

УДК 535.338+621.373.826

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ МОНОБРОМИДА ГАФНИЯ В ОБЛАСТИ 550–800 НМ

Е.Н. Москвитина, Ю.Я. Кузяков

(кафедра лазерной химии; e-mail kuzyakov@laser.chem.msu.ru)

Исследован электронный спектр поглощения молекулы HfBr в области 550–800 нм методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии. Молекулы HfBr были получены в плазме, образующейся при прохождении импульсного электрического разряда через смесь паров тетрабромид гафния с водородом или аммиаком. Разрядная трубка со смесью помещалась в резонатор лазера на красителе. Регистрацию спектра проводили с помощью дифракционного спектрографа (разрешающая сила 240 000). Высокая чувствительность внутрирезонаторного метода позволила обнаружить в спектре HfBr двадцать новых полос с частично разрешенной вращательной структурой. По аналогии со спектром молекулы HfCl полосы HfBr отнесены к переходу ${}^2\Delta_{3/2}-X^2\Delta_{3/2}$. Проведен анализ полос и определены молекулярные постоянные $\omega_e'' = 255,07 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e'' = 0,86 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e' = 238,31 \text{ см}^{-1}$, $\omega_e x_e' = 1,1 \text{ см}^{-1}$, $B'' = 0,04251 \text{ см}^{-1}$, $B' = 0,04025 \text{ см}^{-1}$ для основного и возбужденного электронных состояний.

Ключевые слова: HfBr, монобромид гафния, внутрирезонаторная лазерная спектроскопия, колебательный анализ, молекулярные постоянные.

В последние годы наблюдается стабильный интерес к электронно-колебательно-вращательным спектрам (ЭКВ) двухатомных молекул, в составе которых имеется атом с незаполненными электронными оболочками. Несмотря на сложность регистрируемых электронных спектров поглощения оказалось возможным провести их колебательные и вращательные отнесения, определить молекулярные постоянные. Такие исследования стали возможны благодаря применению современной техники получения и высокоточного определения положения спектральных линий. Так, например,

получены и проанализированы электронные спектры фторидов TiF [1], HfF [2], ZrF [3].

В лаборатории лазерной спектроскопии химического факультета МГУ для анализа молекулярных спектров в широкой спектральной области был применен внутрирезонаторный лазерный метод в сочетании со спектрографом с высокой разрешающей силой. Этим методом были исследованы оксиды [4–6], нитриды [7–9] и галогениды [10–12] подгруппы титана. В настоящей работе представлен анализ электронного спектра монобромид гафния.

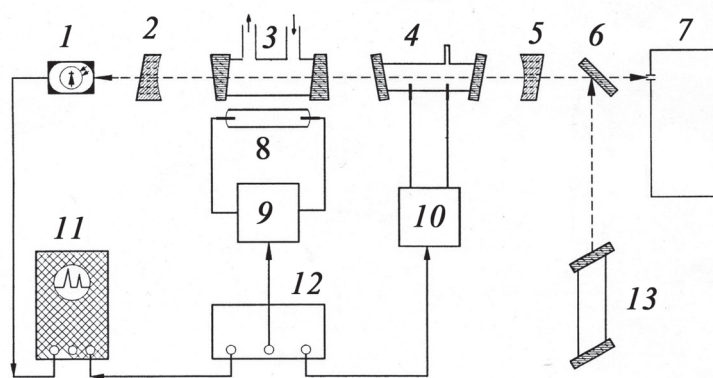


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – фотодиод, 2, 5 – диэлектрические зеркала, 3 – кювета с красителем, 4 – реактор, 6 – светоделитель, 7 – спектрограф, 8 – импульсная лампа, 9, 10 – блоки питания, 11 – осциллограф, 12 – генератор задержанных импульсов, 13 – He-Ne-лазер

Экспериментальная часть

Экспериментальная установка состоит из кварцевого реактора, предназначенного для получения молекул HfBr, лазера на красителе, используемого как источник излучения, и ряда оптических элементов, обеспечивающих фокусировку излучения на щель спектрального прибора. На рис. 1 приведена принципиальная схема установки, которая подробно описана в наших предыдущих публикациях [6, 7].

В настоящей работе мы кратко приводим методику получения спектра HfBr, обращая внимание на особенности применения тетрабромид гафния. Кварцевый реактор длиной 20 и диаметром 2 см снабжен впаянными электродами из молибденовой проволоки (диаметр 3–4 мм). Исследуемые молекулы образуются в плазме импульсного разряда (14 кВ, 3 мкф) в парах тетрабромид гафния в смеси с азотом и водородом (1:3) или аммиаком (2–3 Торр). Поскольку тетрабромид очень гигроскопичен, его загрузку в разрядную трубку проводили в сухой камере в токе азота. Для достижения необходимого при проведении эксперимента давления пара тетрабромид (около 10^{-1} Торр [13]) разрядную кварцевую трубку нагревали до температуры $\sim 150^\circ\text{C}$.

Одновременно с образованием монобромид гафния образуются молекулы Br₂, спектр которых расположен в той же исследуемой области и мешает идентификации спектра HfBr. Чтобы уменьшить окисление ионов брома, образующихся при прохождении разряда, использовали смесь водорода и аммиака, в результате чего удалось значительно уменьшить интенсивность спектра молекулярного брома.

Изучены зависимости интенсивностей спектров HfBr и Br₂ от концентрации тетрабромид, а также временные задержки между разрядом в реакторе и импульсом лазерной генерации. Длительность импульса генерации составляла 10 мкс, что соответствует эффективной длине поглощающего слоя ~ 1000 м.

В качестве активных лазерных сред использовали растворы красителей (родамин 6G, оксазин 17, родамин С, родамин незамещенный, крезил-виолет, ЛК-790) и их смеси с разной концентрацией компонентов в изопропиловом спирте. Использование смесей красителей не только расширяет область перестройки, но также снижает порог генерации и увеличивает мощность излучения лазера [14]. Обычно ширина спектра генерации составляет 10–20 нм. Оптимальная задержка, обеспечивающая получение молекулярного спектра HfBr,

свободного от посторонних линий, составляет 60–80 мкс.

Спектры поглощения HfBr регистрировали на четырехметровом спектрографе со специально профилированной дифракционной решеткой 75 шт/мм, работающей в 24–28 порядках (разрешающая сила достигает 240 000). В качестве стандартов длин волн использовали лампу с Fe-полым катодом. Точность определения положения неперекрываемых линий вращательной структуры составляет $0,03\text{ см}^{-1}$. Для юстировки всей оптической системы использовали излучение эталонного He–Ne-лазера.

Наблюдения и анализ

Спектр испускания молекулы HfBr впервые был получен в 1973 г. Савитри и Рао [15]. В области 610–650 нм наблюдали три группы полос, наиболее интенсивную из которых с $\lambda = 620,5$ нм интерпретировали как секвенцию с $d\nu = 0$. Электронный спектр поглощения монобромид гафния был получен нами в 1982 г. [16]. Как и авторы работы [15], мы наблюдали только три группы полос.

В настоящей работе для получения высокоинформативного спектра молекулы HfBr использован метод ВРЛС. Кроме полос, полученных в нашей предыдущей работе [16], были зарегистрированы 20 новых.

Спектр HfBr, расположенный в области 550–850 нм, по внешнему виду сходен со спектром хлорида гафния и состоит из семи групп полос с красным оттеснением. Наиболее интенсивная группа с $\lambda = 620,5$ нм по величине изотопического сдвига идентифицирована как секвенция с $d\nu = 0$. Другие шесть групп полос расположены с двух сторон (в длинноволновой и коротковолновой областях) от секвенции с $d\nu = 0$. Они отнесены к секвенциям с $d\nu = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$. Секвенция с $d\nu = 0$ состоит из пяти полос: 0-0, 1-1, 2-2, 3-3, 4-4. На рис. 2 приведена микрофотограмма полос 0-0, 1-1 и 2-2, полученных с разными задержками между инициирующим разрядом и лазерным импульсом.

Полосы секвенции с $d\nu = -1$ интенсивны, наблюдались переходы 0-1, 1-2, 2-3, 3-4, 4-5 и 5-6. На рис. 3 приведена микрофотограмма части полосы 0-1. Из рис. 3 видно, что каждая из наблюдаемых полос состоит из двух кантов, которые обусловлены изотопомерами $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$, $^{178}\text{Hf}^{79}\text{Br}$, $^{180}\text{Hf}^{81}\text{Br}$, $^{178}\text{Hf}^{81}\text{Br}$ (бром имеет два природных изотопа – ^{79}Br (50,57%) и ^{81}Br (49,43%).

Полосы секвенции с $d\nu = +1, +2, +3, +4$ менее интенсивны, чем полосы секвенций с $d\nu = -1$.

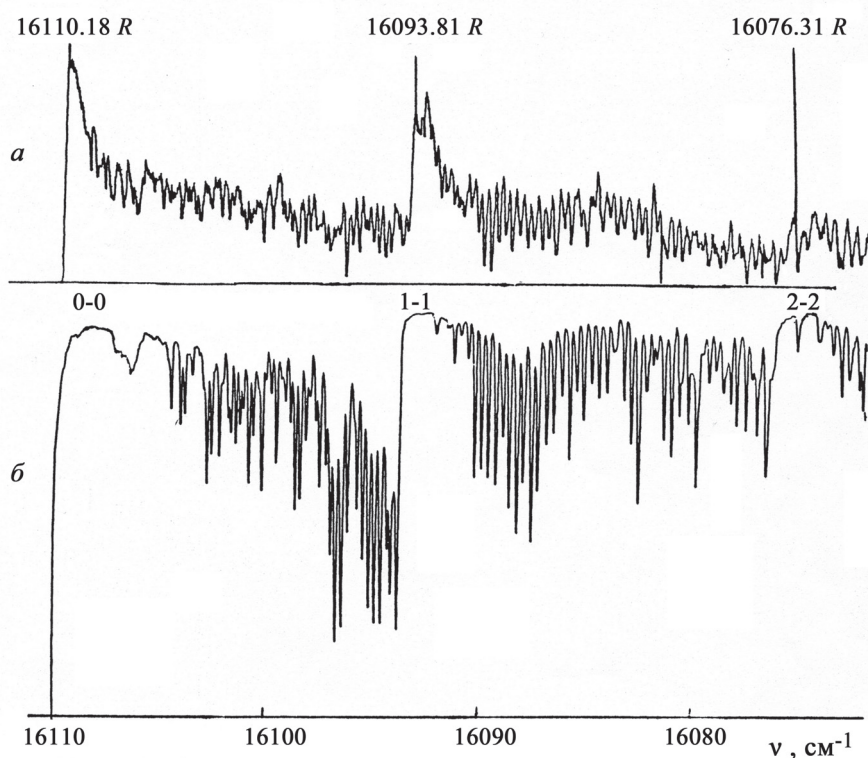


Рис. 2. Микрофотограмма части полосы секвенции с $\nu = 0$ молекулы HfBr в области $16110\text{--}16070\text{ см}^{-1}$ при задержке, мкс: а – 200, б – 60

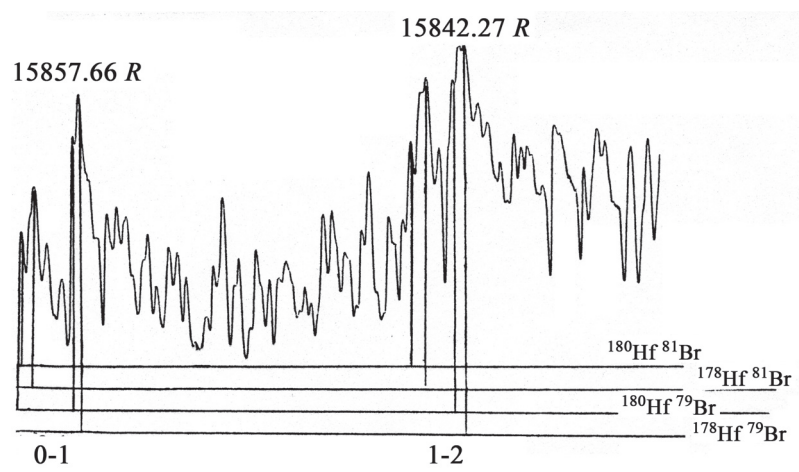


Рис. 3. Изотопическое расщепление полос 0-1 и 1-2 молекул $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$ и $^{80}\text{Hf}^{81}\text{Br}$

Канты полос наблюдаемых секвенций сильно уширены из-за изотопических сдвигов по гафнию, имеющему шесть изотопов с природным содержанием: ^{180}Hf (35%), ^{178}Hf (27%), ^{179}Hf (13,75%), ^{177}Hf (18,56%), ^{176}Hf (5,25%), ^{174}Hf (0,165%). Так, изотопический сдвиг по гафнию в полосе 1-0 для молекул $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$ и $^{177}\text{Hf}^{79}\text{Br}$ составляет $\Delta\nu = 0,58\text{ см}^{-1}$. Канты наблюдаемых полос для молекулы $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$, расположенные в виде таблицы Деландра, приведены в табл. 1.

Колебательные постоянные комбинирующих электронных состояний были рассчитаны методом наименьших квадратов с использованием значения волновых чисел всех полос, отнесенных к колебательной структуре рассматриваемого электронного перехода

$$\nu = \nu_0 + [\omega_e' (\nu' + 1/2) - \omega_e x_e' (\nu' + 1/2)^2 + \omega_e y_e' (\nu' + 1/2)^3] - [\omega_e'' (\nu'' + 1/2) - \omega_e x_e'' (\nu'' + 1/2)^2 + \omega_e y_e'' (\nu'' + 1/2)^3].$$

Т а б л и ц а 1

Наблюдаемые *R*-канты полос молекулы $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$ (см^{-1})

ν'/ν''	0	1	2	3	4	5
0	16110,78	15857,66	15606,20	15358,65	–	–
1	16346,93 16346,14 Q	16093,81 16093,28 Q	15842,27	15592,80	–	–
2	16581,49	16327,80 16327,01 Q	16076,31 16075,26 Q	15825,26	15575,90	–
3	16813,48	16560,18	16308,69 16308,19	16058,61 16056,78 Q	15808,18	–
4	–	16790,20	16538,69	16286,82 16286,08	16037,67	15788,76
5	–	–	16766,40	16514,25	16264,87	–

Т а б л и ц а 2

Наблюдаемые и рассчитанные изотопические сдвиги в *R*-кантах полос молекул Hf^{79}Br и Hf^{81}Br (см^{-1})

ν'/ν''	0		1		2		3		4	
	А	Б	А	Б	А	Б	А	Б	А	Б
0	–0,06	–0,05	–2,30	–2,24	–4,8	–5,1	–6,70	–6,48	–	–
1	2,08	1,94	–0,23	–0,22	–2,36	–2,36	–4,71	–4,47	–	–
2	4,10	3,91	1,81	1,75	–0,43	–0,38	–2,52	–2,49	–4,81	–4,56
3	6,10	5,84	3,77	3,62	1,57	1,54	–0,67	–0,57	–2,78	–2,63
4	–	–	5,8	5,64	3,60	3,47	1,47	1,42	–0,81	–0,73
5	–	–	–	–	5,53	5,64	3,19	3,20	–	–

Пр и м е ч а н и е. А – наблюдение, Б – расчет.

Несмотря на то что введение второго коэффициента ангармоничности $\omega_e x_e$ и приводит к более точному совпадению экспериментальных значений кантов с рассчитанными, сам коэффициент $\omega_e x_e$ вычисляется с ошибкой ($>100\%$). В связи с этим при расчетах мы ограничились полиномом второй степени. Для расчета колебательных постоянных HfBr использовали 26 уравнений. Полученные молекулярные постоянные использованы для расчета изотопических сдвигов между полосами молекул Hf^{79}Br и Hf^{81}Br .

Изотопические сдвиги по бром рассчитаны по уравнению:

$$\Delta\nu(\mu^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br} - \mu^{180}\text{Hf}^{81}\text{Br}) = (1-\rho)[\omega_e'(v'+1/2) - \omega_e''(v''+1/2)] - (1-\rho)^2[\omega_e x_e'(v'+1/2)^2 - \omega_e x_e''(v''+1/2)^2],$$

где ρ – приведенная масса ($\rho = [\mu(^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br})/\mu(^{180}\text{Hf}^{81}\text{Br})]^{1/2}$) [17].

В табл. 2 приведены изотопические сдвиги, показывающие хорошее согласие между экспериментальными и рассчитанными значениями, что

Т а б л и ц а 3

Молекулярные постоянные (в см^{-1}) для состояний $X^2\Delta_{3/2}$ и $^2\Delta_{3/2}$ молекулы $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$

Молекулярная постоянная	$X^2\Delta_{3/2}$	$^2\Delta_{3/2}$
T_0	0	16118,8
B_e	0,04251(12)	0,04025(12)
$D_e \times 10^8$	4,71(15)	4,62(15)
$r_e, \text{Å}$	2,688(1)	2,802(1)
ω_e	255,07(0,15)	238,31(0,15)
$\omega_e x_e$	0,86(0,06)	1,11(0,09)

Пр и м е ч а н и е. Цифры, приведенные в скобках, являются средноквадратичными ошибками определения молекулярных постоянных, приведенных в таблице.

Т а б л и ц а 4

Наблюдаемое положение вращательных линий (в см⁻¹) в полосе 0–0 перехода ²Λ_{3/2} –X²Λ_{3/2} молекулы HfBr и их разница с рассчитанными величинами

<i>J''</i>	<i>R</i> -ветвь (наблюдение)	Наблюдение–расчет	<i>J''</i>	<i>R</i> -ветвь (наблюдение)	Наблюдение– расчет
2,5	16109,65	3	57,5	16106,60	–4
3,5	16109,75	0	58,5	16106,42	–4
4,5	–	–	59,5	16106,21	–2
5,5	–	–	60,5	16106,03	–3
6,5	–	–	61,5	–	–
7,5	16109,96	2	62,5	16105,64	–3
8,5	–	–	63,5	16105,44	–4
9,5	–	–	64,5	16105,21	–2
10,5	–	–	65,5	16105,00	–3
11,5	–	–	66,5	16104,65	10
12,5	–	–	67,5	16104,57	–4
13,5	–	–	68,5	16104,33	1
14,5	–	–	69,5	16104,09	3
15,5	–	–	70,5	16103,82	11
16,5	–	–	71,5	16103,56	–6
17,5	16110,18	–2	72,5	16103,24	1
18,5	16110,18	–	73,5	16103,16	–4
27,5	16109,99	1	74,5	16102,63	3
28,5	16109,90	–1	75,5	16102,62	–2
29,5	–	–	76,5	16102,29	3
30,5	16109,79	0	77,5	16102,07	–2
31,5	–	–	78,5	–	–
32,5	16109,65	2	79,5	16101,49	1
33,5	–	–	80,5	16101,32	–10
34,5	16109,49	3	81,5	–	–
35,5	–	–	82,5	16100,52	12
36,5	16109,38	2	83,5	16100,29	6
37,5	16109,29	2	84,5	16100,05	5
38,5	16109,18	0	85,5	–	–
39,5	16109,08	0	86,5	16099,41	2
40,5	16108,99	–1	87,5	16099,11	1
41,5	16108,89	–2	88,5	16098,75	5
42,5	16108,75	1	89,5	16098,45	3
43,5	16108,62	3	90,5	16098,21	–6
44,5	–	–	91,5	16097,82	0
45,5	16108,39	–1	92,5	16097,50	–1
46,5	–	–	93,5	16097,13	2
48,5	16107,99	1	94,5	16096,74	6
49,5	16107,84	–2	95,5	16096,41	5
50,5	–	–	96,5	16096,14	–4
51,5	16107,53	–3	97,5	16095,73	1
52,5	16107,41	0	98,5	16095,44	–6
53,5	16107,22	3	99,5	16095,07	–6
54,5	16107,08	0	100,5	16094,59	–9
55,5	16106,82	–1	101,5	16094,35	1
56,5	–	–	102,5	16093,87	1

Окончание табл. 4

J'	P -ветвь (наблюдение)	Наблюдение–расчет	J'	P -ветвь (наблюдение)	Наблюдение– расчет
3,5	16109,11	1	51,5	16099,16	3
4,5	16108,99	1	52,5	16098,93	-5
5,5	16108,89	0	53,5	16098,52	3
6,5	16108,79	0	54,5	16098,21	2
7,5	16108,65	2	55,5	16097,95	-5
8,5	16108,59	-3	56,5	16097,52	-4
9,5	16108,39	4	57,5	16097,23	-1
10,5	16108,35	-5	58,5	-	-
11,5	16108,19	-2	59,5	16096,54	1
12,5	16107,99	4	60,5	16096,17	9
13,5	16107,91	-2	61,5	16095,73	1
14,5	16107,79	-4	62,5	16095,44	2
15,5	16107,51	9	63,5	16095,11	-2
16,5	16107,41	4	64,5	16094,82	-9
17,5	16107,22	8	65,5	16094,35	0
18,5	16107,08	4	66,5	16093,91	6
19,5	16107,00	-5	67,5	-	-
20,5	16106,82	-4	68,5	-	-
21,5	16106,60	0	69,5	-	-
22,5	16106,42	0	70,5	-	-
23,5	16106,23	0	71,5	-	-
24,5	16106,03	1	72,5	16091,60	-1
25,5	-	-	73,5	-	-
26,5	-	-	74,5	16090,75	2
27,5	16105,44	0	75,5	16090,37	-2
28,5	16105,22	1	76,5	16089,91	1
29,5	16105,01	1	77,5	16089,56	-7
30,5	16104,81	0	78,5	16089,18	-12
31,5	16104,58	0	79,5	16088,54	8
32,5	16104,35	0	80,5	16088,19	-2
33,5	16104,09	3	81,5	16087,86	-12
34,5	16103,93	-4	82,5	16087,18	10
35,5	-	-	83,5	16086,81	1
36,5	16103,46	-6	84,5	16086,48	-1
37,5	16103,16	-1	85,5	16086,10	-2
38,5	-	-	86,5	16085,39	2
39,5	16102,65	-1	87,5	16084,95	3
40,5	16102,43	-5	88,5	-	-
41,5	16102,07	4	89,5	16083,97	2
42,5	16101,83	1	90,5	16083,52	-2
43,5	16101,61	-5	91,5	16083,09	-9
44,5	16101,32	-4	92,5	16082,55	-3
45,5	16101,04	-4	93,5	16082,04	-3
46,5	16101,73	-2	94,5	16081,55	-4
47,8	-	-	95,5	-	-
48,5	-	-	96,5	16080,47	-2
49,5	16099,89	-9	97,5	16079,99	3
50,5	16099,51	-1	-	-	-

Пр и м е ч а н и е. Ошибки между наблюдаемыми и рассчитанными значениями в 10^{-2} см^{-1} .

является подтверждением правильности колебательного анализа.

В качестве наиболее достоверных значений колебательных постоянных для молекулы $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$ мы рекомендуем значения, приведенные в табл. 3.

По аналогии с молекулой монохлорида гафния мы предположили, что спектр HfBr в области 550–850 нм принадлежит электронному переходу $^2\Delta-X^2\Delta$, хотя в структуре полос имеются некоторые особенности, а именно: канты в секвенции с $dv = 0$ являются дублетными и кроме R-кантов наблюдаются также слабые Q-канты.

Вращательный анализ

Величина вращательной постоянной в изотопной смеси очень мала, вследствие чего линии вращательной структуры сильно перекрыты, и их точное положение трудно определить даже с помощью использованного нами спектрографа. Наибольшее наложение наблюдается в области кантов полос. Выделение ветвей во вращательной структуре было проведено с помощью метода Лумиса–Вуда [17]. Надежно измерены линии вращательной структуры только для наиболее распространенного изотомера $^{180}\text{Hf}^{79}\text{Br}$. Первоначально для получения достоверной оценки вращательных постоянных в случае как основного, так и возбужденного электронных состояний было использовано соотношение Берджа [17], $\alpha_e/B_e \approx 1,4 \omega_e x_e / \omega_e$, которое применимо с достаточной степенью точности

для большинства известных бромидов. Значения величины α_e для бромидов примерно вдвое меньше таковых для соответствующих хлоридов как в основных, так и в возбужденных электронных состояниях. Для молекулы монохлорида гафния значение α_e определено с высокой точностью в [18]. Используя эти данные, мы рассчитали значение $B_e''(\text{HfBr})$ и B_e' (HfBr), провели расчет положений линий вращательной структуры для R- и P-ветвей в предположении типа перехода $^2\Delta_{3/2}-X^2\Delta_{3/2}$ [18] и сравнили их со значениями измеренных линий вращательной структуры. В табл. 4 приведены экспериментальные значения волновых чисел линий R- и P-ветвей и их сравнение с расчетными величинами. Значение постоянной центробежного искажения D_e было оценено по формуле Кратцера: $(4B_e^3/D_e)^{1/2} = \omega_e$ [17]. В табл. 4 приведены молекулярные постоянные HfBr .

Таким образом, электронный спектр поглощения HfBr в области 550–800 нм исследован методом внутривибрационной лазерной спектроскопии. Кроме полос, известных в литературе, были зарегистрированы 20 новых. В полосах наблюдали изотопические сдвиги по бром и гафнию. Проведен анализ полос и рассчитаны колебательные молекулярные постоянные в основном и возбужденном электронных состояниях. По аналогии с молекулой монохлорида гафния сделано предположение, что наблюдаемый спектр HfBr относится к электронному переходу $^2\Delta-X^2\Delta$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ram R.S., Bernath P.F. // J. Mol. Spectrosc. 2005. Vol. 231. P. 165.
2. Adam A.G., Hopkins W.S., Tokaryk D.W. // J. Mol. Spectrosc. 2004. Vol. 225.
3. Martinez A., Morse M.D. // J. Chem. Phys. 2011. Vol. 135. P. 024308.
4. Степанов П.И., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1983. Vol. 24. С. 442.
5. Stepanov P.I., Moskvitina E.N., Kuzyakov Yu.Ya. // Spectroscopy. Lett. 1988. Vol. 21. P. 225
6. Кузяков Ю.Я., Москвитина Е.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2001. Vol. 42. С. 162.
7. Степанов П.И., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1984. Vol. 25. С. 15.
8. Степанов П.И., Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1988. Vol. 29. С. 147.
9. Kuzyakov, Yu.Ya.; Moskvitina, E.N. // Intracavity spectroscopy of simple molecules. SPIE-1001-119. The International Society for Optical Engineering. 1997. P. 71.
10. Moskvitina E.N., Stepanov P.I., Shakhovkin O.B. // Spectrosc. Lett. 1993. Vol. 20. P. 1639.
11. Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2014. Vol. 55. С. 43.
12. Москвитина Е.Н., Кузяков Ю.Я. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2014. Vol. 55. С. 360.
13. Свойства неорганических соединений. Л., 1983.
14. Левин Н.Б., Черкасов В.И., Широков В.И. // Опт. и спектр. 1975. Vol. 38. С. 150.
15. Savithry T., Rao D.V.K., Rao P.T. // Physica. 1973. Vol. 67. P. 400.
16. Ивануцкая Н.Н., Москвитина Е.Н., Степанов П.И. // Электронные спектры галогенидов гафния. Дип. ВИНТИ. № 4934-82. М., 1982.
17. Herzberg, G. // The spectra and structures of simple free radicals. L., 1977.
18. Ram R.S., Adam A.G., Tsouli A., Lievin J., Bernath P.F. // J. Mol. Spectrosc. 2000. Vol. 202. P. 116.

INVESTIGATION OF THE ABSORPTION ELECTRONIC SPECTRUM OF THE MONOBROMIDE HAFNIUM MOLECULE IN THE REGION 550–800 NM

E.N. Moskvitina, Yu.Ya. Kuzyakov

(Division of Laser Chemistry)

The absorption electronic spectra of HfBr in the region 550–800 nm have been obtained and investigated using the intracavity laser method. Molecules of HfBr have been created in plasma formed by a pulse electric discharge in vapors of a mixture of hafnium tetrabromide with nitrogen and hydrogen or ammonium. The discharge tube with the mixture was placed in the cavity of a dye laser. The registration of spectra has been performed by means of the diffraction spectrograph (resolution power 240000). Twenty new bands contained partly resolved rotational structure were found in the HfBr spectrum as a result of the high sensitivity of the intracavity method. Bands in the spectrum of HfBr were assigned to ${}^2\Delta_{3/2}-X\ {}^2\Delta_{3/2}$ transition by analogy with the spectrum of HfCl. Analysis of these bands were performed and the molecular constants unknown before were determined.

Key words: HfBr, intercavity laser spectroscopy, vibration analysis, molecular constants.

Сведения об авторах: *Москвитина Евгения Николаевна* – ст. науч. сотр. кафедры лазерной химии химического факультета МГУ, канд. хим. наук (moskvitina@laser.chem.msu.ru); *Кузяков Юрий Яковлевич* – профессор кафедры лазерной химии химического факультета МГУ, докт. хим. наук (kuzyakov@laser.chem.msu.ru).