
1980, 83, 339-42.

Br_2

[Оммух 11911]

1981.

Br_2^-

Ayala J. A., et al.

Br_2^-

J. Phys. Chem., 1981,
85, 768 - 77

крупное
попереч.
зерно,
расчет функции
попереч. ИИ.

($A\bar{e}$)

(all.

Cl_2^- ; III)

Br_2, I_2

1981

3 Д520. Резонансное комбинационное рассеяние при возбуждении в области континуума состояний газообразных галогенов. Continuum resonance Raman effect in halogen gases. Baierl P., Kiefer W. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 11, № 5, 393—405 (англ.)

Проведен теоретич. анализ спектров резонансного комб. рас. газообразных молекул $^{79}\text{Br}_2$ (I) и $^{127}\text{I}_2$ (II) при возбуждении рассеяния в области континуума состояний I и II. Изложены элементы теории резонансного комб. рас. в соединениях со сплошным набором энергетич. состояний. Отмечено, что сложная структура спектров комб. рас. I и II и зависимость интенсивности линий комб. рас. от частоты возбуждающего света могут быть описаны в рамках вибронной теории комб. рас. при сохранении борн-оппенгеймеровского приближения для описания электронно-колебательных движений I и II. Показано, что распределение интенсивности по вращательным подуровням колебаний I и II существ-

СКР

⊠
(+1) I_2

ср. 1982, 18, №3.

венно отличается от аналогичного распределения в спектрах комб. рас. при возбуждении в области дискретных полос поглощения. Сделан вывод, что наблюдаемые спектры резонансного комб. рас. I и II удовлетворительно согласуются с моделью рассеяния, учитывающей интерференцию вкладов различных участков континуума состояний I и II. Библ. 37. И. В. А.



Br₂

1981

CKP

95: 194750z Continuum resonance Raman effect in halogen gases. Baierl, P.; Kiefer, W. (Phys. Inst., Univ. Bayreuth, D-8580 Bayreuth, Fed. Rep. Ger.). *J. Raman Spectrosc.* 1981, 11(5), 393-405 (Eng). The theory for continuum resonance Raman scattering in diatomics using irreducible spherical tensors is applied to ⁷⁹Br₂ and ¹²⁷I₂. Numerical calcs. of the band profile of fundamental and overtones are compared to exptl. obtained continuum resonance Raman spectra of these mols.

(+1)  I₂


C. A. 1981, 95, N 22.

1981

Br₂

5 Б258. Комбинационное рассеяние в газообразных галогенах при резонансе с континуумом. Baierl P., Kiefer W. Continuum resonance Raman effect in halo-

gen gases. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 11, № 5, 393—405. (англ.)

Проведен теор. анализ эксперим. данных по зависимости формы контуров линий основных колебаний и их обертонов, в спектрах резонансного КР газообразных ⁷⁹Br₂ (I) и ¹²⁷J₂ (II) от частоты возбуждающей линии при возбуждении в области выше энергии диссоциации (в области континуума состояний). Оценки проводились в рамках приближения Борна — Оппенгеймера с использованием герцберг-теллеровского представления электронного дипольного момента и неприводимых сферич. тензоров. Прослежено за дисперсией действительной и мнимой части амплитуды рассеянного света. Показано, что существенное влияние на распределение интенсивностей линий в резонансных спектрах КР I оказывают интерференционные эффекты с участием различных возбужденных электронных состояний.

А. В. Бобров

СКР

A

(H)_{g2}X, 1982,
19, N5.

1981

 Br_2 $(B \rightarrow X)$ (u, n)

/ 95: 52098u Hyperfine structure measurements in the $B^3\Pi_{0+u} - X^1\Sigma_g^+$ electronic transition of diatomic bromine. Bettin, N.; Knoeckel, H.; Tiemann, E. (Inst. Experimentalphys., Univ. Hannover, D-3000 Hannover, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 80(2), 386-8 (Eng). Hyperfine splittings in some band heads of the $B-X$ system of Br_2 were measured using laser mol.-beam spectroscopy. Quadrupole coupling consts. were derived: $eqQ(^{79}\text{Br}) = 810.0(5)$ MHz for $X^1\Sigma_g^+$, $v'' = 1$, and $eqQ(^{79}\text{Br}) = 179.1(16)$ MHz for $B^3\Pi_{0+u}$, $v' = 13$.

C.A. 1981, 95, N 6.

Вч₂

1981

сверх-
тонкая
структура,
м.п.

20 Б140. Измерения сверхтонкой структуры в электронном переходе $B^3\Pi(0_u^+) - X^1\Sigma_g^+ Br_2$. Bet-
tin N., Knöckel H., Tiemann E. Hyperfine
structure measurements in the $B^3\Pi 0_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ electro-
nic transition of Br_2 . «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80,
№ 2, 386—388 (англ.)

Методом лазерной спектроскопии молек. пучков
изучена СТС полос электронного перехода $B^3\Pi(0_u^+) -$
 $X^1\Sigma_g^+$ брома (12—1, 13—1 и 14—1 $^{79}Br^{81}Br$ и 16—2,
17—2 $^{81}Br_2$). Получены след. значения постоянных
квадрупольного взаимодействия $eqQ(^{79}Br)$ (в МГц):
810,0 ($X^1\Sigma_g^+$, $v''=1$), 179,1 [$B^3\Pi(0_u^+)$, ($v'=13$)],
178,7 ($v'=14$). В. М. Ковба

X.20.1981

Br₂

1981

12 Д520. Измерения сверхтонкой структуры в системе переходов $B^3\Pi_{0+u} \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ молекулы Br₂. Hyperfine structure measurements in the $B^3\Pi_{0+u} \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ electronic transition of Br₂. Bettin N., Knöckel H., Tiemann E. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, № 2, 386—388 (англ.)

С использованием техники молекулярных пучков получены спектры испускания молекул Br₂ в полосе $B^3\Pi_{0+u} \rightarrow X^1\Sigma_g^+$. Для возбуждения использовался лазер на красителе, перестраиваемый в области 570—600 нм. Давление паров Br₂ в эксперим. кювете составляло ~35 мм рт. ст. Анализ сверхтонкой структуры наблюдавшихся полос позволил определить константы квадрупольного взаимодействия для состояний X и B (⁷⁹Br₂): 810,0 МГц и 179,1 МГц соответственно. М. Т.

М.Т.

ф. 1981, 18, № 12.

Bz₂

Освоение 12815 1981

обзор,
теорет.
расчет.

Bohm A.C., Gleiter R.

молекула.
орбитали,
поперечный.

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

1981

Br₂

2 Б1718. Фоторекомбинационное и термическое излучение нагретого брома. Бугрим Е. Д., Макренко С. Н., Белокриницкий Н. С., Носенко В. Е. «Укр. физ. ж.», 1981, 26, № 8, 1282—1286 (рез. англ.)

Изучены спектры излучения и поглощения Br₂ при $T \approx 1400$ К в диапазоне длин волн 360—1060 нм. Рассчитана спектральная плотность излучения нагретого Br₂, обусловленного равновесным термич. заселением возбужденных электронных состояний и прямой фоторекомбинацией. Сделан вывод, что в области >510 нм основная доля излучения обусловлена термич. возбуждением состояний $A^3\Pi_{1u}$ и $B^3\Pi_{0+u}$ молекулы Br₂. В об-

ласти <510 нм излучение обусловлено прямой фоторекомбинацией через состояния $B^3\Pi_{0+u}$ и $^1\Pi_{1u}$. Предложена методика расчета спектра фоторекомбинации в широкой спектральной области и вычислены интегральные константы фоторекомбинации через состояния $B^3\Pi_{0+u}A^3\Pi_{1u}$ и $^1\Pi_{1u}$. Резюме

Спектр
фотореком-
бинации

X. 1982, 19AB, N2.

Br₂

1981

1 Д590. Фоторекомбинационное и термическое излучение нагретого брома. Бугрим Е. Д., Макренко С. Н., Белокриницкий Н. С., Носенко В. Е. «Укр. физ. ж.», 1981, 26, № 8, 1282—1286 (рез. англ.)

Изучены спектры излучения и поглощения Br₂ при 1400 К в диапазоне длин волн 360—1060 нм. Рассчитана спектральная плотность излучения нагретого Br₂, обусловленного равновесным термич. заселением возбужденных электронных состояний и прямой фоторекомбинацией. Сделан вывод о том, что в области $\lambda > 510$ нм основная доля излучения обусловлена термич. возбуждением состояний $A^3\Pi_{1u}$ и $B^3\Pi_{0u}+$ молекулы Br₂. В области $\lambda < 510$ нм излучение обусловлено прямой фоторекомбинацией через состояния $B^3\Pi_{0u}+$ и $^1\Pi_{1u}$. Предложена методика расчета спектра фоторекомбинации в широкой спектральной области и вычислены интегр. константы фоторекомбинации через состояния $B^3\Pi_{0u}+A^3\Pi_{1u}$ и $^1\Pi_{1u}$. Автореферат

Si,

ФР. 1982, 18, № 1

Br₂

Omnick 12950 1981

лазерная
физика,
2

96: 60318b Laser-induced fluorescence studies of a supersonic molecular beam of bromine: vibrational and rotational relaxation of bromine and collision-free lifetimes for bromine($B^3\Pi(0_u^+)$). Bullman, S. J.; Farthing, J. W.; Whitehead, J. C. (Dep. Chem., Univ. Manchester, Manchester, UK M13 9PL). *Mol. Phys.* 1981, 44(1), 97-109 (Eng). Laser-induced fluorescence was used to det. collision-free lifetimes of various vibrational levels of $Br_2(B^3\Pi(0_u^+))$ using a supersonic Br_2 mol. beam. The efficiencies of rotational and vibrational relaxation of ground-state Br_2 were detd. from translational, rotational, and vibrational temps. in the expansion using time-of-flight methods. Vibrational relaxation cross sections for Br_2 with various gases were detd. using seeded beams. The high efficiencies for vibrational relaxation of Br_2 at low beam temps. are inconsistent with the Landau-Teller model. This was attributed to addnl. relaxation due to the formation and subsequent disocn. of metastable or van der Waals complexes. Efficient vibrational-rotational energy transfer was obsd. in $Br_2(v=1)-H_2$ collisions.

C.A. 1982, 96, 48

Br₂

Amman 11449

1981.

Das G.

Chem. Phys. Lett., 1981, 79 (2),
305-309.

Pseudo-potential evaluation of the
ground-state  potentials
curves for the Cl₂ and Br₂ molecules.
(in. Cl₂, III)

Br₂

Lommu 10992 | 1981.

Ferreira R., et al.

интер-
отружам.

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

Br₂

1981

Гадмек Т. В. и др.

расчёт
Ис. Структур. химии,
1981, 22, N5, 36-40.

●
(сеч. Si₂ ; III)

Br_2
 Br_2^-

константа
скорості
приман.
електрона

1981
Кучера М.В., et al.

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

●
(см. F₂; III)

Br₂

(ommuca 11378) 1981.

Liška M., et al.

min.

J. Mol. Struct., 1981.

72, 174 - 181

Br_2

1981

5 Б1505. Вращательные факторы Ланде индивидуальных вращательных состояний брома. Luypaert R., Craen J., Coremans J., De Vlieger G. Rotational Landé factors of single rotational states in bromine. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 15, 2575—2584 (англ.)

Методом квантовых биений определена зеемановская структура трех индивидуальных вращательных уровней состояния $B^3\Pi_{ou}^+$, $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$. Обсуждаются ожидаемые профили квантовых биений, учитывая СТС и направления возбуждающего и регистрируемого излучения. Цилиндрич. ячейка диам. 20 мм и длиной 100 мм содержала $^{79}\text{Br}_2$ или $^{81}\text{Br}_2$ при давл. порядка нескольких сотых долей мм рт. ст. и помещалась в магнитное поле (МП) до 12 кГс. Молекулы возбуждали лазером на Ar^+ на одной продольной моде через акустооптический модулятор, длительность импульсов 50 нс, частота до 35 кГс. Свет лазера линейно поляризован перпен-

Спектр

Х. 1982, 19, N5

дикулярно магнитному полю. Измеряли интенсивность флуоресценции как функцию времени методом задержанных совпадений счета фотонов. Частота биений пропорциональна МП. Вращательные факторы Ланде для уровней $v'=40$, $J'=15$ и $v'=45$, $J'=38$ молекулы $^{81}\text{Br}_2$ равны соотв. 2,19 и 5,35, а для уровня $v'=42$, $J'=33$ $^{79}\text{Br}_2$ фактор Ланде равен 3,76. Л. И. Лившин

Br₂

1981

5 Б172. Вращательные факторы Ланде. одиночных вращательных состояний брома. Luypaert R., Van Craen J., Coremans J., De Vlieger G. Rotational Landé factors of single rotational states in bromine. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 15, 2575—2584 (англ.)

Измерены зеемановские спектры квантового биения для трех индив. вращательных уровней состояния $B^3\Pi_{u^-}$ $^{79}\text{Br}_2$ и $^{81}\text{Br}_2$ при возбуждении молекул акустико-оптически модулированным излучением Ar^+ -лазера. Спектры регистрировали в виде зависимости интенсив-

ности флуоресценции от времени после лазерного импульса. Проведен теор. анализ контуров биения и получено простое выражение для мультиполя, на основании к-рого разработан метод разностей для анализа структур биений. Определены вращательные факторы Ланде для уровней $v'=40$, $J'=15$, $v'=45$, $J=38$ $^{81}\text{Br}_2$ и уровня $v'=42$, $J'=33$ $^{79}\text{Br}_2$, равные $2,19 \pm 0,18$; $5,35 \pm 0,22$ и $3,76 \pm 0,24$ соответственно. С. Б. Осин

ell. N;

X. 1982, 19, N5.

Br₂

1981

classical
is up to
physics.

' 95: 228312a Rotational Lande factors of single rotational states in bromine. Luypaert, R.; Van Craen, J.; Coremans, J.; De Vlieger, G: (Lab. Quantum Optica, Vrije Univ. Brussel, Brussels, Belg.). *J. Phys. B* 1981, 14(15), 2575-84 (Eng). Individual rotational levels in the B $^2\Pi_{0+u}$ state of $^{79}\text{Br}_2$ and $^{81}\text{Br}_2$ were excited by an acoustooptically chopped, single-mode Ar⁺ laser. The intensity of the fluorescent light, measured as a function of time following the laser pulses, exhibit Zeeman quantum beats. A study of the beat profiles permitted the detn. of the rotational Lande factors of the levels involved.

C.A. 1981, 95, N26.

Br₂

Оттиск 12237

1981

2 Д782. Многофотонная ионизационная спектроскопия с двухфотонным резонансом в УФ-области. Новая система ридберговских полос в молекуле Br₂. Two photon resonant multiphoton ionization spectroscopy in the ultraviolet. A new Rydberg system in Br₂. Morrison Richard J. S., Grant Edward R. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 1, 49—51 (англ.)

Получен спектр трехфотонной ионизации молекулы Br₂ с двухфотонным резонансом в области 295—275 нм. В спектре выявлены 3 новых ридберговских состояния с симметрией «g». В результате предварительной интерпретации спектра определены следующие параметры этих состояний: $T_e' = 68\,835\text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 365\text{ см}^{-1}$; $T_e' = 70\,576\text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 371\text{ см}^{-1}$; $T_e' = 72\,118\text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 334\text{ см}^{-1}$. При лазерном облучении в видимой области спектра (442—422 нм) обнаружено еще одно состояние, которое достигается при трехфотонном резонансе. Параметры этого состояния: $T_e' = 68\,620\text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 338\text{ см}^{-1}$. Показано, что это состояние соответствует состоянию $g\Sigma_u^+$, которое наблюдалось ранее в однофотонном спектре поглощения.

М.П.,

Ф.1982, 18, N2.

В. А. Е.

Br₂

Оттиск 12237

1981

5 Б170. Спектроскопия многофотонной ионизации двухфотонного резонанса в ультрафиолетовой области: новая ридберговская система в Br₂. Morrison Richard J. S., Grant Edward R. Two photon resonant multiphoton ionization spectroscopy in the ultraviolet: A new Rydberg system in Br₂. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 1, 49—51 (англ.)

Измерены спектры многофотонной ионизации молекул Br₂ в областях 275—295 нм и 420—445 нм при возбуждении набором перестраиваемых лазеров на красителях. В УФ-области обнаружены три двухфотонных резонанса, связанные с ридберговскими состояниями Br₂ g-симметрии. Наблюдена и проанализирована колебательная структура трех систем в области 70 000 см⁻¹. Получены след. молек. постоянные Br₂ для трех новых состояний (см⁻¹): $T_e' = 68\,835$, $\omega_e' = 365$ для I состояния, $T_e' = 70\,576$, $\omega_e' = 371$ для II состояния, $T_e' = 72\,118$, $\omega_e' = 334$ для III состояния.

М.П.

Х. 1982, 19, N5.

При возбуждении в области 430 см^{-1} наблюден трехфотонный резонансный переход на промежуточ. состоянии u -симметрии. с молек. параметрами $T_e' = 68\,620\text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 338\text{ см}^{-1}$. На основании сравнения с имеющимися данными по спектрам поглощения последнее состояние отнесено к типу $g\Sigma_u^-$. С. Б. Осин

Br₂

[Ommuck 12237]

1981

M.R.

(2d. checkip)

95: 52321m Two photon resonant multiphoton ionization spectroscopy in the ultraviolet: a new Rydberg system in diatomic bromine. Morrison, Richard J. S.; Grant, Edward R. (Dep. Chem., Cornell Univ., Ithaca, NY 14853 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(1), 49-51 (Eng). Anal. of the laser included multiphoton ionization spectrum of Br₂ in the UV from 295 to 275 nm revealed 3 new Rydberg states of *g*-symmetry. The preliminary assignment yields the following parameters: $T_e' = 68,835 \text{ cm}^{-1}$, $w_e' = 365 \text{ cm}^{-1}$; $T_e' = 70,576 \text{ cm}^{-1}$, $w_e' = 371 \text{ cm}^{-1}$; and $T_e' = 72,118 \text{ cm}^{-1}$, $w_e' = 334 \text{ cm}^{-1}$. By using visible light, an addnl. state was obsd. in the same region as a 3-photon resonance. This state, with parameters $T_e' = 68,620 \text{ cm}^{-1}$ and $w_e' = 338 \text{ cm}^{-1}$, appears to correspond to the $g\Sigma_u^-$ previously assigned from absorption data.

C.A. 1981, 95, N6.

Br₂

[On. 36374]

1981

констан-
ты
ра

Ramalho J.P.P., Cabral B.J.C.,
et al.,

Chem. Phys. Lett. 1991,

184, N 1-3, 53-60.

A Monte Carlo and trans-

per-matrix grid path-integ-
ral study of the vibrational
structure of Br_2 in solid
argon.

Br₂

1981

флуоресценция,
комбинац.
рассеяние

11 Д655. Резонансная флуоресценция и спектры резонансного комбинационного рассеяния паров брома и йода. Resonance fluorescence and resonance Raman spectroscopy of bromine and iodine vapor. Shaw C. Frank, III. «J. Chem. Educ.», 1981, 58, № 4, 343—348 (англ.)

Дан обзор работ по сравнительному исследованию вибронных состояний газообразных молекул Br₂ (I) и J₂ (II) методами резонансной флуоресценции (РФ) и резонансного комб. рас. (РКР). Обсуждены поляризационные характеристики и распределение интенсивности в линиях обертонов РКР и вибронных подуровней РФ и их зависимость от давления I и II и посторонних (инертных) газов. Изучены корреляции между временем жизни возбужденных состояний I и II и параметрами колебательных линий в спектрах РКР и РФ. Отмечено, что вклады РФ и РКР во вторичном излучении могут

A

(H)

ф. 1981, 18, № 11.

быть оценены путём измерения временных характеристик этого излучения при наносекундной длительности световых возбуждающих импульсов. С иллюстративной целью, приведены примеры практич. использования спектров РФ и РКР газобразных систем для дистанционного контроля примесей в атмосфере. Библ. 29.

И. В. А.

Br₂

М.П.

Одесская 12344

1981

4 Б219. Переход $D' \rightarrow A'$ в Br₂. Sur Abha, Tel-linghuisen Joel. The $D' \rightarrow A'$ transition in Br₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 88, № 2, 323—346 (англ.)

Измерены электронные спектры испускания молекул Br₂ в области 2800—2950 Å, связанные с переходом $D'(2g) \rightarrow A'(2u^3\Pi)$. Спектры возбуждали в разряде типа Тесла при давл. Br₂ ~1 мм, Ar-400—200 мм и регистрировали с дисперсией ~1,5 Å/мм. Проанализирована вращательная структура 11 полос ⁷⁹Br₂ и 3 полос ⁸¹Br₂. Для анализа колебательной структуры системы $D' \rightarrow A'$ использовано более 70 кантов полос ⁷⁹Br₂, ⁸¹Br₂ и ⁷⁹Br ⁸¹Br. В ходе анализа идентифицированы все резкие канты полос с красным оттенением и несколько полос с фиолетовым оттенением в длинноволновой области спектра. Интерпретация и анализ спектров в ряде случаев проводили с помощью расчета синтетич. контуров полос. Получены след. значения молек. постоянных ⁷⁹Br₂ (см⁻¹): $\Delta T_e = 35705,97(78)$, $T'' = 13220(100)$, $T' = 48930(100)$, $\omega_e'' = 165,2$, $\omega_e' = 150,9$, $\omega_e x_e'' = 2,50$, $\omega_e x_e' = 0,384$, $B_e'' = 0,0594$, $B_e' = 0,0425$, $\alpha_e'' = 5,6 \times 10^{-4}$, $\alpha_e' = 1,51 \times 10^{-4}$, $D_e'' = 3,079 \times 10^{-8}$, $D_e' = 1,351 \times 10^{-8}$, $\beta_e'' = 2,25 \times 10^{-9}$, $\beta_e' = 1,07 \times 10^{-11}$, $H_e'' = -3,77 \times 10^{-14}$, $H_e' = -4,13 \times 10^{-16}$. Предложенный набор постоянных

X. 1982, 19, № 4.

очень хорошо описывает спектральные переходы между уровнями $v'=0-6$ и $v''=5-21$. Полученные постоянные использованы для расчета точек поворота потенциальных кривых Ридберга—Клейна—Рица нижнего и верхнего состояний, а также факторов Франка—Кондона для переходов между этими состояниями. С. Б. Осин

Br₂

[Оттиск 12344]

1981

2 Д649. Переход $D' \rightarrow A'$ молекулы Br₂. The $D' \rightarrow A'$ transition in Br₂. Sur Abha, Tellinghuisen Joel. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 88, № 2, 323—346 (англ.)

Исследована полоса $D' \rightarrow A'$ (2800—2950 Å) в спектре испускания молекулы Br₂. Выполнен вращательный анализ 11 полос молекулы ⁷⁹Br₂ и 3 полос ⁸¹Br₂ и определены начала для 70 других полос $v' \rightarrow v''$ изотопич. молекул ⁷⁹Br₂, ⁸¹Br₂ и ⁷⁹Br⁸¹Br. Определены спектроскопич. постоянные для обоих состояний: $\Delta T_e = 35\,706 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 150,86 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e'' = 165,2 \text{ см}^{-1}$, $B_e' = 0,042515 \text{ см}^{-1}$, $B_e'' = 0,05944 \text{ см}^{-1}$, $R_e' = 3,170 \text{ Å}$, $R_e'' = 2,681 \text{ Å}$. Рассчитаны потенц. кривые РКР и коэф. Франка — Кондона для системы $D' \rightarrow A'$. Библ. 31. В. С. Иванов

спектр;

сб. 1982, 18, № 2.

Ommuck 12344 1981

Br₂

(D' → A')

U.N.

' 95: 88513q The D' → A' transition in diatomic bromine. Sur, Abha; Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 88(2), 323-46 (Eng). A vibrational and rotational anal. is presented for the D' → A' transition (2800-2950 Å) of Br₂. The anal. includes 11 rotationally analyzed bands for ⁷⁹Br₂ and 3 for ⁸¹Br₂, plus bandheads for 70 addnl. v'-v'' bands of ⁷⁹Br₂, ⁸¹Br₂, and

C.A. 1981, 95, N10

Bz

1981

Tanabe Kiyoshi,
et al.

Spectrochim. Acta,
Part B. 1981, 36B (2),
119-127.

таблицы
волновых
линий
металл.
элементов.
(Ei ; I).

(см. H; III).

Br₂

Q. 13101

1981

9 B157. Спектр испускания Br₂ в аргоне. Tellinghuisen Joel, Berwanger Patrick, Ashmore J. Gail, Viswanathan K. S. The emission spectrum of Br₂ in argon. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 84, № 3, 528—533 (англ.)

УФ-
Спектр
испускания

Измерены УФ-спектры испускания (электрич. разряд) брома ($p_{\text{Br}_2} = 0,21 - 13,6$ мм) в отсутствие и при наличии буферного газа (аргон, $p_{\text{Ar}} \leq 740$ мм). Отмечаются и обсуждаются значительные изменения в спектре испускания при добавлении аргона. Исследована зависимость относит. интенсивности полос испускания брома от давл. аргона в смеси.

В. М. Ковба

X. 1982, 19, 49.

Br₂

Art. 13101

1981

96: 60271f The emission spectrum of diatomic bromine in argon. Tellinghuisen, Joel; Berwanger, Patrick; Ashmore, J. Gail; Viswanathan, K. S. (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 84(3), 528-33 (Eng). The emission spectrum of Br₂ in Ar was studied as a function of Br₂ and Ar pressure. Evidence was found for at least 10 electronic transitions in addn. to the dominant $D'(2g) \rightarrow A'(2u)$ band at 2915 Å. Included among the new transitions are the $E \rightarrow B$ system near 3120 Å, and a broad band near 3550 Å assigned to $D' \rightarrow {}^3\Delta u$.

zn. спектр
6

матрица

C.A. 1982, 96, N 8

Br₂

Оттиск 13101

1981

5 Д424. Спектр излучения Br₂ в аргоне. The emission spectrum of Br₂ in argon. Tellinghuisen Joel, Berwanger Patrick, Ashmore J. Gail, Viswanathan K. S. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 84, № 3, 528—533 (англ.)

В области 2000—4000 Å исследованы с разрешением ~0,03 Å спектры излучения электрич. разряда Тесла в газовой смеси Br₂ (0,21—13,6 мм рт. ст.) с Ar (0—760 мм рт. ст.). Показано, что кроме основной полосы молекул Br₂ $D'(2g) \rightarrow A'(2u)$ вблизи 2915 Å в спектрах проявляются еще по меньшей мере 10 электронных переходов, среди которых отмечены система полос у 3120 Å и широкая полоса вблизи 3550 Å, соотнесенные соответственно с переходами $E \rightarrow B$ и $D' \rightarrow {}^3\Delta_{2u}$. Полученные данные сопоставлены с результатами спектроскопич. исследований молекулы J₂. Библ. 22. С. Литке

М.П.

ф. 1982, 18, №5.

Br.2

Ommuck 14299 1982

M.H.,
XIII.
C6836

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

Br_2

1982

3 Д491. Приложение метода δ -аппроксимации (отражения) для описания двухфотонных процессов. The δ -approximation (reflection) method applied to a two-photon process. Baierl P., Kiefer W. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 4, 1693—1700 (англ.)

Метод, известный в молекулярной спектроскопии как метод отражения, используемый для расчета спектров фотодиссоциации двухатомных молекул из слабо колебательно-возбужденных состояний, применен для расчета спектров комбинац. рас. с переходами между низкими колебательными состояниями основного электронного терма. Конкретные расчеты спектров этим методом выполнены для молекул $^{79}\text{Br}_2$, промежуточное состояние у которых считалось континуумом двух электронно-возбужденных термов. Продемонстрировано хорошее согласие результатов этих расчетов с полученными более точными и трудоемкими расчетами и с данными экспериментов. Библ. 40.

С. Г. П.

теорет.
расчет
спектра

(4)

Фр. 1983, 18, N3

Метод расчета
2-х атомн. мол-л

Br_2

1982

6 Б1593. Фотохимическая динамика $^{79}\text{Br}_2$ в матрицах Xe. Photochemical dynamics of $^{79}\text{Br}_2$ in Xe matrices. Beeken Paul, Mandich Mary, Flynn George. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 5995—6001 (англ.)

В красной видимой и ИК-областях разрешены спектры флуоресценции изолированных в матрице Xe молекул Br_2 (содержание от 1:500 до 1:10 000), лазерно возбужденных в диссоциационный континуум состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ и на отталкивательный терм состояния $^1\Pi(1u)$. Установлено, что флуоресценция происходит с нижнего колебательного уровня состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ и из состояния $A'^3\Pi(2u)$. Отмечается, что вибронные линии флуоресценции $B \rightarrow X$ значительно уширены по

спектр
в

матрице

Х. 1983, 19, № 6

сравнению с теми же линиями спектра флуоресценции Вг_2 в матрице Аг . Измеренные времена жизни состояний B и A' составляют соотв. $3,6 \pm 0,5$ мкс и 4 ± 1 мс, причем релаксация по колебательным уровням состояния B проходит за времена в пределах 15 нс (за это время, совпадающее со временем отклика детектора, сигнал флуоресценции возрастает до максимального). Флуоресценция из состояния $A^3\Pi(1u)$, наблюдавшаяся при изоляции в матрицах Аг и Кг , отсутствует в рассматриваемом случае. Отмечается также, что отношение интенсивности флуоресценции из состояния B к интенсивности флуоресценции из состояния A' в матрице Хе в 100 раз выше, чем в матрице Аг . Полученные результаты не чувствительны к изменению т-ры матрицы в интервале от 12 до 60 К и концентрации Вг_2 во всем исследованном диапазоне.

А. И. Маергойз

Br₂

1982

1 Д687. Динамика фотохимии молекул $^{79}\text{Br}_2$ в Хе-матрицах. Photochemical dynamics of $^{79}\text{Br}_2$ in Xe matrices. Beeken Paul, Mandich Mary, Flynn George. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 5995—6001 (англ.)

Исследован с разрешением во времени спектр излучения, обусловленный переходами $B^3\Pi(0_u^+)v'=0 \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ и $A'^3\Pi(2u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ молекул $^{79}\text{Br}_2$, изолированных в Хе-матрицах. Определены времена жизни состояний $B^3\Pi(0_u^+)$ и $A'^3\Pi(2u)$ ($3,6 \pm 0,5$ мкс и 4 ± 1 мс соответственно). Обнаружен ряд особенностей излучения молекул Br_2 в Хе-матрицах по сравнению с Ag- и Kr-матрицами. Так, в спектре полосы $B-X$ зарегистрирована необычно широкая по сравнению с Ag-матрицами колебательная структура, а величина отношения интенсивностей переходов B/A' в Хе в 100 раз больше, чем в Ag. Отмечено, что результаты всех измерений не зависят от т-ры в диапазоне 12—60 К и концентрации молекул Br_2 в Хе (от 1:500 до 1:10 000). В. А. Е.

Спектр

от 1983, 18, N1

Br₂

Ommuck 13525 1982

(E → B)

u.n.

90: 76837f The E → B transition (3000-3140 Å) in diatomic bromine. Berwanger, Patrick; Viswanathan, K. S.; Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Vanderbilt Univ., Nashville, TN 37235 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 91(2), 275-85 (Eng). The region 3030-3140 Å of the emission spectrum of Br₂ was reinvestigated by using sources contg. sepd. ⁷⁹Br₂ and ⁸¹Br₂. The anal., which spans *v'* levels 0-15 and *v''* levels 8-31, indicates that the transition in this region is the analog of the E → B system in I₂, and it is so redesignated. The following spectroscopic consts. are obtained for the E state of ⁷⁹Br₂: *T_e* = 49 779.06 cm⁻¹, *ω_e* = 150.46 cm⁻¹, *ω_ex_e* = 0.383 cm⁻¹, *B_e* = 0.04172 cm⁻¹, *R_e* = 3.20 Å.

P.A. 1982, 96, N10.

Br₂

Омиск 18525 1982

16 Б147. Переход $E-B$ (3000—3140 Å) в Br₂.
Berwanger Patrick, Viswanathan K. S.,
Tellinghuisen Joel. The $E-B$ transition (3000—
3140 Å) in Br₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2,
275—285 (англ.)

В области 3000—3140 Å с дисперсией 1,47 Å/мм за-
ново измерены спектры испускания молекул ⁷⁹Br₂ и
и ⁸¹Br₂, возбуждаемые в разряде типа Тесла. Интер-
претация спектров проводилась на основании анализа
изотопных сдвигов, построения синтетич. контуров по-
лос и расчета факторов Франка — Кондона. Идентифици-
рованы переходы с уровней $v=0-15$ верхнего состоя-
ния E на уровни $8-31$ нижнего состояния B . С ис-
пользованием известных молек. параметров для
состояния B рассчитаны след. спектроскопич. постоян-
ные молекулы ⁷⁹Br₂ в состоянии E (см⁻¹): $T_e=49779,06$
 27 , $\omega_e=150,465$ (113), $\omega_e x_e=0,3829$ (100), $B_e=0,041720$,
 $\alpha_e=1,41 \times 10^{-4}$, $D_e=1,28 \times 10^{-8}$, $\beta_e=2,3 \times 10^{-11}$. Отмечено,
что по значениям ω_e и $\omega_e x_e$ состояние E почти не отли-
чается от состояния D' , диссоциирующего на ионы, од-

М.П.

Х. 1982, 19, № 16.

нако смещено на $\sim 850 \text{ см}^{-1}$ выше и на $\sim 0,03 \text{ \AA}$ в сторону больших R . Обсуждены причины аномально низкой интенсивности испускания из уровней с низкими значениями ν' , а также возможность проявления в области 3000—3140 $\text{\AA}$ др. электронного перехода.

С. Б. Осин

Br₂

Оттиск 13525

1982

8 Д529. Переход $E \rightarrow B$ (3000—3140 Å) молекулы Br₂. The $E \rightarrow B$ transition (3000—3140 Å) in Br₂. Bergwanger Patrick, Viswanathan K. S., Tellinghuisen Joel. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 91, № 2, 275—285 (англ.)

Спектры испускания изотопич. молекул ⁷⁹Br₂ и ⁸¹Br₂ исследованы в области 3030—3140 Å. Показано, что расположенная в этой области система полос молекулы Br₂ аналогична системе $E \rightarrow B$ молекулы J₂. Идентифицированы переходы между уровнями $v' = 0-15$ и $v'' = 8-31$. Определены спектроскопич. постоянные: $T_e = 49779,06 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e = 150,46 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e = 0,383 \text{ см}^{-1}$, $B_e = 0,04172 \text{ см}^{-1}$, $R_e = 3,20 \text{ Å}$. Библ. 21. В. С. Иванов

М.П.

ф. 1982, 18, № 8.

1982

Br₂

12 Д111. Теоретическое рассмотрение спонтанной преддиссоциации Br₂, B³Π(0_u⁺). Theoretical treatment of the spontaneous predissociation of Br₂, B³Π(0_u⁺). Ciy-ne Michael A. A., Heaven Michael C., Tellinghuisen Joel. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5341—5349 (англ.)

Исследована спонтанная неоднородная преддиссоциация состояния B³Π(0_u⁺) молекулярного брома. По эксперим. данным о временах жизни колебательно-вращательных уровней состояния B³Π(0_u⁺) найдены параметры отталкивательного состояния, ответственного за преддиссоциацию. Возмущающее состояние отождествлено с ¹Π(1_u)-состоянием. Найденная потенц. кривая для состояния ¹Π(1_u) хорошо согласуется с другими теоретич. и эксперим. данными. Е. А. Ж.

потенц.

кривая

оп. 1982, 18, N 12

Br₂

1 Ommuck 14454) 1982

97: 28848j Theoretical treatment of the spontaneous predissociation of diatomic bromine, $B^3\Pi(0_u^+)$. Clyne, Michael A. A.; Heaven, Michael C.; Tellinghuisen, Joel (Dep. Chem., Queen Mary Coll., London, UK E1 4NS). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(11), 5341-9 (Eng). The spontaneous heterogeneous predissociation of the $B^3\Pi(0_u^+)$ state Br is discussed. Theor. treatment of the heterogeneous interaction is presented, with emphasis placed on the role of the Franck-Condon principle in predissociation. Numerically generated vibrational wave functions are used to calc. predissociation probabilities for the B state. From these calcns. the parameters of the repulsive potential responsible for the predissociation are detd., and this potential curve is identified as the $^1\Pi(1_u)$ state. Good agreement with exptl. results was obtained with a $^1\Pi_u$ potential of the form $U(R) = 1.594 \times 10^4 / R^{2.384}$. This crosses the B state curve between $v' = 4$ and 5, which is two levels higher than indicated in previous work. The new $^1\Pi_u$ curve is compatible with other theor. and exptl. results.

irregular -
square

C. A. 1982, 97, 24

Br₂

[Отпуск 14454]

1982

24 Б20. Теоретическое изучение спонтанной преддиссоциации состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ молекулы Br₂ Clyne Michael A. A., Heaven Michael C., Tellinghuisen Joel. Theoretical treatment of the spontaneous predissociation of Br₂, $B^3\Pi(O_u^+)$. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5341—5349 (англ.)

преддиссоц.,
м.п., Si;

Теоретически изучена спонтанная гетерог. (удовлетворяющая правилу отбора $\Delta\Omega = \pm 1$) преддиссоциация состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ молекулы Br₂. Показано, что она практически полностью обусловлена взаимодействием с отталкивательным состоянием $^1\Pi(1_u)$. Обсуждена роль принципа Франка-Кондона в процессе преддиссоциации. При расчете вероятностей преддиссоциации использованы колебательные волновые функции, полученные численно. На основании результатов расчета определены молек. параметры состояния $^1\Pi(1_u)$. Найдено, что потенциальная кривая этого состояния пересе-

х. 1982, 19, 124

кает потенциальную кривую состояния $B^3\Pi(O_u^+)$ в точке, лежащей по энергии между 4- и 5-м колебательными уровнями, что на два колебательных уровня выше результата, полученного ранее. Отмечено, что найденная потенциальная кривая состояния $^1\Pi(1_u)$ хорошо согласуется с др. теор. и эксперим. результатами.

В. Б. Павлов-Вереvкин

1982

Br_2

Diegelmann Jr.,

спектр Hohlo K., et al.

Рейоренц. *J. Chem. Phys.*,

1982, 76, N3, 1233 -
-1247.

(*Chem. Fz.*; III)

Br_2^{2-}

1982

Minchcliffe Alan.

напряже- Adv. Mol. Relax.

моев,

Interact. Process

расшир

1982, 22 (4), 257-258.

●
(ser. Li Br ; III)

Br₂

Дм. 16303

1982

12 Б218. Спектры испускания брома в разрядах через смеси аргон+бромсодержащие соединения. Bromine emission spectra of discharged mixtures of argon+bromine-containing compounds. Kvaran Agúst, Bragason Hilmar. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1982, Pt 2, 78, № 12, 2131—2138 (англ.)

В области 190—370 нм измерены спектры испускания продуктов, образующихся при пропускании разряда через смеси аргона с Br₂, CH₂Br₂, HBr, CH₃Br, C₂H₅Br и JBr (общее давл. 0,1—3,5 кПа) в проточной системе. Обнаружено, что в отсутствие Br₂ в потоке относит. интенсивности линий Ar и Ar⁺ заметно не изменяются с изменением общего давл. Добавка Br₂ приводит к существенному изменению относит. интенсивностей этих линий, причем линии испускания Ar⁺

спектр, Li,
потенс.
кривые

X. 1983, 19, N 12



практически исчезают. При увеличении давл. Br_2 во всех системах интенсивности наблюдаемых пиков уменьшаются относительно полосы 290 нм, связанной с переходом $D' \rightarrow A'$ Br_2 . Спектры системы $\text{Ag} + \text{Br}_2$ при низких давл. существенно отличаются от спектров систем $\text{Ag} + \text{CH}_2\text{Br}_2$ и $\text{Ag} + \text{HBr}$ по характеру зависимости от давл. Специфика спектров системы $\text{Ag} + \text{Br}_2$ объяснена возможностью переноса электронной энергии от возбужденных атомов Ag молекулам Br_2 : $\text{Ag}^* + \text{Br}_2 \rightarrow \text{Ag} + \text{Br}_2^*$. При высоких давл. спектры всех систем $\text{Ag} + \text{RBr}$ аналогичны и интерпретируются в предположении втор. р-ции обмена между Br^* и RBr . Максим. выход испускания Br_2 получен в смесях Ag с Br_2 , CH_2Br_2 и HBr , что подтверждает предположение об участии возбужденных атомов Br^* в образовании Br_2^* . Отнесение всех наблюдаемых полос обсуждается на основе диаграммы уровней потенц. энергии Br_2 и модельного расчета спектра для переходов между связанными и отталкивательными состояниями для различных распределений заселенностей колебательных уровней.

С. Б. Осип

Br₂

Am. 16303

1982

/ 98: 134571u Bromine emission spectra of discharged mixtures of argon + bromine-containing compounds. Kvaran, Agust; Bragason, Hilmar (Sci. Inst., Univ. Iceland, Reykjavik, Iceland). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1982, 78(12), 2131-8 (Eng). The UV emission spectra of Br₂ obsd. from discharged mixts. of Ar and various Br-contg. compds. (Ar + RBr) are studied in a flow system at low pressure. Evidence for different Br₂^{*} formation mechanisms in Ar + Br₂ is presented. The dominant Br₂^{*} formation mechanism in other systems (Ar + RBr, R ≠ Br) is most probably an exchange reaction of Br^{*} with RBr. The origin of the Br₂ spectrum on the short-wavelength side of the 290 nm D'-A' band is discussed. The analyses suggest that the D'-A' transition makes a major contribution to the total intensity in the 240-290 nm region in Ar + RBr, R ≠ Br.

YOP cncmp

C. A. 1983, 98, N 16.

Br₂

1982

1 Д894. Спектры излучения и динамика релаксации возбужденных молекул ⁷⁹Br₂ в Ar- и Kr-матрицах. Emission spectra and relaxation dynamics of excited ⁷⁹Br₂ in Ar and Kr matrices. Mandich Mary, Becken Paul, Flynn George. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 2, 702—713 (англ.)

Исследованы спектральные и временные характеристики флуоресценции в ближней ИК-области (0,8—3 мкм) молекул ⁷⁹Br₂ в Ar- и Kr-матрицах при низких т-рах. Молекулы Br₂ возбуждали в видимой области лазерами на красителях с перестраиваемой длиной волны. Кроме известного по литературным данным из газовой фазы излучения B³Π (O_u⁺)→X¹Σ_g⁺ обнаружено более долгоживущее излучение, которое приписано ранее не наблюдавшимся переходам A³Π (1u)→X¹Σ_g⁺ и A³Π (2u)→X²Σ_g⁺. Измерены излучательные времена жизни, равные для перехода B→X (8±1)·10⁻⁶ в Ar-

спектры
излучения
и
динам. ре-
лаксации
в матрицах.

ср. 1983, 18, N1

матрице и $(5,3 \pm 0,5) \cdot 10^{-6}$ с в Кг-матрице для перехода $A \rightarrow X$ $(67 \pm 4) \cdot 10^{-6}$ с в Аг и $(170 \pm 10) \cdot 10^{-6}$ с в Кг, для перехода $A' \rightarrow X$ $(11 \pm 1) \cdot 10^{-3}$ с в Аг и $(6 \pm 1) \cdot 10^{-3}$ с в Кг. Рассмотрены возможные механизмы заселения указанных состояний, включающие быструю колебательную релаксацию и передачу энергии между различными электронными состояниями молекулы Br_2 .
Е. Н. Терещенко



Br₂

1982

classific.
 by electr.
 group. &
 sample

97: 101130a Emission spectra and relaxation dynamics of excited diatomic bromine-79 in argon and krypton matrixes. Mandich, Mary; Beeken, Paul; Flynn, George (Dep. Chem., Columbia Univ., New York, NY 10027 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(2), 702-13 (Eng). The photochem. dynamics of Br₂ trapped in Ar and Kr matrixes were studied. Following laser excitation into either the $B\ ^3\Pi(O_u^+)$ or $^1\Pi(1u)$ states, emission occurs in the near IR spectral region. Anal. of this emission indicates that it consists of 3 electronic transitions which were assigned as $B\ ^3\Pi(O_u^+)v' = O \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ (previously reported,) $A\ ^3\Pi(1u)v' = O \rightarrow X\ ^1\Sigma_g^+$ and (tentatively) $A'\ ^3\Pi(2u) \rightarrow X'\ ^1\Pi_g^+$. The $B \rightarrow X$ emission lifetime was $8.0 \pm 0.5\ \mu\text{s}$ in Ar matrixes ($5.3 \pm 0.5\ \mu\text{s}$ in Kr) and is in good agreement with both earlier detns. in matrixes and the gas phase $B \rightarrow X$ radiative lifetime. The obsd. $A \rightarrow X$ emission lifetime of $170 \pm 10\ \mu\text{s}$ in Kr is approx. the same as the measured $A \rightarrow X$ gas phase radiative lifetime, but appears shortened in Ar matrixes where the lifetime is $67 \pm 4\ \mu\text{s}$. The lifetime of the $A' \rightarrow X$ transition is $11 \pm 1\ \text{ms}$ in Ar and $6 \pm 1\ \text{ms}$

C.A. 1982, 97, N12

in Kr matrixes. The spectral and temporal data are consistent with an overall energy transfer mechanism involving both vibration and electronic relaxation. The intramol. electronic relaxation is somewhat restricted in that the highest lying $B\ ^3\Pi(O_u^+)$ state is populated only by direct absorption into its bound and continuum levels, whereas the 2 lower states $A\ ^3\Pi(1u)$ and $A'\ ^3\Pi(2u)$ acquire population after either the $^1\Pi(1u)$ or $B\ ^3\Pi(O_u^+)$ states are initially excited. Both the initial vibrational and electronic relaxation rapidly (<20 ns) routes the excited population into the lowest $v' = 0$ levels of the A and B states (and tentatively A'), whereas subsequent decay occurs on a 10^{-6} – 10^{-2} s timescale. All of the obsd. emission lifetimes are independent of temp., laser power and Br_2 : matrix dilns. ranging from 1:500–1:10 000.

Br₂

1982

2 Б1420. Эмиссионные спектры и динамика релаксации возбужденных молекул $^{79}\text{Br}_2$ в матрицах Ar и Kr. Emission spectra and relaxation dynamics of excited $^{79}\text{Br}_2$ in Ar and Kr matrices. Mandich Mary, Becken Paul, Flynn George. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 2, 702—713 (англ.)

Методом оптич. спектроскопии в области длин волн $<0,3\text{--}6$ мкм изучены эмиссионные спектры и динамика релаксации возбужденных молекул Br_2 (природное соотношение изотопов ^{81}Br и ^{79}Br) и $^{79}\text{Br}_2$ в матрицах из Ar и Kr при $T \approx 10\text{--}50$ К (доля Br_2 составляла 1/500 и 1/1000) при облучении импульсным светом лазеров на красителях. Кроме системы полос $B^3\Pi(O_u^+) \rightarrow X^1\Sigma_g^-$ наблюдали флуоресценцию, обусловленную переходом $A^3\Pi(1u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ (время жизни $\tau = 67$ и 170 мкс в матрицах Ar и Kr соотв.) и предположительно переходом $A'^3\Pi(2u) \rightarrow X^1\Sigma_g^+$ ($\tau = 11$ и 6 мс для матриц Ar и Kr соотв.). Заселение состояний $A^3\Pi(1u)$ и $A'^3\Pi(2u)$ обусловлено начальным возбуждением состояний $^1\Pi(1u)$ и $B^3\Pi(O_u^+)$ или колебательно-возбуж-

Эмиссионные
спектры в
матрицах

X. 1983, 19,
N2

денного состояния $B^3\Pi(\tilde{O}_u^+)$. Колебательная релаксация для рассмотренных электронных состояний протекает с высокой эффективностью за время ≤ 20 нс. Предполагается существование двух безызлучательных переходов между состоянием $B^3\Pi(\tilde{O}_u^+)$ и состояниями $A^3\Pi(1u)$, $A^{13}\Pi(2u)$: 1) переход, обусловленный диссоциативной Пв $^1\Pi(1u)$, связывающий потенциальные поверхности вышеприведенных связывающих состояний; 2) прямое взаимодействие между высоковозбужденными колебательными уровнями этих состояний. Дальнейшая релаксация из нулевого колебательного уровня является излучательной, кроме случая состояния $A^3\Pi(1u)v'=0$ в Аг-матрице, где она видимо, обусловлена возмущениями матрицы.

Ю. И. Дорофеев

Br₂ (24)

1982

PanKratz L. B.

(298-332.6) Thermodynamic Properties
of Elements and Oxides
USA Bur. Mines Bull. 672.

● (yillegbegebo)

Br₂

[Ommex 13866]

1982

Sakai Y., Huzinaga S.,

Кв. мех-
анизм

J. Chem. Phys., 1982,
76, N5, 2552-2557.

Br₂

Om. 16192

1982

12 B208. Резонансные серии Br₂ в вакуумной ультрафиолетовой области. Resonance series of Br₂ in the vacuum ultraviolet. Venkateswarlu Putcha, Sarma V. N., Rao Y. V. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 2, 247—265 (англ.)

В области 1500—2100 Å с высоким разрешением и дисперсией 0,48—0,20 Å/мм измерены спектры резонансной флуоресценции молекул Br₂, возбуждаемых МВ-разрядом (2400 МГц). Идентифицировано 12 дублетных серий Br₂—A₁, A₂, A₃, A₄, B₁, B₂, C, D, E₁, E₂, G₁ и G₂, возбуждаемых 4 атомными резонансными линиями брома (63436,52, 63498,51, 64907,24 и 65285,18 см⁻¹) из различных начальных вращательных уровней J'' колебательных состояний v''=0,1 основного электронного состояния. Показано, что каждая из пар серий A₁—A₂, A₃—A₄, B₁—B₂, G₁—G₂ и E₁—E₂ имеет один и тот же верхний колебательный уровень, возбужденный одной и той же резонансной линией, а вращательные квантовые числа для верхнего состояния указанных пар отличаются на три единицы, что приводит к появлению

М.П.

Х. 1983, 19, N12

«квартетных серий». Идентифицированы и проанализированы переходы на уровни основного состояния $0 < v'' < 76$ молекулы Br_2 . Равновесные вращательные постоянные $\text{Br}_2 X'\Sigma_g^*$ (см^{-1}): $B_e = 8,0911 \cdot 10^{-2}$, $\alpha_e = 2,1397 \cdot 10^{-4}$, $\gamma_e = -9,1929 \cdot 10^{-6}$, $\delta_e = 2,5419 \cdot 10^{-7}$, $\varphi_e = 2,8824 \cdot 10^{-9}$, $D_e = 3,3389 \cdot 10^{-8}$, $\beta_e = 1,614 \cdot 10^{-9}$ и коэф. C_n разложения $G''(v)$ по степеням $(v'' + 1/2)$ (см^{-1}): $C_1 = \omega_e = 323,2619$ (3894), $C_2 = \omega_e x_e = -1,04136$ (061), $C_3 = -0,0748489$, $C_4 = 5,75085 \cdot 10^{-4}$, $C_5 = -3,2181231 \cdot 10^{-5}$, $C_6 = 9,0712335 \cdot 10^{-7}$, $C_7 = -1,1747563 \cdot 10^{-8}$, $C_9 = 1,2951727 \cdot 10^{-12}$, $C_{11} = -1,4055015 \cdot 10^{-16}$, $C_{14} = 1,1553331 \cdot 10^{-22}$, $C_{17} = -5,695625 \cdot 10^{-29}$. Обсуждается отнесение верхнего электронного состояния для наблюдаемых переходов, в частности, отмечается возможность существования двух возбужденных электронных состояний в исследуемой области спектра. С. Б. Осин

Br₂

Ом. 16192 1982

7 Д750. Резонансные серии Br₂ в вакуумной УФ-области. Resonance series of Br₂ in the vacuum ultraviolet. Venkateswarlu Putcha, Sarma V. N., Rao Y. V. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 96, № 2, 247—265 (англ.)

С использованием с 10,7-м спектрографа исследован спектр флуоресценции Br₂ в области 1500—2100 Å, возбуждавшийся атомными резонансными линиями брома 63436,52, 63498,51, 64907,24 и 65285,18 см⁻¹. Проведен колебательный анализ спектра и идентифицированы 12 дублетных серий переходов в основное состояние ^{79,81}Br₂ с $\nu''=0-76$. Определены колебательные и вращательные постоянные основного и возбужденных состояний Br₂.

А. В. Н.

М.П.

Ср. 1983, 18, № 7

Br₂

OM - 16192

1982

798: 25077a Resonance series of diatomic bromine in the vacuum ultraviolet. Venkateswarlu, Putcha; Sarma, V. N.; Rao, Y. V. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 96(2), 247-65 (Eng). A high-resoln. resonance fluorescence spectrum of bromine excited by an elec. discharge at 1500-2100 Å was photographed on a 10.7-m concave grating vacuum spectrograph. Twelve resonance doublet series excited by 4 Br at. resonance lines were identified and analyzed. All doublet series have the ground state of ^{79,81}Br₂ as the lower electronic state. The vibrational nos. of these doublets corresponding to this state vary from 0 to 76. Rotational consts. are obtained by least-squares fitting of the doublet sepns., and the vibrational consts. were obtained by least-squares anal. of vibrational term values. Probable assignments for the upper electronic state(s) of the transitions involved were suggested.

BYP cnkxp

C.A. 1983, 98, N4.

Br₂

DM. 17698

1983

2 B1123. Поляризационная спектроскопия системы полос $E0_g+—B0_u+$ Br₂. Polarization spectroscopy of the $E0_g+—B0_u+$ band system of Br₂. Brand J. C. D., Deshpande U. D., Hoy A. R., Jaywant S. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 1, 143—150 (англ.)

Методом поляризационной спектроскопии с разрешением, ограниченным доплеровским контуром, измерена система полос $E0_g+—B0_u+$ молекул Br₂. Состояние B накачивались узкополосным лазером на красителе с круговой поляризацией. Зондирующим служил эксимерный лазер на XeCl, излучение к-рого проходило через скрещенные поляризаторы и достигало спектрометра только при тех частотах, к-рые соответствуют переходам из накачиваемых уровней состояния B на уровни состояния E. Наблюдено 55 электронно-колебательно-вращательных переходов в последовательности $E←B←X$ на колебательные уровни $v=0—15$ состояния E ⁷⁹Br₂ и выполнено их отнесение. Анализ наблюдаемой

м.п., Do;

X. 1984, 19, N 2

структуры проведен с учетом измерений частот переходов в $^{79}\text{Br}^{81}\text{Br}$, содержащихся в естественной смеси. Рассчитаны уточненные молекулярные постоянные $^{79}\text{Br}_2$ в состоянии E (см^{-1}): $Y_{00}=49777,962$, $Y_{10}=150,834$, $Y_{20}=-0,4182$, $Y_{30}=6,6 \times 10^{-4}$, $Y_{01}=4,1876 \times 10^{-2}$, $Y_{11}=-1,607 \times 10^{-4}$, $Y_{02}=-1,39 \times 10^{-8}$. Энергия диссоциации ионно-парного состояния E , коррелирующего с продуктами $\text{Br}^+ (^2\text{P}_2) + \text{Br}^- (\text{S}_0)$, оценена в 34700 см^{-1} .

С. Б. Осин

Br₂

[Om. 17698]

1983

3 Л190. Поляризационная спектроскопия системы полос $E_{0g^+}-B_{0u^+}$ молекулы Br₂. Polarization spectroscopy of the $E_{0g^+}-B_{0u^+}$ band system of Br₂. Brand J. C. D., Deshpande U. D., Hoy A. R., Jaywant S. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 100, № 1, 143—150 (англ.)

С использованием метода поляризационной спектроскопии исследован спектр поглощения паров Br₂ в области переходов $E-B(0_g^+-0_u^+)$. Разрешающая способность спектрометра была ограничена доплеровским уширением. По эксперим. данным получены спектроскопич. константы для состояния E (в см⁻¹): $Y_{0,0}=49777,962$, $Y_{1,0}=150,834$, $Y_{2,0}=-0,4182$, $Y_{3,0}=6,6 \cdot 10^{-4}$, $Y_{0,1}=4,1876 \cdot 10^{-2}$, $Y_{1,1}=-1,607 \cdot 10^{-4}$, $Y_{0,2}=1,39 \cdot 10^{-8}$, $r_e(\text{Br}^+, {}^3P_2+\text{Br}^-, {}^1S_0)=34\,700$. Равновесное межъядерное расстояние равно 3,194 Å.

М. Т.

all-n.

ф. 1984, 18, № 3

Br₂

(Dm. 17698)

1983

99: 96231u Polarization spectroscopy of the $E0_g^+ - B0_u^+$ band system of molecular bromine. Brand, J. C. D.; Deshpande, U. D.; Hoy, A. R.; Jaywant, S. M. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 100(1), 143-50 (Eng). The $E-B(O_g^+ - O_u^+)$ band system of Br₂ was investigated at Doppler-limited resolu. by using polarization labeling spectroscopy. Merged E state data for the 3 naturally occurring isotopes for $v_E = 0-16$, expressed in terms of the consts. for $^{79}\text{Br}_2$, are (in cm^{-1}) $Y_{0,0} = 49,777.962(54)$, $Y_{1,0} = 150.834(22)$, $Y_{2,0} = -0.4182(28)$, $Y_{3,0} = 6.6(11) \times 10^{-4}$, $Y_{0,1} = 4.1876(28) \times 10^{-2}$, $Y_{1,1} = -1.607(16) \times 10^{-4}$, and $Y_{0,2} = 1.39(39) \times 10^{-8}$. The bond distance is $r_e = 3.194 \text{ \AA}$, and the adiabatic dissocn. energy to $\text{Br}^+(^3P_2) + \text{Br}(^1S_0)$ is $34,700 \text{ cm}^{-1}$.

($E0_g^+ - B0_u^+$)

C. A. 1983, 99, N12

1983

Br₂

22 Б197. Расчет спектра поглощения и селективности лазерного возбуждения изотопов брома методом дискретного преобразования Фурье. Богородский М. М.,

Мусихин В. А., Семиохин И. А., Соколова Е. А. «Вестн. МГУ. Химия», 1983, 24, № 3, 244—247

Предложена методика расчета атомных долей изотопа ⁷⁹Br в возбужденных молекулах брома и спектра поглощения Br₂ при электронном переходе $B^3\Pi_{ou}^+ \rightarrow X^1\Sigma_g^+$, основанная на применении метода дискретного преобразования Фурье. Предлагаемая методика позволяет расчетным путем определять оптим. параметры (такие как т-ра, давление, ширина и положение лазерной линии) селективного возбуждения определенной изотопич. модификации молекул. Из резюме

расчет
спектра

X. 1983, 19, N 22

Br_2

1983

24 Б92. Процедура обращения типа РКР для интенсивностей переходов из связанных состояний в континуум. An RKR-like inversion procedure for bound — continuum transition intensities. Child Mark S., Essén Hanno, Le Roy Robert J. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6732—6740 (англ.)

спектр

Развит квазиклассич. метод восстановления отталкивательной потенциальной кривой двухатомной молекулы по эксперим. интенсивностям переходов из известного связанного состояния в неизвестное отталкивательное состояние. Метод основан на использовании однородного гармонич. приближения для интегралов перекрывания в случае переходов из связанных состояний в континуум. Рассмотрено применение метода к обработке распределения интенсивностей в континууме спектров испускания молекул Br_2 и NaK

(H)

— В. Б. Павлов-Верекин

X. 1983, 19, N 24

Br₂

[Om. 17145]

1983

Coombe R.D.,

$D^1(3/72g) \rightarrow$
 $\rightarrow A^1(3/72u)$

J. Chem. Phys., 1983,
79, N1, 254-264.