实验中发现，当激光入射角 $\alpha = 45°$ 时，BS 光谱红移且加宽；而 90°SS 光谱呈蓝移并加宽．如以布里渊不稳定性解释，则利用测得的谱移 $\Delta\lambda_{BS}$ 和 $\Delta\lambda_{SS}$ 可推算出等离子体的马赫数与离子声速分别为 1.20 及 $(3.3—5.0)\times 10^7$cm/sec．而这正与理论所预告的冕区的超音速流动及 K-边 X 光测量得到的电子温度值相符合．另外，根据 $\alpha = 45°$ 与 $\alpha = 0°$的两发打靶测得的 BS 光谱的谱移所推算出的马赫数与离子声速值也与前面按 BS、SS 光谱的推算结果正相一致．

正如已有理论指出的，从临界密度处的非受激散射可成为进一步布里渊放大的源；特别是在 $\alpha = 45°$ 时，较大的镜向反射可构成这样的源．然而，在 $\alpha = 30°$时，我们也观察到明显的 90° 的受激侧向散射；这显然表明，受激布里渊的适宜角度的前向散射的非受激镜向散射也有可能构成进一步布里渊放大的足够强的源．

徐至展　钱爱娣　张文琦　唐永红
（中国科学院上海光学精密机械研究所）

核磁共振数据库
——化合物谱图数据的检索方法研究

近年来，我们在建立核磁共振数据库的过程中对化合物及其子结构的检索方法作了研究，采用预检索并发展了一套参数检索技术，建立起一个比较简便快速唯一性很好的 ^{13}C-核磁共振数据库化合物谱图数据检索系统．

目前在我们的数据库中，有七千多个有机化合物的 ^{13}C-核磁共振谱图数据，以及这些化合物分子结构的连接表数据．在此基础上，我们首先根据分子结构各种特征参数生成不同类别的索引文件．当一个化合物的分子结构被指定需要查找时，按照给定的结构信息，便可从上述文件中产生出若干个数据集来．这些数据集的共同交盖区便是要查找的化合物可能存在的范围．以 3-丁烯-1-醇（CH_2═CH—CH_2—CH_2—OH）为例，它所含有的非氢原子总数是 5 个，4 个碳和 1 个氧，另外还含有一根脂链双键，从而可生成四个数据集．经过这四个数据集的交运算，得到的候选化合物少至四种，多至数十种（具体取决于索引文件和数据集的形成定义及其算法）．也就是说，通过预检索，这个化合物的检索范围由原来整个库的七千多个化合物缩小到几个或几十个．

为了最后确定所要查找的化合物在库中是否存在，作者提出了一套参数检索方法．对于任何类型的化合物系列，只要依次通过作者定义的键权值和异构指数这二个参数值的检查，均可一次准确无误地确证所要查找的化合物在库中存在与否．如果存在，即可根据该化合物的登录号调出它在库中的部分或全部信息．

对未知化合物，检索系统可根据该化合物的核磁共振谱的有关信息（化学位移和峰的多重性等）对化合物中可能存在的基团或子结构作出一定的判断．对于库中不存在的化合物，如使用者要求，检索系统可协助验证谱图数据的合理性，亦可找出结构相近的化合物的谱图数据供使用者参考．

蒋大智
（中国科学院化学研究所，北京）