

KH

ВФ. - 1140 - X

1932

KH

G. M. Almy, C. D. House

Phys. Rev. 42, 242-66

Спектр KH.

Дуга

в H<sub>2</sub> находится в левой камере, оклаш. борн. Оклаш. борн.

Медь

Пылает поперек, по шуму, однако видно збл. м. коэфф.

Hilber

есть линии 10 A/мк. 4100-6600. полосы

 $1\Sigma - 1\Sigma$ 2,9 полосе  $\Delta_c F = 4B_v(k + \frac{1}{2}) + 8D_v(k + \frac{1}{2})^3 + 12F_v(k + \frac{1}{2})^5$ 

Медь

коэфф. кривизны  $D_e = -4B_e^3/\omega_e^2$  $B_v = B_e - d v - f v^2$  $F_e = (D_e^2/B_e)(2 - d e \omega_e / 6 B_e^2)$ 

Нул. линии

на у-ном ветви,  оцены Fe. По методу камер. вкв.

$$Y_c = 19525.2 + 254.51 u' + 3.26 u'^2 + 0.2725 u'^3 - 0.105 u'4 + 0.000273 u'^5 -$$

$$984.3 u'' + 14.5 u''^2$$

$J_e$	$8 \cdot 10 \cdot 10^{-10}$	$20.6 \cdot 10^{-10}$	процесса в $v'$	$v'$
$Z_0$	2.24 A	3.58 <del>10</del>	0	5-13
$B_c$	3.415	1.344	1	3-7 + 13-16
$d_e$	0.083	-0.030	2	2-5
$D_f$	$-1.65 \cdot 10^{-4}$	$-1.44 \cdot 10^{-4}$	3	0-3
$F_e$	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^{-8}$	4	0-2
$W_e$	984.3	254.5		
$w_x c$	14.5	-3.26		
	Оснор.	вожб.		
$D_{\text{ж}}$	2.06	1.25		

интервал жез.

~~Уж~~ жезама, иим. — жезр.  
+  $v_e$  вождум.

Ужрди. жррел солнц.  $k_{41}/k_{40} = 1/20$  Бужрв он жржржржржр  
но все томн жрвр. в  $v'$  жет

KH  
2772.

Imanishi S.

1932

m. n.

Monthly

Nature. 1932, 143, 165  
p.

9

KH

m. n.





1140

1932

KH ( mol.const.)

Almy G.M., Hause C.D.

Phys.Rev. 1932, 42, 242-66

"The spectrum of ...

J

C.A., 1933, 24

КН

Т. Нози

ВФ-1143-Х

1933

Mem. Ryojun Coll. Eng. 6, 1

Memoirs. Ryojun College of Engineering.

Обл. 4090-6610, многошпигат шпиг КН 'Σ-Σ'. Нулевые шпиги  
62 отделеция нове = нэть профессий

Аномалия дух совет., размер шпиги. естество прищ. Р-К 921 нуль  
е болтны шпиг. мичеис шпигуш. Шпиг. гасеон 1,91 мм, 1,15 мм  
Осн. совет → К + К в норм. совет. Возб. на норм Р и К (2Р) <sup>в шпиге</sup>

С пароболом шпиги кад, болшеиши кондукции в массе.

3920, 3750 и 3500А.

$$\gamma_0 = 19541.7 + 240.18 u' + 7.0147 u'^2 - 0.41941 u'^3 + 0.0114949 u'^4 - 0.00014811 u'^5 - (983.3 u'' - 14.40 u''^2)$$

$$B_{\sigma'} = 1.311 + 0.0527 u' - 0.00878 u'^2 + 0.0006407 u'^3 - 0.00002527 u'^4 + 0.000000394 u'^5$$

$$B_{\sigma''} = 3.407 - 0.0673 u'' - 0.00096 u''^2$$

$$u'' = \sigma - \frac{1}{2}$$

Если предп. аном.

$$\gamma_e' = 3.61 \cdot 10^{-8}$$

$$\gamma_e'' = 2.24 \cdot 10^{-8}$$

Энерг. максим. верх. осей. — 1.15 eV

$$D_0'' = \gamma(0.0) + D_0'' - \text{эл. в. в. К} = 2.36 + 1.15 - 1.6 = 1.91$$


Максим. энерг. ниж. осей.  $D_0 = 2.07$

КН  
Nall

T. Hori

1933

Japan. J. Phys. 8, 151

О волновой функции вещества КН.  
В дуге между катодом и анодом в вакууме. Н<sub>2</sub> для замера  
кроме  $\Sigma$ - $\Sigma$  сает. КН волновой функции сина, который также  
для отнес к молекуле КН. При приближении принципа  $\sigma$ - $\kappa$   
в со волновой функции габел Волновой функции катодного. Ред ирр  
о переходе с катодного  $\Pi$ -состояния в анодное осев.  $\Sigma$ -сое  
(Verbindungspektum). Коэф-циенты к-ады и воб. к-ады в  $\Sigma$ -сое  
вероятностей, то показывают на  отражение криво  $\Pi$ -состояния  
и могут переходить в различные коэф-циенты катодного

$\int \Sigma$  соотвешт. Если предположить, что в соет. Печенье.  
 Термодинамическое равновесие, тогда индексный процесс м.б. рассматр.  
 по соотношению

$$J = \text{const} E e^{-\frac{E}{kT}} \left[ \int_0^{\infty} z \psi' \psi'' dz \right]^2 \psi$$

Кривая ~~исследования~~ построена в 0, <sup>идея, достигающая</sup> по которой можно судить  
 о характере рассеяния и т.д. в кадре..

У нас также имеется величина кондукции, но в меньшем объеме  
 в то время как у Лик такого нет.

К: и коридор: максим. кондукция 28300, при макс. тем. 3930, 37  
 и 3530 К.

Нам - 3303



это вышло по фотоп., так же правдо.

КН

T. Hori

1933

рел. 2р4

Mem. Ryojun Coll. Eng. 6, 115

Memoirs of Ryojun College of Engineering.

О волненьи электромагнитных  
КН.

То же самое, совершенно точно, в 1921

Japan J. Phys. 8, 151, 1921

1143

1933

KH (D) *Takeda Hori*

Mem. Ryojun Coll. Eng. 1933, 6, 1-33

"The band spectrum of ..."

J

C.A., 1933, 3398



KD (P) Borocco A. BQ-481-X 1937

KH,  
NAD  
Nall

Concept. reud. 1937, 205, 9835

Comparative elissociation.



KM, KD ( $K_p, \Delta H_f$ ) Sollers E.F., 1987  
Crenshaw Y.L.

J. Am. Chem. Soc. 1937, 59,  
2015-220.

" The dissociation pressures  
of potassium deuteride  
and potassium hydride

1941

3002

Kelley K.K.,

U.S. Bur. Mines Bull. 434 (1941)

KH( g, S<sup>o</sup> )

Be, M, W

КН ВФР 3260-X ВФР-3260-X 1942

G. M. Aftu, A. C. Veizer

Phys. Rev. 61, 476

Потенц кривые возбужденного сост. КН.

$^1S-^1S$  сост КН, сфотографирована с высокой диспер. в обл. 4150-4650 Å, проанализирована. Поверхности прежних данных и устаревших расчетов в виде пост.. По методу Клейна пост. потенц кривая возб. сост. для проверки теории Малликена об атом. характере возб. сост.. Колеб. энергии возб. состояний пролежена до  $\sim 3/4$  от энергии диссоц., дающей тем для грубых штрихов целотных. Как в LiK, кривая возб. сост. пересекает ионную кривую и диссоц. по уровню  $\bullet$  более ка  $K(^2P)$  и  $H(^2S)$ . Относит. положение молекулы и ионной кривых в достат. согласии с теор. Малликена

Рекоменду. поэт. КН.  
Осн. сост.

Авт. сост.

Te	0	19530.2
$\omega_e$	985.0	251.0
$\omega_{ex}$	14.65	-4.5
$B_e$	3.415	$1.32 \pm 0.01$
$d_e$	0.083	-0.04
$z_e$	2.24	3.60
$J_e \cdot 10^{-40}$	8.20	21.2
$\alpha_0$ (cm <sup>-1</sup> )	17027.0	11932.0
$\alpha_1$	-2.168	-0.04
$\alpha_2$	3.015	2.275
$\lambda_e$ (ev)	1.92	$1.10 \pm 0.15$

по нек. жет.  
2.05

Подобноетн тетраге стр. 19

KM. (P, D) Harold A.

1947

Comput. revul. 1947, 224, 1826 +

Dissociation pressure of...

1954

КМ?

L.F. Barrow, Count G.D.

Proc. Phys. Soc. A67, 68-73У. Р. спектр  $2^{10} \text{Ar. II}$  ширшекоєфіц.и емісії квантифікації. Вразі  $\text{VHe}$ 

Многоликий спектр в обл. 2200-2600 Å полугет в полоні кайде  
 в присутії КФ. Вразі акалію показав, що це прогресив  $v^{-1} = \text{const}$   
 $\Sigma - \Sigma$  переходу, вероятно сиклічного. Еміттер не квантифікований.

Анализ полые 0-0, 0-1, 0-2, 0-3, 0-4. Колебат. Отнесение некаждому, возможно 0-0 лежит дальше в коротковол. сторону, где негубит. пластики

$$Bv'' = 12,383, -0.648, (v'' + \frac{1}{2}) - 0.0369 (v'' + \frac{1}{2})^2$$

$$Yv'' = 2203,4 (v'' + \frac{1}{2}) - 72.5, (v'' + \frac{1}{2})^2 - 2.8 (v'' + \frac{1}{2})^3$$

$$B_0' = 4.016_6; D_0 = 1.89_6 \cdot 10^{-4}; H_0 = 4,2 \cdot 10^{-9} \quad \omega \approx 1170 \text{ с}^{-1}$$

$$Y_{00} = 46399.4 \text{ см}^{-1}$$

$B''$ -огень велико  $\rightarrow$  д.б. ширин элемент 1 ряда период. смел. М.б. НТ или НТ  
однако трудностей возбужд. и изменение спектра после нескольких энергетических  
повышению, свис о том, что эмиттер приемл как загрязнение

По швейной жер.  $D_0'' \approx 10900 \text{ см}^{-1} = 31.1 \text{ kcal}$ . Верх. согт ищет гораздо  
меньшую энергию коней, тем ниже, и уровни  $v'=0$  не м.б. далее от края  
диссоц. 2 жер. согт. повышению диссоц. давал атом продукт в разных  
состояниях возбужд. с разностью жер.  $\approx 46000 \text{ см}^{-1} (Y_{00} - D_0'' + F'(30))$ ,  
это повышению иском. НН и НТ как возбужд. эмиттер, если не влиять  
очень высокие согт. атом. согт.

КМ

Ф. И. Шеррин 1956  
ВАН СССР 110, 549, 1956

Александрович Шершев  
и Ольга Свирей Мачуз





OMM. 1303

1962

LiH, NaH, KH, ZnH, CdH, HgH,  
CuF, AgH(D<sub>0</sub>)  
TiO, VO, BaO, CeO, CeF(D<sub>0</sub>)

B9-VI-3806.

B9-II-1532

Lalid B.B. |

Indian J. Phys., 1962, 36, N12, 639-49

On the relation between dissociation  
energy and molecular constants.

RF., 1963, 12D90 J

Est/orig.

1963

K H

Fain D.C., Sak P.

номера  
проб

J. Chem. Phys., 38: 1553-7.

(ср. Li H)

Potential - energy curves of  
the excited states of alkali  
hydride molecules.

NSA-1963-17-17.

ВХ - X3779

Вес Н!

1963

Li, Na, K, Mg, Cu

(Wi, мюридн)

Михеева В.И., Мальцева Н.Н.

Ж. структурн. химии, 1963, 4, № 5,  
698-702

Инфракрасные спектры поглощения...

J  
РХ, 1964, 76219

orig.

1963

Исследования КН  
установлено  
М. Гайдаров

Исследования

Исследования

Alkali hydride molecules: potential energy curves and the nature of their binding. Yatendra Pal Varshni (Natl. Res. Council, Ottawa, Can.) and Ramesh Chandra Shukla. *Rev. Mod. Phys.* 35, 130-44(1963). A review with 81 references.

CA

ан. г-у  
по физ. асп.  
и

C. A. 1963-58-10

9642 d

ан. г. и

LiH, NaH; KH; RbH; CsH  
(распр. мон. нот)

1965  
X 4435

Gussli, Saxena S.C., Indian  
J. Pure and Appl. Phys., 1965,  
3, N12, 494-95

ЕСТЬ Ф. Н.

РХ 1964.

10

КН,  
КД

ВФ 3744-X

1966

504

9 Д191. Переход  $A^1\Sigma - X^1\Sigma$  молекул  $^{39}\text{КН}$  и  $^{39}\text{КД}$ .  
Колебательный анализ и молекулярные постоянные.  
Bartky Ian R. The  $A^1\Sigma - X^1\Sigma$  transition of  $^{39}\text{КН}$  and  
 $^{39}\text{КД}$ . Vibrational numbering and molecular constants.  
«J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 4, 299—311 (англ.)

спектр КД,  
пол. пост.

Получен спектр поглощения молекул КД в области 5100—5200 Å. Указано, что согласно результатам Герцберга интерпретация спектров КН и КД в ранних работах (Herzberg G. Spectra of Diatomic Molecules 2nd ed., Van Nostrand, Princeton, New Jersey, 1950) была ошибочной. Для исправления предложено полученные ранее колебательные квантовые числа  $v^1$  состояния  $A^1\Sigma$  молекул КД увеличить на 3, а квантовые числа  $J$  для  $P$ - и  $R$ -ветвей уменьшить на 1; колебательные квантовые числа  $v^1$  для КН увеличить на 2. Приведены колебательные и вращательные постоянные молекул КН и КД в состояниях  $A^1\Sigma$  и  $X^1\Sigma$ . Библ. 10.

А. Беляева

Ф. 1967. 9Д

KH  
KD

BP 3744-X

1966

504

6775u  $A^1\Sigma-X^1\Sigma$  transition of  $^{39}\text{KH}$  and  $^{39}\text{KD}$ . Vibrational numbering and molecular constants. Ian R. Bartky (Inst. for Basic Stds., Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Mol. Spectrosc.* 20(4), 299-311(1966)(Eng). The absorption spectrum of KD has been observed, 5100-5200 Å. The previous assignments of the KD and KH spectra are in error. The  $v^{\wedge}$ -numbering of KD must be increased by 3, and the  $J$ -numbering of the  $P$  and  $R$  branches must be decreased by 1; the  $v'$ -numbering of KH must be increased by 2. Reanalysis of the existing data on KH and KD has given a consistent set of vibrational and rotational consts. for the states of these mols. RCKP

C.A. 1967.66.2

KH

A-576

1966

Hussain Z.,  
Can. J. Phys., 1966, 44.,  
N4, 917-19.

(we)



X - 3982

1968

Галогениды и галогениды щелочных металлов. (Француз. и колеб. поем.)

MH, MF, MCl, MBr, MJ, где M = Li, Na, K, Rb, Cs.

Есть о. н.

Dass L., Saxena S.C.

Indian J. Pure Appl. Phys., 1968,  
6 (2), 102-104

CA, 1968, 69, с 4, 13066a

10.

KH

1968

A-1301

SZOKE S., et al.

Acta Chim. (Budapest), 1968,  
57, (2), 129-40.

Cuob.  
no. 11.  
M. N.

X-6102

1968

M. Noz, De (papers:  $\text{Li}_2$ ,  $\text{Na}_2$ ,  $\text{K}_2$ ,  
 $\text{LiH}$ ,  $\text{NaH}$ ,  $\text{KH}$ )

Szasz L., McGinn G.

J. Chem. Phys., 1968, 48, 47, 2997-3008 (uncy)

Atomic and molecular calculations with  
the pseudopotential method. III The theory  
of  $\text{Li}_2$ ,  $\text{K}_2$ ,  $\text{Na}_2$ ,  $\text{NaH}$ ,  $\text{LiH}$  and  $\text{KH}$ .  
Preseuer, 1968, 1536. W (92)

$\lambda_2$ ;  $\chi_H$  ( $\Sigma$  -  $\Sigma$  расщепл.) A-1435

$\chi$  - меновн.  
метод.

расчет

1969

Кноок Н.О., Pudge M. R. H.,  
Molecular. Phys., 1969, 17(4),  
377-380

ENG. COPY

10

9

ca  
1969

$\text{LiH}, \text{LiH}, \text{NH}$  (ib. uex. pærem) 10, 15 1970  
Silver D. M., Mehler E. A., Ruedenberg;  
J. Chem. Phys., 1970, 52, N° 3, 1174-80 (ann.)  
X 4895

Electron correlation and separated pair approximation in diatomic molecules.

10

VO

CA, 1970, 72, N° 6, 83114a

KH  
2086

Docken K.K., Hinze J.

1972

u. n.  
Mendelsohn

J. Chem. Phys., 1972, 57, 4928  
—, p.

2

KH  
u. n.



30405.8150

Смещение 4-144

Ph, TE, Ch

КН

34469

1972

БФ-7666-X  
Sarkar A.K. Calculation of certain  
physical parameters of alkali hydride  
molecules using model potential  
functions. "Indian J. Pure and Appl.  
Phys.", 1972, 10, N 9, 666-668

(англ.)

836 837

0047 ПИЖ  
ВИНИТИ

Cu H; Ag H; Au H; Zn H<sup>+</sup>; Cd H<sup>+</sup>; Cd H<sup>+</sup> 1973  
Hg H<sup>+</sup>; Na H; KH; Rb H; Cs H; illg H<sup>+</sup>;  
Ca H<sup>+</sup>; Sr H<sup>+</sup>; Ba H<sup>+</sup>; Ra H<sup>+</sup> (D, ze, patw)

Gáspar R., Tamásy. Lentei I.,  
1973, 33, N 3-4, 387-98

ppp 73

W

(9)



1973

MH; M $\emptyset$ ; MX; HX;  $\emptyset$ X; TX;

M = Li, Na, K, Rb, Cs; Al,  
Ga, In, Tl;

X = F, Cl, Br, I;

(M. N.,  
таблицы ~~А-2091~~  
~~А-2091~~ А-2091)

Miller C.E., Finney A.A., Inman F.W.,  
St. Data, 1973, 5, N1, 1-49 (англ.)

Rotational and hyperfine structure  
constants for Groups IA and  
IIIA monohalide and monohy-  
dride molecules.

10  $\textcircled{\Phi}$  (ср. опускулар) CA, 1973, 78, N22, 141873j

КН

Отт. А-2823

1974

Абраменков и др.

(и.п.)

Редкол. эс. огу. и.п.

1974, М. Атсея.

1979

К штриху

метод расчета  
расщепления

Spice v.  
 J. Mol. Phys., 1974,  
 27, (3), 155-175

● (av H<sub>2</sub>; III)

КН

оттиск 2071

ВФ 8474-X

1974

8 Д921. Флуоресценция молекулы КН. Cruse Jennifer A., Zate Richard N. Fluorescence of the КН molecule. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 3, 1182 (англ.)

Получен спектр флуоресценции КН при возбуждении линией 4880 Å аргонового лазера. Описаны основные особенности спектра. С помощью перестраиваемого лазера на красителях получен спектр возбуждения флуоресценции КН в областях 4400—4700 и 4800—4930 Å. Проведено отождествление спектра возбуждения в области 4810—4865 Å. Библ. 6. Резюме

Спектр

Ф. 1974. № 8

KH

отучен 2071.

1974

126458a Fluorescence of the potassium hydride molecule. Cruse, Jennifer A.; Zare, Richard N. (Dep. Chem., Columbia Univ., New York, N.Y.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(3), 1182 (Eng). Fluorescence of KH was studied with a pulsed tunable dye laser and with various lines of a continuous-wave Ar ion laser for excitation. With the 4880 Å line of the Ar laser, fluorescence was excited in the  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  system corresponding to the ( $v'' = 0, J'' = 5$ )  $\rightarrow$  ( $v' = 7, J' = 6$ ) transition. The (7,0), (7,1), (7,2), and (7,4) O and R doublets were obsd. The 4965 Å laser line produced weak fluorescence; other Ar lines did not excite KH. The excitation spectrum in the regions 4400-700° and 4800-930 Å are given. The lifetime of the KH  $A^1\Sigma^+$  state is <10 nsec.

(M.H.)

лазер возб.

присоедин.

C.A. 1974.80 N22

КН

оттиск 2071

1974

ЗОР 8474-X

18 B157. Флуоресценция молекулы КН. Cruse Jennifer A., Zare Richard N. Fluorescence of the КН molecule. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 3, 1182 (англ.)

Исследован спектр флуоресценции молекулы КН в области 4800—4870А, возбужденный перестраиваемым лазером на красителе и Ag<sup>+</sup>-лазером. Идентифицированы вращательные линии полос (8,0) — (13,0) системы A<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> — X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> КН, расположенные в исследуемой области. По временной зависимости флуоресценции оценен верхний предел времени жизни (10 нсек) состояния A<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>.

М. Р. Алиев

М.И.

Х. 1974. N 18

KH

Numrich Robert W. 1974

(эл. конфигурац) Diss. Abstr. Int  
B 1975, 35(12 pt 1)  
5837

(см На Н; III)

1975

paper w.n., J (NaK, NaRb, NaCs,  
KRb, KCs, RbCs, NaH, KH, RbH,  
CsH, CuH, AgH, AuH) X-9489

011111, 3323

Gáspár R, Tamássy-Lentei I,  
Acta phys. Acad. sci. hung, 1975, 38, 11,  
3-13 (a.u.u.).

molecular pseudopotential calculations.  
I Determination of the ionization potenti-  
als and equilibrium internuclear dis-  
tances for the diatomic heteronuclear alkali  
metal, alkali metal, metal, alkali metal,  
hydride and noble | 10 (p) 15

Puk~~u~~3, 1976, 12139



60108.8535

Ch, TC

KH 41197

(по теме. ЗИЛ 7.)

1975

45-11165

Numrich Robert W., Truhlar Donald G.  
 Mixing of ionic and covalent configurations for  $\text{NaH}$ ,  $\text{KH}$ , and  $\text{MgH}^+$ . Potential energy curves and couplings between molecular states. "J. Phys. Chem.", 1975, 79, N25, 2745-2766 (англ.) 0535 ПАК

509 511

5

7 (см. Кат. III) ВИНТИ

KH Ommuse 5445 1975

Part U.R.

(80) Indian J. Chem. 1977,  
A15, 33-34.

Binding Energy...

50814.4527

TC, Ch, Ph

316013 номеру  
нарач.

КН WeXe

1975

ЖУ-9684

Patel M.M., Gohel V.B. Potential energy  
functions for alkali-hydride molecules.

"Spectrochim. acta", 1975, A31, N 7,

855-859

(англ.)

0433 ПИК

396 398

0425

ВИНИТИ

KH  
4112

1975  
Saehs E.S., Kinze J., Sabelli N.H

u.n.  
Mendel

J. Chem. Phys., 1975, 62, 3367  
p.

3

KH

u.n.



KH

Thakur K. P. et. al. 1975

Indian J. Pure Appl

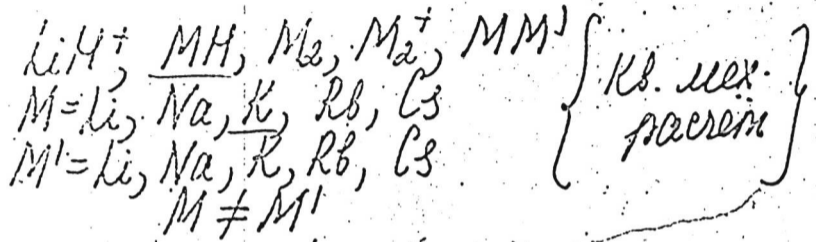
Phys 1975, 13(10) 717-18 (eng)

no memos.  
gp-1521-8

(see Li H; III)

BX-483

1976



Boeyens & C.A., Lemmer R.H.,  
 J. S. Agr. Chem. Inst. 1976, 29(2-3), 120-31  
 A valence-bond study of dialkalis and  
 alkali hydrides.

C.A. 1977, 86, N20, 146280P

HO  $\oplus$  24

60407.7205  
Ch, Ph, TC

40892  
КН (кв. илх. факт)

1976  
4200

Janev R.K.

On the long-range configuration  
interaction between ionic and covalent  
states.

"J. Chem. Phys.", 1976, 64, N 5, 1891-1894  
(англ.)

0595 ЛМК

571 574 5 2 7

ВИНИТИ

ВРР-IX - 5306

1976

расшир. лин, до, упр. аар. (L<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>, L<sub>2</sub>, L<sub>1</sub>M,  
K<sub>1</sub>M, KM, M<sub>1</sub>gH<sup>+</sup>, CaH<sup>+</sup>, L<sub>1</sub>Na, L<sub>1</sub>K, NaK,  
M<sub>2</sub>Li<sup>+</sup>, M<sub>2</sub>K<sup>+</sup>, M<sub>2</sub>Wa<sup>+</sup>, L<sub>1</sub>Na<sup>+</sup>, Na<sub>2</sub>Li<sup>+</sup>, Li<sub>3</sub><sup>+</sup>, Na<sub>3</sub><sup>+</sup>,  
L<sub>2</sub>M<sup>+</sup>, Na<sub>2</sub>M<sup>+</sup>)

Ray N.K.; Switalski J.

Theor. chim acta, 1976, 41, 4, 329-333

Atomic Spherical Gaussian orbital  
(ASGO) studies with a model potential;  
application to two valence electron  
systems

Proc. pub. 1977, 2.2.13y

systems NO (9)



60420.8550

Ch, Ph, TC

40604

КН (и.и.)

1976

4230

Sannigrahi A.B., Mohammad S. Noor.

On the applicability of the selected valence electron split-shell model to ionic molecules. "Int. J. Quantum Chem.", 1976, 10, N 1, 181-184 (англ.)

0807

578 582

599

ВИНИТИ

КН

\*45-13175

ч.п., геометр. молекул

с. 1976, 18

18 Б34. Расчеты методом ПСГО геометрии и электронного строения гидридов элементов третьего периода, имеющих «аргоновый остов». Talaty Erach R., Fearey Alan J., Simons Gary. FSGO calculations of geometries and electronic structures of «argon-core» third-row hydrides. «Theor. chim. acta», 1976, 41, № 2, 133—139 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода МО ЛКАО ССП с использованием базиса, плавающих сферич. гауссовых орбиталей (ПСГО) выполнены расчеты электронного строения низших синглетных состояний ряда одно-, двух-, и многоатомных гидридов элементов 3-го периода, имеющих «аргоновый остов» (КН, CaH<sub>2</sub>, ScH, ScH<sub>3</sub>, VN<sub>3</sub>, CrH<sub>2</sub> и MnH). Проведена также оптимизация валентных углов и длин связей. Для всех молекул были оптимизированы экспоненты остовных (K-, L- и M-оболочек) и валентных орбиталей. Найдено, что те и другие экспоненты в исследованном ряду молекул монотонно увеличиваются с увеличением заряда ядра центрального атома. При этом экспоненты остовных орбиталей атомов мало зависят от их окружения (для молекул ScH и ScH<sub>3</sub> практически совпадают). Это означает, что в расчетах сложных молекул можно с достаточной точ-

1976

И-0625-491

⊗

⊕

ностью использовать приближенные замороженного осто-  
ва. Найденные в результате расчета плавающие сферич.  
гауссовы орбитали для всех молекул были затем преоб-  
разованы к обычным МО, и орбитальные энергии со-  
поставлены (для Ag и ScH<sub>3</sub>) с данными неэмпирич. рас-  
четов МО ЛКАО ССП с достаточно большими базисны-  
ми наборами АО, центрированных на ядрах атомов.  
Последовательность остовных МО в обоих расчетах  
совпадает, но колич. соответствие (особенно для элект-  
тронов М-оболочки) неудовлетворительно. При этом  
воспроизводятся в расчете методом ПСГО энергии 3s-  
орбиталей значительно хуже, чем энергии 3p-орбита-  
лей. Последовательность двух валентных орбиталей  
ScH<sub>3</sub> обратна полученной в неэмпирич. расчете МО  
ЛКАО. Рассчитанные полные энергии составляют ~85%  
хартри-фоковских значений. По данным расчета в ба-  
зисе ПСГО молекула ScH<sub>3</sub> должна быть неустойчивой  
по отношению к распаду на ScH и H<sub>2</sub> (молекула ScH<sub>3</sub>  
в отличие от ScH, в газ. состоянии до настоящего вре-  
мени не обнаружена). Для всех рассмотренных моле-  
кул приведены и обсуждены равновесные углы и рас-  
стояния, для несимм. молекул и дипольные моменты.  
Для молекулы KN эксперим. и теор. значения межъ-  
ядерного расстояния различаются не более, чем на  
1,5%. Как и предполагалось ранее, CaH<sub>2</sub> оказалась ли-  
нейной, ScH<sub>3</sub> — плоской, TiH<sub>4</sub> — тетраэдрич. Валентные  
углы в VH<sub>3</sub>(C<sub>3v</sub>) и CrH<sub>2</sub>(C<sub>2v</sub>) оказались неожиданно  
большими (94,1° и 103,1°, соотв.) по сравнению с ана-  
логичными гидридами переходных элементов 3-го пе-  
риода PH<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>S. Отклонения дипольных моментов от  
хартри-фоковских значений составляют ~1 D.

Н. М. Клименко

#4-13175

1976

KH

XI-0625-84  
[89-5290-84]

84: 185161d FSGO calculations of geometries and electronic structures of "argon-core" third-row hydrides. Talaty, Erach R.; Fearey, Alan J.; Simons, Gary (Dep. Chem., Wichita State Univ., Wichita, Kans.). *Theor. Chim. Acta* 1976, 41(2), 133-9 (Eng). A series of ab initio calens. using the FSGO method and including geometry optimizations are reported for the lowest singlet states of KH, CaH<sub>2</sub>, ScH, ScH<sub>3</sub>, TiH<sub>4</sub>, VH<sub>3</sub>, CrH<sub>2</sub>, and MnH. Both core and valence orbital exponents vary

systematically. The description of the M-shell electrons is uneven, in that p orbitals are more accurately described than the 3s orbital. The bond angles of VH<sub>3</sub> and CrH<sub>2</sub> are predicted to be unexpectedly large (94.1° and 103.1°, resp.). Orbital energies, bond lengths and angles, dipole moments, and electron populations are reported for all systems.

rb. acc.  
packets  
copies

(7)

X

C.A. 1976, 84 N26

139-5290-IX

1976

КН

10 Д81. ПСГО-расчеты геометрии и электронной структуры гидридов элементов четвертого периода с остовом типа Ar. Talaty Erach R., Fearey Alan J., Simons Gary. FSGO calculations of geometries and electronic structures of «argon-core» third-row hydrides. «Theor. chim. acta», 1976, 41, № 2, 133—139 (англ.)

Кв. мет.  
расчет  
геометр.  
эл. структ.

Выполнены неэмпирич. расчеты электронной структуры и равновесной геометрии молекул  $\text{KH}$ ,  $\text{CaH}_2$ ,  $\text{ScH}$ ,  $\text{ScH}_3$ ,  $\text{TiH}_4$ ,  $\text{VH}_3$ ,  $\text{CrH}_2$  и  $\text{MnH}$ , имеющих внутреннюю электронную оболочку типа Ar. В расчете использован метод плавающих сферических гауссовых орбиталей (ПСГО). Для всех молекул приведены расчетные значения равновесных геометрич. параметров, дипольные моменты и проведен анализ заселенностей. Сравнение полученных в приближении ПСГО результатов с результатами более точных расчетов показывает, что использованный метод дает полуколичеств. оценки для молекулярных постоянных.

А. Дементьев

(+7) X

ф. 1976 N 10

70301.8413

Ch, Ph, MGU, TC

КН

30526GR

1976

\* 9-1714

Watson D.K., Stewart R.F., Dalgarno  
A. Variational time-dependent Hartree-  
Fock calculations a pseudopotential stu-  
dy of the alkali metal hydrides.

"Mol. Phys.", 1976, 32, N 6, 1661-1670

(англ.) (см. Лит.; III)

0821 БИЖ

784 785

8 2 10

ВИНИТИ



B̄X-1060

1977  
T

H<sub>2</sub>, Li<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>, LiNa, LiH, NaH,  
KH, H<sub>3</sub>, Li<sub>3</sub>, Na<sub>3</sub>, HLi<sub>2</sub> (кв. эк. пар)  
Heller G.,

Wiss. Z. - Friedrich-Schiller-Universität  
Jena, Math.-Naturwiss. Reihe  
1974, 26 (4-5), 677-88

Quantum chem. model studies.  
C.A. 1978, 88, N16, 110823 V 10 (4)

KH

сумма 5475  
Pant Uma Rani.

1977

"Indian J. Chem., Sect. A.",  
1977, 15A(1), 33-4.

20



(see. list) III



LiH, NaH, KH, Y (Do, u.m.) 1977  
RBH, CSH BX-962

Uma Rani Pant,

Indian J. Chem., 1977, A15, n.1,  
33-34 (over.)

Binding energy of hydrides of  
Li, Na, K, Rb and Cs.

Y project

Прислано, 1978, 1516 10

Ⓟ

KH

Сммуен 6077

1948

Nunrich Robert W, et al

номени.  
крупне  
везуног.  
содина.

J. Phys. Chem. 1948, 52,  
No. 168-176 (англ)

Рассчитана нотация. крупне  $A^1\Sigma^+$  еседе сина.

Наш и KH,



суд. Na H - III

BX-1412

1978

LiH, NaH, KH, RbH, CsH, MgH<sup>+</sup>, CaH<sup>+</sup>,  
 NaLi, KLi, KNa, RbLi, CsLi, RbNa, CsNa,  
 M<sub>2</sub> (M=Li, Na, K, Rb, Cs) (Ze, Ke),  
 H<sub>2</sub>Li<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>Na<sup>+</sup>, Li<sub>2</sub>Na<sup>+</sup>, Na<sub>2</sub>Li<sup>+</sup>, Li<sub>3</sub><sup>+</sup>, Na<sub>3</sub><sup>+</sup>,  
 Li<sub>2</sub>H<sup>+</sup>, Na<sub>2</sub>H<sup>+</sup> (комплекс)

Ray N.K., Mehandree S.P.,  
 Pramana, 1978, 10(2), 201-6.

Use of atomic Fues  
 the floating

potential within  
 spherical gaussian...

C.A. 1978, 29, N8, 65650u

10



DM. 6611

КН<sup>+</sup>

ТД-КСИ ДВВ  
1457-ВХ

расеян  
на катионах  
группы  
щелоч. до

(+3)

☒

2.1978, N22

22 Б9. Расчеты  $\text{NaH}^+$ ,  $\text{KH}^+$ ,  $\text{RbH}^+$  и  $\text{CsH}^+$  методом псевдопотенциала. Valance A. Pseudopotential calculations for  $\text{NaH}^+$ ,  $\text{KH}^+$ ,  $\text{PbH}^+$  and  $\text{CsH}^+$ . «Chem. Phys. Lett.», 1978, 56, № 2, 289—294 (англ.)

В области значений межъядерного расстояния от 5 до 25 ат. ед. рассчитаны потенциальные кривые  $\Sigma$ -состояний молек. ионов  $\text{NaH}^+$ ,  $\text{KH}^+$ ,  $\text{RbH}^+$  и  $\text{CsH}^+$ , соответствующие первым четырем диссоциац. пределам. Вычисления проведены для одноэлектронной модели ионов  $\text{MH}^+$  с введением псевдопотенциала типа Гельмана для описания взаимодействия электронного остова  $\text{M}^+$  с валентным электроном. Волновые функции молек. ионов построены в приближении ЛКАО. Показано, что основные состояния всех исследованных систем являются слабо связанными. Найденные значения энергии диссоциации и равновесного межъядерного расстояния для ионов  $\text{NaH}^+$  и  $\text{CsH}^+$  согласуются с известными оценками. Результаты, полученные для системы  $\text{CsH}^+$ , хорошо объясняют эксперим. данные по упругому рассеянию протонов на атомах цезия в области радужного угла. Сделано заключение о пригодности использованной простой в вычислительном отношении модели для расчетов х-к упругого и неупругого рассеяния в данных системах.

А. В. Немухин

1978  
5959  
Сттисч 6465

КН.

Оммука 8789 1979.

Bogawale S. R. et al.

(До, номери.)  
Кривка)

Chem. Phys. Lett., 1979,  
64 (2, 3), 544-46.

KUT

Commen 806P

1979

KH

Melius C.F.; et al.

papers  
referred  
numbers.  
they were

J. Phys. Chem., 1979,  
83 (9), 7221-27

КН

1979

Мельник А.В. и др.

"Котур. по методу  
Амалов и Мельник.

Вулканист, 1979. № 2.  
год. "У. 2"

Вулканист, 1979, 44.



(с. № 2 + III)

судебн  
номер  
клубок

KH<sup>+</sup>

1980

Nemukhina A.V., et al

Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2:  
Khim., 1980, 21(1), 18-21.

Кв. экз.  
паarem

(see LIT<sup>+</sup>; III)



КН<sup>+</sup>

1979

Немухин А.В. и др.

« Конгр. по теории  
атомов и молекул.  
Вильнюс, 1979, Мез.  
гокл. 2 2 »

Вильнюс, 1979, 74

(см. Наг<sup>+</sup> i iii)

Литература  
по теме,  
и др.

KH

ammun 8901

1979

KD

Ohwada K.

Uchi Kof.

Spectrochim. acta,  
1979, 35, 1553-57.

опт. физ. 10866

1980

КН

КД

(М.И.)



6 Д640. Спектроскопия основного состояния  $X^1\Sigma^+$  молекул  $\text{NaH}$ ,  $\text{NaD}$ ,  $\text{KH}$  и  $\text{KD}$  с использованием возбуждаемой лазером флуоресценции в высокочастотном разряде. Spectroscopy of the  $\text{NaH}$ ,  $\text{NaD}$ ,  $\text{KH}$ , and  $\text{KD}$   $X^1\Sigma^+$  ground state by laser excited fluorescence in a high frequency discharge. Giroud Marc, Nedelec O. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 9, 4151—4155 (англ.)

С использованием перестраиваемого лазера на красном теле получены спектры флуоресценции молекул  $\text{NaH}$  (I),  $\text{NaD}$  (II),  $\text{KH}$  (III) и  $\text{KD}$  (IV). Молекулы I—IV получали в СВЧ-разряде. В спектрах зарегистрированы переходы на уровни до  $v''=15, 20, 14$  и  $16$  для I—IV соответственно. Определены спектроскопич. постоянные и потенциал РКР для основного состояния  $X^1\Sigma^+$ . Полученные для I и II результаты сопоставлены с данными неэмпирич. расчетов. Библ. 19. В. А. Е.

М.И.

оп. 1981. № 6

1980

КН

Jiang Feng-Lin, et al.

молекуляр.  
структ.  
оценка  
раств

Ts'ui Hua Hsueh Pao,  
1980, 1 (1), 65-72

КНТ

И - 10445

1980

М.И

Александров А.В.  
Синицкиев Н.Ф.

Вестн. МГУ, Математика,  
1980, 21, №1, 18-21

KIT

[Lammchen 9187]

1980

Olson R.E., et al.

$E_i, R_e^-$   
 $1, D_e^-$   
nomeris.  
Meyum

J. Phys. B: Atom. and  
Mol. Phys., 1980, 13,  
297-308.


Potential energies and...

КН

расчет  
равнов.  
геометрии

1 Д96. Исследование свойств неорганических и металлоорганических соединений методом молекулярных орбиталей. 1. Базисные наборы ОСТ-НГФ для элементов главных подгрупп четвертого периода. Molecular orbital theory of the properties of inorganic and organometallic compounds. 1. STO-NG basis sets for third-row main-group elements. Pietro William J., Levi Beverly A., Hehre Warren J., Stewart Robert F. «Inorg. Chem.», 1980, 19, № 8, 2225—2229 (англ.)

Для К, Са, Ga, Ge, As, Se, Br, Кг рассчитаны экспоненты и коэф. базиса ОСТ-3ГФ для расчетов неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО. С полученным базисом рассчитана равновесная геометрия КН, GeH<sub>4</sub>, AsH<sub>3</sub>, SeH<sub>2</sub>, HBr, KCN, KOH, CaF<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>GeCH<sub>3</sub>, H<sub>3</sub>GeCl, H<sub>2</sub>GeF, H<sub>2</sub>GeCN, H<sub>3</sub>GeGeH<sub>3</sub>, H<sub>3</sub>GeBr, AsF<sub>3</sub>, H<sub>3</sub>CSeH, OCSe, LiBr, CH<sub>3</sub>Br, BrF, H<sub>3</sub>SiBr и Br<sub>2</sub>. Обнаружено, что валентные углы передаются хорошо, а для длин связей согласно может считаться приемлемым, причем для связей между двумя атомами 4-го периода согласно удовлетворительное. Сравнение с данными расчетов в базисе ОСТ-2ГФ показало, что последний приводит к заметно худшим результатам. В. Л. Лебедев

(714) 

Ф. 1981 и 1

10437  
См. см.

Оттиск 10739

1980

КН

7 Д98. Кривые РКР-потенциалов для состояний  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+$  молекулы КН. The RKR potential energy curves for the  $X^1\Sigma^+$  and  $A^1\Sigma^+$  states of КН

Yang S. C., Hsieh Y. K., Verma K. K., Stwalley W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 304—310 (англ.)

На основе известных спектроскопич. постоянных для состояний  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+$  молекул КН и КD найдены их комбинированные значения, учитывающие разную приведенную массу этих молекул. Кратко обсуждается методика получения взвешенных по изотопному составу постоянных, а также типичные погрешности аппроксимации эксперим. величин  $B_v$  и  $G(v)$  с помощью да-нэмовских разложений. На основе найденных спектроскопич. постоянных определены точки поворота для потенциалов Ридберга — Клейна — Риса молекулы КН в состояниях  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+$ . Построены искомые потенц. кривые для значений  $v'' \leq 4$  ( $X^1\Sigma^+$ ) и  $v' \leq 26$  ( $A^1\Sigma^+$ )

А. А. Радциг

М.И.

Ф. 1981.107



КН

КД

10739 1980

10 Б118. Кривые потенциальной энергии, рассчитанные методом Ридберга — Клейна — Риса для состояний  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+$  КН. Yang S.-C., Hsieh Y. The RKR potential energy curves for the  $X^1\Sigma^+$  and  $A^1\Sigma^+$  states of КН. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 304—310 (англ.)

Обсуждены методы получения улучшенных спектроскопич. постоянных, являющихся изотопически усредненными постоянными. С использованием изотопически скомбинированных спектроскопич. постоянных молекул КН/КД в рамках метода Ридберга — Клейна — Риса (РКР) вычислены точки возврата для колебательных квантовых чисел  $v''=0-4$  (состояние  $X^1\Sigma^+$ ) и  $v''=0-26$  (состояние  $A^1\Sigma^+$ ) и построены соответствующие потенциальные кривые. Значения спектроскопич. постоянных  $Y_{00}$ ,  $G(0)$  и ЭНК, где  $Y_{00}$  — поправка Данхэма, ЭНК-энергия нулевых колебаний и  $ЭНК = G(0) + Y_{00}$ .

М. П.  
Кривые  
потенциальной  
энергии

Л. 1981. N 10

составили 0,22; 488,9 и 489,12  $\text{см}^{-1}$  соотв. для состояния  $A^1\Sigma^+$  и 2,05; 113,12 и 115,17  $\text{см}^{-1}$  соотв. для состояния  $A^1\Sigma^+$  молекулы КН. Соотв-щие постоянные в молекуле КD составили 0,11; 350,92; 351,03  $\text{см}^{-1}$  для состояния  $X^1\Sigma^+$  и 1,05; 80,67; 81,72  $\text{см}^{-1}$  для состояния  $A^1\Sigma^+$ . С использованием полученных спектроскопич. постоянных вычислены значения энергий переходов  $X^1\Sigma^+ - A^1\Sigma^+$ , составившие  $\nu_{00}(\text{КН}) = 18683 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{00}(\text{КD}) = 18788 \text{ см}^{-1}$  и  $\nu_e = 19057 \text{ см}^{-1}$ . И. А. Тополь

KH

ommueu 10739

1980

KD

✓ 93: 212672r The RKR potential energy curves for the  $X^1\Sigma^+$  and  $A^1\Sigma^+$  states of potassium hydride. Yang, S. C.; Hsieh, Y. K.; Verma, K. K.; Stwalley, W. C. (Dep. Chem., Natl. Taiwan Univ., Taipei, Taiwan). *J. Mol. Spectrosc.* 1980, 83(2), 304-16 (Eng). New isotopically combined spectroscopic consts. were obtained for the  $X^1\Sigma^+$  and  $A^1\Sigma^+$  states of KH/KD. These consts. were used to construct new isotopically combined Rydberg-Klein-Rees (RKR) potential energy curves up to  $v = 4$  of the  $X^1\Sigma^+$  state and up to  $v = 26$  of the  $A^1\Sigma^+$  state.

no mems,  
9-448

C.A. 1980, 93 v 22

КН

1981

8 Д221. Неэмпирическое исследование электронно-неупругого столкновения  $K+H$  с использованием метода прямого интегрирования для решения уравнений приближения связанных состояний в электронно-адиабатическом представлении. Ab initio treatment of electronically inelastic  $K+H$  collisions using a direct integration method for the solution of the coupled-channel scattering equations in electronically adiabatic representations. Garrett Bruce C., Redmon Michael J., Truhlar Donald G., Melius Carl F. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 1, 412—424 (англ.)

В одноэлектронном неэмпирич. приближении псевдопотенциала рассчитаны адиабатич. потенци. кривые и матричные элементы неадиабатич. связи в области их квазипересечения для электронных состояний  $X$ ,  $A$  и  $C^1\Sigma^+$  квазимолекулы КН. Найденные расщепления кривых  $X$  и  $A$  в области квазипересечения хорошо согласуются с экспериментальными. Полученные результаты были использованы для расчета сечений неадиабатич. переходов при малых энергиях в системе  $K+H$ . Соот-

кв. мех.  
расчет  
потенци.  
кривые

Ф. 1981 № 8

ветствующая система ур-ний приближения связанных состояний решалась методом определения эволюции  $R$ -матрицы в адиабатич. базисе. Эта эволюция определялась с использованием разбиения радиальной координаты на секторы, определения решения в приближении Магнуса в каждом секторе и последующей сшивки решений в секторах на их границах. Метод расчета подробно описан, исследованы его свойства и эффективность. Найдено, что он удобен для конкретных расчетов и обеспечивает быструю сходимость результатов. Расчет этим методом сечений для системы КН показал, что величина их зависит от способа моделирования остова  $\text{KN}^+$ , но слабо изменяется при варьировании высших производных неадиабатич. взаимодействия. Показано, что при энергии столкновения 0,022 эв сечение

тушения  $4^2P \rightarrow 4^2S$  составляет  $(2-4) \cdot 10^{-4} a_0^2$ , а при энергии 1,1 эв увеличивается до  $(8-10) \cdot 10^{-4} a_0^2$ .

А. И. Ш.

1981

KH

94:71849k Ab initio treatment of electronically inelastic atomic potassium + atomic hydrogen collisions using a direct integration method for the solution of the coupled-channel scattering equations in electronically adiabatic representations. Garrett, Bruce C.; Redmon, Michael J.

Кв. мех.  
фактум

С. 4. на 20 стр.

©. A. 1981 94:71849k

Truhlar, Donald G.; Melius, Carl F. (Chem. Phys. Sect., Battelle Columbus Lab., Columbus, OH 43201 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(1), 412-24 (Eng). The adiabatic potential-energy curves and nonadiabatic first-deriv. couplings for the  $X$ ,  $A$ , and  $C^1\Sigma^+$  states of  $KH$  were calcd. with an ab-initio one-electron pseudopotential formalism. The splitting of the  $X$  and  $A$  curves at the avoided crossings is in good agreement with expt. The ab-initio results were used to calc. the electronically inelastic transition probabilities and cross sections for  $K + H$  collisions at low energies by  $R$ -matrix propagation in the adiabatic representation with exponential sector transformations. Since this method has never been applied before, a study was made of its convergence properties and efficiency. The cross sections are changed by about a factor of 2 when the potential curves are changed by a different treatment of the  $KH^+$  core, but only by about 1% when the assumptions about the nonadiabatic second-deriv. coupling terms are altered. The calcd.  $4^2P \rightarrow 4^2S$  quenching cross section at 0.022 eV relative translational energy is  $(2-4) \times 10^{-4} a_0^2$ . This increases to  $(8-10) \times 10^{-4} a_0^2$  at 1.1 eV. The emphasis in this article is on testing and evaluating the new method for solving the scattering problem rather than on the cross sections themselves.

KH

Коммуна 11178 | 1981.

Ghodgaonkar A. M.  
et al.

Список  
номера.

и номере  
Морзе-Квантума  
(до)

J. Chem. Soc. Faraday  
TRANS. II, 1981, 77  
209-211.



KH

Commerce 12200 | 1981.

KD

Hasan M. M., et al.

min.

Indian J. Pure and  
Appl. Phys., 1981,  
● 19, 584-86.

KH

[номер 12839] 1981.

Stevens W. J.; et al.

кв. см.

раств.

А<sub>2</sub>Е,

номер  
книжки

Do

J. Chem. Phys., 1981,  
74 (7), 3989-98

(сер. LiH; III)

KH<sup>-</sup>

Cont. 12839

1981

Stevens W. J., et al.

J. Chem. Phys, 1981, 74,  
N7, 3989-3998.

Ac, u.n.

● (see. Li H; III)

$\text{NH}^+$

[055-12839]

1981

Stevens W. J., et al.

u.n. Ae;  
cer. no. i.  
Do.

J. Chem. Phys., 1981, 74,  
N 7, 3989-3998.

●  
(cer.  $\text{LiH}^+$ ; III)

KM

1981

Tamássy-Lentel J.,  
et al.

Re, Do.

Acta Univ. Debrecen.

Ser. phys. et chim.,

1980 (1981), 23, N1, 137-  
147).

(cer. NAM; III)

KM(2)

(ommerk 15847) 1982

Farber M., Srivastava R. D.,  
et al.,

Do;

J. Chem. Thermodyn,  
1982, 14, N12, 1103-1113.

KM<sup>+</sup> [Dmmuck 14338] 1982

Fuentealba P., Preuss M,  
et al.

теоретич.,  
практич.

Chem. Phys. Lett., 1982,  
89, N5, 418-422.

КН

Ом.

15594  
15457

1982

1) 6 Б1559. Времена жизни и столкновения в КН,  $A^1\Sigma^+$ ,  $v'=5-22$ . Giroud Marc, Nedelec Odette. Lifetimes and collisions in КН,  $A^1\Sigma^+$ ,  $v'=5-22$ . «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 8, 3998—4005 (англ.)

Методом оптич. спектроскопии флуоресценции молекулы  $КНА^1\Sigma^+$ , возбуждаемой импульсным лазерным излучением, изучены ее времена жизни в различных колебательных состояниях. Молекулы КН получали из К и  $H_2$  в ВЧ-плазме (частота 2240 МГц, мощность 100—200 Вт, давл.  $H_2$  от  $5 \cdot 10^{-2}$  до 1 мм рт. ст.). Определены излучательные времена жизни  $\tau$  КН ( $A^1\Sigma^+$ ,  $J=8,9$ ) равные 64 ( $v'=5$ ) 60(7), 58(10), 56(13), 54(17), 53(19), 34(22) нс. Считается, что резкое уменьшение  $\tau$  при  $v'=22$  обусловлено возмущением  $A_1\Sigma^+$ -уровня диссоциативным уровнем  $a^3\Sigma$ . Определены сечения тушения КН  $A^1\Sigma^+$  ( $J=8,9$ ) молекулами  $H_2$  при 600 К, равные  $(57 \pm 6)A^2$  ( $v'=5$ ),  $(34 \pm 4)A^2(10)$ ,  $(45 \pm 5)A^2(19)$ . Сечения переноса вращательной энергии КН при столкно-

$\tau$  и столк  
lifetimes

X. 1983, 19, n 6



вении с  $\text{H}_2$  равны  $41 \pm 10) \text{ A}^2$  ( $v'=5$ ),  $(68 \pm 12) \text{ A}^2$  (10) и  $(92 \pm 15) \text{ A}^2$  (19). Парциальные сечения переноса вращательной энергии для ( $A^1\Sigma^+$ ,  $v'=10$ ,  $J'=8$ ) с участием  $\text{H}_2$  при 600 К равны ( $\text{A}^2$ ): 2,5 (переход  $f'=8 \rightarrow j=4$ ; 5,5 ( $8 \rightarrow 5$ ); 8,0 ( $8 \rightarrow 6$ ); 17,5 ( $8 \rightarrow 7$ ); 17,9 ( $8 \rightarrow 9$ ); 8,1 ( $8 \rightarrow 10$ ); 5,4 ( $8 \rightarrow 11$ ); 2,5 ( $8 \rightarrow 12$ ). Отмечается, что столкновение КН с электронами в разряде приводит к вращательным переходам с  $\Delta J' = \pm 1$  и колебательным переходам с  $\Delta v' = \pm 1, \pm 2$ . Такие переходы характерны для полярных молекул.

Ю. И. Дорофеев



КН

От. 15594  
От. 15457

1982

3 Д238. Времена жизни и столкновения в КН,  $A^1\Sigma^+$ ,  $v'=5-22$ . Lifetimes and collisions in  $\text{KH}$ ,  $A^1\Sigma^+$ ,  $v'=5-22$ . Giroud Marc, Nedelec Odette. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 8, 3998—4005 (англ.)

Экспериментально по измерению флуоресценции изучена релаксация заселенностей колебательно-вращательных уровней ( $v'=5-22$ ,  $J=8; 9$ ) электронно-возбужденного состояния  $A^1\Sigma^+$  молекул КН. Эти молекулы получались в разряде в смеси  $\text{K}+\text{H}_2$  и возбуждались в состоянии  $A^1\Sigma^+$  излучением импульсного лазера на красителе. Измерены радиационные времена жизни, которые монотонно уменьшаются от  $6,4 \cdot 10^{-8}$  до  $3,4 \cdot 10^{-8}$  с с ростом номера колебательного уровня от  $v'=5$  до 22. Сечения вращательных переходов в столкновениях с  $\text{H}_2$  монотонно возрастают от значения  $4,1 \cdot 10^{-5}$  см<sup>2</sup> для  $v'=5$  до  $9,2 \cdot 10^{-15}$  см<sup>2</sup> для  $v'=19$ .

Б. Ф. Горднеев

2,  
99.1983, 18, №3

KH

Ommick 15594 1982  
Ommick 15457

97: 190722k Lifetimes and collisions in potassium hydride.  $A^1\Sigma^+$ ,  $v' = 5-22$ . Giroud, Marc; Nedelec, Odette (Lab. Spectrometric Phys., Univ. Sci. Med. Grenoble, 38041 Grenoble, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(8), 3998-4005 (Eng). KH obtained in a high frequency discharge in  $K + H_2$  was selectively excited by a pulsed dye laser to  $A^1\Sigma^+$ ,  $v' = 5-22$ ,  $J' = 8$  or  $9$ . The radiative lifetimes were measured. They decrease slowly from  $v' = 5$  (61 ns) to  $v' = 19$  (53 ns) and rapidly at  $v' = 22$  (21 ns). Rotational transfer cross sections by collisions with  $H_2$  increase from  $v' \approx 5$  (41  $\text{\AA}^2$ ) to  $v' = 19$  (92  $\text{\AA}^2$ ) as do the elec. dipole moments in the levels. The collision with the electrons of the discharge provide rotational transfers where the  $\Delta J' = \pm 1$  transitions are the greatest and vibrational transfers  $\Delta v' = \pm 1, \pm 2$ , where the  $\Delta J' = 0$  transitions are small. These results are to be expected in polar mol. where the interaction of the electron with the permanent dipole moment of the mol. is predominant.

(2)

@.A.1982, 97, 122



KH

1982

Jeung Gwanghi.

рәсми 8i,  
с.п.

Thèse doct. état-sci.  
chim. quant. Univ.

Paul Sabatier Toulouse,  
1982. Var. pag., ill.

(с.п. ТiHy; III)

$\text{KH}^+$

1982

Энергия  
основного  
состояния

Mezey Paul G.

Int. J. Quantum

Chem., 1982, 22, N1,

101-114.

(см.  $\text{PbCl}_2$ ; I)

KM

DANDURK W M

B NARAKE BIRUCKIB  
Stwallley W.C.

knuffe  
nomerig.  
frepuu  
 $X^{12} + u$   
 $A^{12} +$   
comodit.

Yang S.C., Hsieh Y.L.,  
Kerma L.L., Stwallley W.C.,

J. Math. Spectrosc. in  
press.

KH

1982

Yang Sze-Cheng, St Walley  
William C.

Metal Bond. and Interact.  
High Temp. Syst. Emphasis

u. n.,

Alkali Metals. Symp. 181st

nomens.

Meet. Amer. Chem. Soc., At-

крупное

lanta, Ga, March 31-Apr. 3,

1981. Washington, D.C., 1982,

241-254.

(see Li H; III)

KH<sup>+</sup>

1983

Fuentealba P., Von Szentpaly Z., et al.

M.H. THEOCHEM 1983, 10,  
213 - 219.

● (see LiH; III)



KH

1983

Fering G.H., Dandley  
J. P., et al.

теория  
распада.

J. Phys. B 1983, 16  
(5), 699-714.

(см. K<sub>2</sub>; III)



КН

1983

9 Д693. Индуцированная лазером флуоресценция и неупругие столкновения молекулы КН. Laser-induced fluorescence and inelastic collisions of КН molecule. Parda A., Poyato J. M. L., Guijarro M. S., Fernandez-Alonso J. I. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 2, 248—252 (англ.)

В области 16 000—21 000 см<sup>-1</sup> получен спектр флуоресценции паров КН, возбуждаемый Ar<sup>+</sup>-лазером ( $\lambda = 488,1$  нм). Структура спектра отнесена к переходам в системе  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ . Анализ колебательно-вращательной структуры позволил рассчитать величины молекулярных констант для КН ( $X^1\Sigma$ ) (в см<sup>-1</sup>):  $\omega_e = 986,482$ ,  $\omega_e x_e = 15,4844$ ,  $\omega_e y_e = 0,1206$ ,  $B_e = 3,4122$ ,  $a_e = 0,08247$  и  $D_e = 15\,630$ .

М. Тимошенко

М. П.

ор. 1983, 18, 119

KH

1983

/101: 235860y Potential energy curve of the  $A^1\Sigma^+$  excited state of potassium hydride. Pardo, A.; Poyato, J. M. L.; Guijarro, M. S. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain). *An. Fis., Ser. A* 1983, 79(2), 121-9 (Span). Since the potential energy curve of the  $A^1\Sigma^+$  state of KH has not previously been correctly calcd., a new method is presented with numerical integration for a correct detn.

J. Troland

nonmetals.  
Kubal,  
 $A^1\Sigma^+$

C. A. 1984, 101; N 26.

KM

[ов. 18810]

1983

Shanker J., Agrawal M.B.,  
et al.

Электрон.

поляризуем., Indian J. Phys., 1983,

молеку.

A 57, N3, 155-163.

св-ва

KH

1983

Yang S.C., Nelson D.D.  
et al. Jr.,

D<sub>0</sub>;

J. Chem. Phys. 1983,  
78 (7), 4541-3.

( see  $\bullet$  NaH; III )

KH

1983

7 98: 116346v Laser-induced fluorescence and inelastic collisions of potassium hydride molecule. Pardo, A.; Poyato, J. M. L.; Guijarro, M. S.; Fernandez-Alonso, J. I. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(2), 248-52 (Eng). The laser-induced fluorescence spectrum of KH vapor, excited by the 4881-Å Ar ion laser line, was obtained and analyzed. The transition involved the  $A^1\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states. Vibrational and rotational energy transfer was detected. The spectrum presents a clear differentiation of bandheads. The mol. consts. obtained are in good agreement with the previously reported data.

лазер. флуор.  
спектр  
флуоресц.

©.A. 1983, 98, N14

КН

Am-20790

1984

11 Б1252. Инфракрасный спектр КН. The infrared spectrum of КН. Haese Nathan N., Liu Di-Jia, Altman Robert S. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 9, 3766—3773 (англ.)

С помощью полупроводникового лазерного спектрометра впервые измерена вращательная структура фундаментальной и горячей (2—1) полос колебательно-вращательных спектров молекул  $^{39}\text{КН}$  и  $^{41}\text{КН}$ . Молекулы КН получались в условиях разряда переменного тока в атмосфере паров калия и водорода. Значения коэф. Данхема для  $^{39}\text{КН}$  (в  $\text{см}^{-1}$ ):  $Y_{10}=985,6714$ ,  $Y_{20}=-14,9013$ ,  $Y_{01}=3,41640$ ,  $Y_{11}=-0,085313$ ,  $Y_{21}=5,41 \cdot 10^{-4}$ ,  $Y_{02}=-1,6354 \cdot 10^{-4}$ ,  $Y_{12}=1,13 \cdot 10^{-6}$ ,  $Y_{03}=7,6 \cdot 10^{-9}$ . Обсуждены уширение линий КН давлением  $\text{H}_2$  и механизм образования молекул КН в плазме разряда. Полученные значения  $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ,  $B_e$ ,  $\alpha_e$ ,  $D_e$ ,  $R_e$  сопоставлены с данными др. авторов. В. М. Ковба

М.П.

X. 1985, 19, N 11



КН

Лит. 20790 / 1984

6, J1188. ИК-спектр КН. The infrared spectrum of КН. Haese Nathan N., Liu Di-Jia, Altman Robert S. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 9, 3766—3773 (англ.)

Изучены ИК-спектры ( $1050-830\text{ см}^{-1}$ ) соединения КН (I) в газовой фазе с разрешением  $0,005\text{ см}^{-1}$ . Идентифицированы полосы фундаментальных колебаний и «горячих» переходов в системе уровней изотопически замещенных ( $^{39,41}\text{К}$ ) I. Рассчитаны коэф. Данхэма для  $^{39}\text{КН}$ . Определены равновесная длина связи и частота гармонич. колебания I, равные  $2,241152(16)\text{ \AA}$  и  $7,6(8) \cdot 10^{-9}\text{ см}^{-1}$  соответственно. Установлено уширение ИК-полос I с ростом давления  $\text{H}_2$  в исходной газовой смеси. Библ. 86.

И. В. А.

Л. П.

Ф. 1985, 18, № 6.

KH

[Om. 20790]

1984

102: 14514s ~~The infrared spectrum of potassium hydride.~~  
 Haese, Nathan N.; Liu, Di Jia; Altman, Robert S. (Dep. Chem.,  
 Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Chem. Phys.* 1984,  
 81(9), 3766-73 (Eng). The 1st observation is reported of the IR  
 spectrum of KH. Fundamental bands and 1st hot-bands of the  $^{39}\text{KH}$   
 and  $^{41}\text{KH}$  isotopic forms were measured at high resolu. by using a  
 diode laser based spectrometer. An a.c. glow discharge through K  
 vapor and H gas was used to produce KH. A combined isotopic  
 Dunham coeff. anal. was used to fit all the spectra, with the Dunham  
 coeffs. for  $^{39}\text{KH}$  coming out as  $Y_{10} = 985.6714(30) \text{ cm}^{-1}$ ,  $Y_{20} =$   
 $-14.9013(10) \text{ cm}^{-1}$ ,  $Y_{01} = 3.41640(10) \text{ cm}^{-18}$   $Y_{11} = -0.085313(26) \text{ cm}^{-1}$ ,  
 $Y_{21} = 5.41(60) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ,  $Y_{02} = -1.6354(36) \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ,  $Y_{12} =$   
 $1.13(10) \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$ ,  $Y_{03} = 7.6(8) \times 10^{-9} \text{ cm}^{-1}$ , (quoted at  $2\sigma$  error  
 limits). A bond length of  $2.241152(16) \text{ \AA}$  and a Dunham cor. value  
 for  $\omega_r$  of  $986.0505(30) \text{ cm}^{-1}$  were obtained. The pressure broadening  
 of KH by  $\text{H}_2$  and the chem. of KH formation in the glow discharge  
 plasma are also discussed.

UK спектры,  
 по см. Дархена

C. A. 1985, 102, N2.

KH(2)

[OM-222B7a"]

1985

Squires R. R.,

J. Amer. Chem. Soc., 1985,

107, N15, 4385-4390.

No

КН

(Om. 24933)

1986

Beesery B., Aubert-Frécon M.,  
et al.,

теор.  
расчет  
основн.  
и  
возбужд.  
состоян.

Chem. Phys., 1986, 109,  
N1, 39-46.

KH

1986

Giroud M., Nedelec O.

Ann. phys. (Fr.), 1986,

11, N3, collog., 175-176.

(cer. NatH; III)

КН

DM 23315, 37926 1986

13 B4425. Основное состояние  $X^1\Sigma^+$  молекулы КН, вблизи предела диссоциации. The  $X^1\Sigma^+$  ground state of КН near the dissociation limit. Hussein K., Effraintin C., D'Incan J., Verges J., Barrow R. F. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 124, № 2, 105—109 (англ.)

При высоком разрешении зарегистрирован спектр Фл паров КН, к-рые получали при т-ре  $490^\circ\text{C}$  в печи, содержащей К и буферный газ Аг при полном давл. 7 мбар. Добавки  $\text{H}_2$  специально не вводили, водород получался из примесей. Спектр Фл возбуждали в переходе  $A^1\Sigma^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$  светом 4880 А лазера на ионах  $\text{Ag}^+$ , к-рый заселяет уровни  $v'=7, J'=6$  состояния  $^{39}\text{КН}$  ( $A^1\Sigma^+$ ). Спектр Фл состоит, в основном, из дублетов  $R(5), P(7)$ , однако наблюдаются также вращат. сателлиты с  $\Delta J' = \pm 1, \pm 2, \pm 3$  и т. д. Последний связанный колебательно-вращат. уровень в основном состоянии КН ( $X^1\Sigma^+$ ) идентифицирован, как  $J=6, v=23$ . В предположении, что порог диссоциации КН лежит посередине между уровнями  $J=6$  и  $J=7$ , найдена энергия диссоциации  $D_e(\text{КН}) = 14776 \pm 4 \text{ см}^{-1}$ . В. Е. С.

М.А. (D)

dx. 1986, 19, N 13

КН

От 23315, 37926<sup>1986</sup>

8 Л436. Основное состояние  $X^1\Sigma^+$  молекулы КН около диссоциационного предела. The  $X^1\Sigma^+$  ground state of КН near the dissociation limit. Hussein K., Effantin C., D'incan J., Vergès J., Barrow R. F. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 124, № 2, 105—109 (англ.)

В спектре флуоресценции  $^{39}\text{КН}(A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+)$ , возбуждаемой линией 4880 Å  $\text{Ar}^+$ -лазера, проявляются связанные уровни основного состояния молекулы, расположенные непосредственно около диссоциационного предела. Последний связанный колебательно-вращательный уровень идентифицирован как  $J=6, v=23$ . Для энергии диссоциации основного состояния молекулы КН получено значение  $D_e = 14776 \pm 4 \text{ см}^{-1}$ . Библ. 26. В. С. Иванов

(De)

сб. 1986, 18, № 8

KH

Am. 23315, 37926 1986

104: 158584u The  $X^1\Sigma^+$  ground state of potassium hydride near the dissociation limit. Hussein, K.; Effantin, C.; D'Incan, J.; Verges, J.; Barrow, R. F. (Univ. Claude Bernard, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 124(2), 105-9 (Eng). Fluorescence excited in the  $A^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  system of  $^{39}\text{KH}$  by the 4880 Å Ar-ion laser gave information about the ground state as far as the last bound vibrational level. This was identified as  $J = 6$  in  $v = 23$ , and, assuming a limit midway between  $J = 6$  and  $J = 7$ ,  $D_e(\text{KH}) = 14,776 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$ .

$(A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+)$   
De

©. A. 1986, 104, N 18.



КМ

[om. 26170]

1986

Ženč F., Brandt B. A.,

потенц.  
крив.,  
Fe;

J. Chem. Phys., 1986,  
85, N 6, 3702-3703.

KH

1986

Langhoff Stephen R.,  
Bauschlicher Ch. W., Jr.,  
et al.

потенц.

кривые,

$\chi^1 \Sigma^+$  сост.,

теор.

расчит.

J. Chem. Phys. 1986,  
85 (9), 5758-66.

(ср. NaH; III)

КМ

[om. 28365]

1987

Fuentealba P., Reyes O.,

потенц.  
крив.  
основн.  
состоян.,  
де,  
колебл.  
частоты,  
функция связи

J. Chem. Phys., 1987,  
87, N 9, 5338-5345.

KH

1987

Jenc F., Brandt B.A.

u.n.

Theor. chim. acta,  
1987, 72, N5-6, 411-432.

(c.c. ● HF; III)

КН

1987

⇒ 6 Б1062. Теоретическое исследование структуры и стабильности гидридов типа  $MH_k$  и  $MH_{k+1}^-$  ( $M=K, Ca, Sc, Ti, V, Cu$  и  $Zn$ ). Мусаев Д. Г. «Химия гидридов. 4 Всес. совещ., Душанбе, 17—18 нояб., 1987. Тез. докл.» Б. м. б. г., 54

Неэмпирическим методом ССП изучены структура и стабильность гидридов  $KH, CuH, CaH_2, ZnH_2, ScH_3, TiH_4, VH_5$  и ионов  $KH_2^-, CuH_2^-, CaH_3^-, ZnH_3^-, ScH_4^-, TiH_5^-$  и  $VH_6^-$ . Из резюме

М.П.

(413) ~~27~~

Х. 1988, 19, N 6

KH  
KD

OM-27935

1987

107: 207614b The  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  band system of the potassium hydride (KH and KD) molecules. Pardo, A.; Camacho, J. J.; Poyato, J. M. L.; Martin, F. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *Chem. Phys.* 1987, 117(1), 149-62. (Eng). The mol. consts. of the  $A^1\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states of the KH and KD mols. were detd. using mass relations correspondent to a normal isotope shift. For that calcn., data were used of the laser-induced fluorescence spectrum by the  $Ar^+$  4881 Å exciting line as well as previous data presented by other authors. From the spectroscopic terms, quantum-mech. PMO-RKR-van der Waals hybrid potentials were generated. Numerical calcns. for the  $A^1\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states of the KH and KD species were compared with quantum-mech. values obtained by numerical soln. of the radical Schraedinger equation. Vibrational wave functions appropriate to the potential curves yield values of  $E_v$  and  $B_v$  which are in close agreement with the exptl. results. The probability distribution functions and Franck-Condon factors for the  $A^1\Sigma^+ \leftrightarrow X^1\Sigma^+$  band system were also detd. The anomalous behavior of the A state is clearly revealed with a changed anharmonicity for the lowest vibrational levels.

$(A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+)$

C.A. 1987, 107, N 22

КН

OM-27935

1987

5 B1212. Система полос  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекул КН и КD. The  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  band system of the КН and КD molecules. Pardo A., Camacho J. J., Poyato J. M. L., Martin E. «Chem. Phys.», 1987, 117, № 1, 149—162 (англ.)

М.А.

Выполнен совместный анализ спектров поглощения, испускания и лазерной флуоресценции, связанных с переходом  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекул КН и КD. Приведены значения коэф-тов Данхема  $Y_{j \leq 6, k=0,1}$  для состояний  $A^1\Sigma^+$  и  $X^1\Sigma^+$  молекулы  $^{39}\text{КН}$ , а также модифицированные в рамках модели возмущенного осциллятора Морзе (ВОМ) коэф-ты  $Y_{jk}(0)$ ,  $Y_{jk}(2)$ ,  $Y_{jk}(4)$  ( $Y_{jk} = \Sigma Y_{jk}^{(2l)}$ ). Рассчитаны значения  $E_v = G(v) + Y_{00}$ ,  $B_v$ ,  $R_{\text{мин.}}$ ,  $R_{\text{макс.}}$  для потенциальных кривых состояний  $A^1\Sigma^+$  и  $X^1\Sigma^+$ , описываемых гибридным потенциалом ВОМ-РКР-Ван-дер-Ваальса (приведены значения параметров ф-ций

17(4) КD

X. 1988, 19, N 5

потенциальной энергии). Полученные  $E_v$  и  $B_v$  согласуются со значениями, найденными в результате численного решения радиального уравнения Шредингера для указанных состояний. Приведены коэф.-ты аппроксимантов Падé. Табулированы рассчитанные значения факторов Франка-Кондона для переходов  $A^1\Sigma^+ (v'=0-34) - X^1\Sigma^+ (v''=0-11)$  ( $J'=J''=0$ ).

В. М. Ковба





КМ

[am. 27935]

1987

2 Д69. Система полос  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекул КН и КD. The  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  band system of the КН and КD molecules. Pardo A., Camacho J. J., Poyato J. M. L., Martín E. «Chem. Phys.», 1987, 117, № 1, 149—162 (англ.)

На основании анализа возбуждаемого аргоновым лазером спектра флуоресценции КН определены вращательные и колебательные коэф.  $Y$  в ф-ции Данхема в состояниях  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+$  молекулы  $^{39}\text{КН}$ . С помощью изотопич. соотношений найдены значения  $Y$  молекулы  $^{39}\text{КD}$ . Приводятся ф-лы, выражающие колебательные энергии  $E_v$  и вра-

М.Л.

ср. 1988, 18, N 2

щательные постоянные  $B_v$  через  $Y$  и колебательное квантовое число  $v$ . Ф-ции потенц. энергии

имеют вид  $U_0(r) = D_e \left( J^2 + \sum_{l=1}^{12} b_l y_l \right)$  и, при больших  $r$ ,

$U_0(r) = C_0 + \sum_{i=6}^{12} C_i / r_i$ , где  $y = 1 - \exp[-a(r - r_e)]$ , коэф.

$b_i$  определяются по значениям  $Y$ , значения  $r_e$  находятся из величин  $B_v$ , а коэф.  $C$  вычисляются по методу Ридберга — Клейна — Риса. С ф-циями  $U_0(r)$  решено колебательно-вращательное уравнение Шрёдингера и вычисленные  $E_v, B_v$  очень близки к их эмпирич. значениям. Приводятся численные значения  $E_v, B_v, a, D_e, r_e$ , коэф.  $Y, b, C$  для обоих электронных состояний КН и КД. Для переходов с уровней  $v' = 0 \div 34$  на уровни  $v'' = 0 \div 23$  в КН вычислены факторы Франка — Кондона. М. А. Ковнер

KH

1987

109: 29386k Laser-induced fluorescence and electronic potentials. Pardo, A.; Poyato, J. M. L.; Camacho, J. J.; Martin, E. (Fac. Cienc., Univ. Auton., Madrid, Spain). *Rev. R. Acad. Cienc. Exactas, Fis. Nat. Madrid* 1987, 81(2), 389-92 (Span). Mol. consts. of the  $X^1\Sigma^+$  and  $X^1\Sigma^+$  states of the KH and H<sub>2</sub> mols. were detd. For KH, data were used from the laser induced fluorescence spectrum as well as the previous data presented by other authors. For H<sub>2</sub>, I. Dabrowski's (1984) data were used. From the spectroscopic terms, electronic potentials were generated. The calcd. potentials were checked by solving numerically the radial Schroedinger equation. The vibrational eigenvalues and  $B_v$  values are in good agreement with the exptl. data.

u.n.,  $X^1\Sigma$

⊗ ⊕ H<sub>2</sub>

C.A. 1988, 109, NY

КМ

1987

★ 1 Л413. Поведение интенсивности спектра лазерно-индуцированной флуоресценции молекулы КН. The intensity behaviour of the laser-induced fluorescence spectrum in the КН molecule. Pardo A., Poyato J. M. L., Camacho J. J. «Spectrochim. acta», 1987, А43, № 5, 679—687 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом лазерно-индуцированной флуоресценции исследованы столкновительные процессы с переносом колебательной и вращательной энергии в газообразной смеси КН и водорода при  $t$ -ре 700 К и давлении 10—20 Тор. Измерены интенсивности линий в спектре ЛИФ  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  КН. Одновременно рассчитаны коэф. Франка — Кондона, при этом потенц. кривые обоих состояний  $A$  и  $X$  получены модифицированным методом РКР. На основании экспериментальных и теоретич. данных рассчитана зависимость электронного момента перехода от колебательного квантового числа и заселенности вращательных уровней колебательного состояния  $v' = 7$ .

Е. П. Смирнов

М. П.

ср. 1988, 18, 21

КМ

1987

2 Б1164. Распределение интенсивности в спектре лазерной флуоресценции молекулы КН. The intensity behaviour of the laser-induced fluorescence spectrum in the КН molecule. Pardo A., Poyato J. M. L., Camacho J. J. «Spectrochim. acta», 1987, А43, № 5, 679—681 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Измерен спектр флуоресценции молекулы КН (переход  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ ), возбуждаемый  $Ar^+$ -лазером (488,0 нм). Помимо прогрессии дублетов, связанных с переходами из непосредственно возбуждаемого состояния молекулы, в спектре наблюдалось большое число сателлитных линий, возникающих в результате процессов переноса колебат. и вращат. энергии при столкновениях. Рассчитаны потенциальные кривые РКР для обеих электронных состояний и приведены значения  $G_v + Y_{so}$ ,  $R_{мин.}$ ,  $R_{макс.}$  ( $v_A = 5-8$ ,  $v_X = 0-4$ ). Даны также факторы Франка — Кондона для наблюдаемых полос системы ( $v_A = 5-8 - v_X = 0-4$ ). Относит. величина момента перехода ( $R_c^2$ ) линейно зависит от  $v''$  (значения  $R_c^2$  равны соотв. 0,64; 0,76; 0,88; 1,0 для  $v'' = 1-4$ ).

В. М. Ковба

М.А.

X. 1988, 19, №2

KH

1987

107: 67140s The intensity behavior of the laser-induced fluorescence spectrum in the potassium monohydride molecule. Pardo, A.; Poyato, J. M. L.; Camacho, J. J. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *Spectrochim. Acta, Part A* 1987, 43A(5), 679-81 (Eng). Collisional processes involving changes in rotational and vibrational quantum nos. are detected in the laser induced fluorescence spectrum of KH. The knowledge of the Franck-Condon factors in the involved transitions allows to evaluate a relative variation of  $R_e^2$  vs. the  $v''$  vibrational quantum no. In the same context a population anal. was made for the  $v' = 7$  vibrational level.

(Ref)

c.A. 1987, 107, N8

KH

(Om. 28 458)

~ 1987-88

Pardo A., Poyato J.M.L.,  
et al.,

XI<sup>2</sup>+,  
u.n.

Comunicaciones A La  
Academia.

Fluorescencia ● inducida por

Láser y potenciales electrónicos.



KH

DM 28262

1987

108: 119232r Calculated potential energy curves for low-lying electronic states of the potassium hydride and rubidium hydride molecules. Ross, Amanda; Bussery, Beatrice; Jeung, Gwang Hi; Bacchus-Montabonel, Marie Christine; Aubert-Freco, Monique (Lab. Spectrom. Ion. Mol., Univ. Lyon I, F 69622 Villeurbanne, Fr.). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1987, 84(6), 745-50 (Fr). The potential-energy curves and several spectroscopic consts. for the 18 lowest-lying mol. states of KH and of RbH were calcd. by using the previously described (J., et al., 1983) method which involves nonempirical at. pseudopotentials for K and Rb, a CI calcn. using the CIPSI algorithm for the valence electrons, and a 2nd-order perturbation calcn. to take into account core polarization as well as core-valence correlation effects. The calcd. curve for the ground state of KH is in excellent agreement with the most recent Rydberg-Klein-Rees curve obtained from exptl. results. The ionic character of the ground state is discussed. Excited states are essentially dissociative due to the distribution of the valence electrons, which is sp. to the alkali hydrides.

домениз. крив.  
 куалитет  
 лектор.  
 космолт.

(7)

RbH ●

C.A. 1988, 108, N 14

КМ

DM 28262

1987

5 Д57. Расчет кривых потенциальной энергии для низших электронных состояний  $\text{KH}$  и  $\text{RbH}$ . Courbes d'énergie potentielle calculées pour les états électroniques les plus bas de  $\text{KH}$  et  $\text{RbH}$ . Ross Amanda, Busserg Béatrice, Jeung Gwang-Hi, Bacchus-Montabone Marie-Christine, Aubert-Frécon. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1987, 84, № 6, 745—750 (фр.; рез. англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом КВ в валентной оболочке и с использованием псевдопотенциала Дюрана рассчитаны потенц. кривые для 18 низших электронных состояний  $\text{KH}$  (I) и  $\text{RbH}$  (II). Приведены спектроскопич. постоянные  $T_e$ ,  $\omega_e$ ,  $R_e$  и  $D_e$ . Колебат. частоты для основных состояний равны 979,44  $\text{см}^{-1}$  (986,65 — эксперим. значение) и 870,72 (936,94), длины связей 1,066 ат. ед. (4,233) и 4,30 (4,47), энергия диссоциации 14990,2  $\text{см}^{-1}$  (14,777) и 14100 для I и II соответственно. Возбужденные состояния найдены диссоциативными. В. Л. Лебедев

М.Л.

(41) ~~47~~

ф. 1988, 18, IV 5

КН

от 28262

1987

9 Б1030. Кривые потенциальной энергии, рассчитанные для наиболее низких электронных состояний КН и RbH. Courbes d'énergie potentielle calculées pour les états électroniques les plus bas de КН et RbH. Ross A., Bussery B., Jeung Gwang-Hi, Vacchus-Montabonel Marie-Christine, Aubert-Frecon M. J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1987, 84, № 6, 745—750 (фр.; рез. англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия для молекул КН и RbH рассчитаны потенциальные кривые 18 низших электронных состояний типов  $1,3\Sigma^+$ ,  $1,3\Pi$  и  $1,3\Delta$ . При расчетах явно учтены лишь два валентных электрона. Для описания остовных электронов использован неэмпирич. псевдопотенциал; поляризация остова и корреляция между валентными и остовными электронами учтены по теории возмущений второго порядка для Rb псевдопотенциал включал релятивистские поправки. Приведены таблицы значений энергии как ф-ции межъядерного расстояния и обсужден ионный характер основного состояния. Б. И. Жилинский

Do

М.П.

(7) A

X. 1988, 19, 19

KH(2) (DM. 30854) 1988

Farber et al., Srivastava R.D.,  
High Temp.-High Pressures.  
1988, 20, N2, 119-140.

Do; Mass-spectrometric determina-  
tion of thermodynamic data  
for potassi-um compounds  
and several other species

occurring in LHM combustion  
systems.

KH

1988

7 Д77. Исследование моногидридов и монооксидов элементов главных подгрупп от К до Вг с использованием псевдопотенциалов. Pseudopotential study of monohydrides and monoxides of main group elements K through Br / Igel-Mann G., Stoll H., Preuss H. // Mol. Phys.— 1988.— 65, № 6.— С. 1329—1336.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП ЛКАО с учетом конфигурац. взаимодействия с использованием полученных ранее псевдопотенциалов исследовано электронное строение  $XH$  и  $XO$ , где  $X=K, Ca, Ga, Ge, As, Se, Br$ . Приведены равновесные длины связей, колебательные частоты, энергии диссоциации. Для  $XH$  длины связей занижены по сравнению с эксперим. значениями, но не более чем на 0,03 Å, исключая GaH, для которого наблюдается небольшое завышение. Энергии диссоциации также несколько завышены, но не более чем на 0,4 эВ. Частоты согласуются с эксперим. значениями с точностью 80  $cm^{-1}$ . Для оксидов отклонения рассчитанных

M-11



ф. 1989, N 7.

длин связей не превышают 0,05 Å, энергии диссоциации в основном несколько занижены, а отклонение для частот достигает  $150 \text{ см}^{-1}$ . Результаты в целом согласуются по точности с данными трудоемких полных неэмпирич. расчетов.

В. Л. Лебедев



KH

(DM. 29709)

1988

теор.  
расчет  
 $A^{1\Sigma^+}$  и  $X^{1\Sigma^+}$   
состояния,  
м.п.

Pardo A., Camacho J.J.  
et al.,

J. Mol. Struct.: Theo-  
chem. 1988, 166, 181-186

Electronic  
of alkali



potentials  
hydrides.



KH

Om. 29766

1988

потенциалы. Крив.

М.А.

' 109: 158906d New self-consistent potentials for the  $X^1\Sigma^+$  and  $A^1\Sigma^+$  states of potassium hydride. Pardo, A.; Camacho, J.; Poyato, J. M. L.; Martin, E.; Reyman, D. (Fac. Cienc. Exactas, Universidad Autonoma Madrid, Madrid, Spain 28049). *J. Mol. Struct.* 175, 209-14 (Eng). The vibrational and rotational mol. constants were determined for the  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  system of KH. From these experimental values, isotopically combined PMO-Rydberg-Klein-Rees and Morse-Vaals potentials were constructed, which were checked by numerical integration of radial Schrodinger equation. As an additional check on the accuracy of the potentials, the wavefunctions were used to compute  $B_v$ ,  $D_v$ ,  $H_v$  and  $L_v$  values. The agreement between the theoretical and exptl. results is quite satisfactory. Franck-Condon overlap integrals and probability distributions were calculated. The anharmonic behavior of the  $A^1\Sigma^+$  state may be observed in the probability distributions of the lowest vibrational levels.

C.A. 1988, 109, N18

KM

[om. 3/282]

1988

Rahman A., Hasan M.M.,

суд. пост.,

UK,  
Датон.,

До<sup>о</sup>, 02

(теор. прачем)

Indian J. Pure and Appl.  
Phys. 1988, 26, N 6, 400-404.

КМ

(О.М. 31 283)

1989

Мусаев Д.П., Чаркин О.П.,

констр.,

~~РМАНУ~~

Кoordгителас. Келмисе,

~~ХАРАМАН~~

1989, 15, N 2, 14-169

Жерчил,  
Кезгелерил.  
рачет

КК

от 28627

1988

13 Б4310. Точные значения энергий диссоциации состояний  $X^1\Sigma^+$  молекул КН и CsH. Accurate dissociation energies for the  $X^1\Sigma^+$  states of KH and CsH. Zemke W. T., Stwalley W. C. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 143, № 1, 84—90 (англ.)

С использованием лит. данных по возбуждаемой лазером Фл КН и CsH рассчитаны кривые потенциальной энергии (КПЭ) этих молекул. Отмечается, что точный расчет КПЭ основного состояния  $X^1\Sigma^+$  гидридов щел. металлов затруднен из-за квазипересечения ионного и ковалентного состояний. Авторы используют новый, гибридный, Пт: при малых межатомных расстояниях ( $r$  меньше 2,9 или 3,4 ат. ед. для КН или CsH) используются результаты неэмпирич. расчетов, в обл. минимума КПЭ — Пт Ридберга—Кляйна—Риса. Поведение при больших  $r$ , определяющее энергию диссоциации ( $D_e$ , отсчет от минимума КПЭ), находят, варьируя  $D_e$  и каждый раз вычисляя ширину уровня  $v''=23, J''=0$

Do;

(4)

X. 1988, 19, N 13

и его расстояние до соседних уровней; из сопоставления с эксперим. находят значение  $D_e$ , при к-ром теорет. и эксперим. ширина и расстояние совпадают (вращат. диссоциация обнаруживается для уровня  $v''=23$ ,  $J''=7$ ). Получено: для КН  $D_e=14772,7\pm 0,6$ ,  $D_0=14282,6$ ; для CsH  $D_e=14791,2\pm 2,0$ ;  $D_0=14348,5$  см<sup>-1</sup>.

---

Р. Ф. Васильев

КН

от. 28627

1988

6 Д65. Точные энергии диссоциации основных состояний  $X^1\Sigma^+$  молекул КН и CsH. Accurate dissociation energies for the  $X^1\Sigma^+$  states of КН and CsH. Zemke Warren T., Stwalley William C. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 143, № 1, 84—90 (англ.)

Из сравнения рассчитанных и наблюдаемых ширины линий колебательно-вращательных спектров молекул КН и CsH скорректированы значения энергий диссоциаций их основных электронных состояний, которые составили  $14772,7 \pm 6$  и  $14791 \pm 2,0$  см<sup>-1</sup>, соответственно. Потенц. ф-ции молекул определялись сплайновой аппроксимацией при малых межъядерных расстояниях ( $R$ ) потенц. кривой, полученной в неэмпирич. квантовохимич. расчетах, в районе минимума РКР-кривой и ван-дер-вальсова потенциала при больших  $R$ . Для КН рассматривалась ширина линии уровня  $v''=23$ ,  $J=7$ , для GH— $v''=25$ ,  $J=11$ . А. И. Дементьев

М.П.

(H)

ф. 1988, 18, N 6

KH

(000 28 627)

1988

108: 156787w Accurate dissociation energies for the  $X^1\Sigma^+$  states of potassium hydride and cesium hydride. Zemke, Warren T.; Stwalley, William C. (Dep. Chem., Wartburg Coll., Waverly, IA 50677 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 143(1), 81-90 (Engl.)  
New hybrid potential-energy curves for the ground states of KH and CsH were constructed. Then for obsd. quasibound states ( $v'' = 20$ ,  $J'' = 7$  in KH;  $v'' = 25$ ,  $J'' = 11$  in CsH), energies and line widths for varying dissoen. energies  $D_e$  were calcd. Based on a comparison of calcd. and obsd. line widths, improved  $D_e$  values were detd.: for KH,  $D_e = 14,772.7 \pm 0.6 \text{ cm}^{-1}$  ( $D_0 = 14,262.6 \text{ cm}^{-1}$ ); for CsH,  $D_e = 14,791.2 \pm 2.0 \text{ cm}^{-1}$  ( $D_0 = 14,348.5 \text{ cm}^{-1}$ ).

$D_0$

(7) ~~2~~ CsH

C.A. 1988, 108, N18

KM (32814) [ DM 33530 ] 1989

KD Ali M.S., Masan M.M.,

meop. Indian J. Phys. B 1989,  
paper 63, N4, 486-490.

A new interaction potential al-  
kali hydride ● molecules.



KM

1989

Boca R.

Int. J. Quantum. Chem.

1989. 36, N 6. C. 727-739.

(corr. ● NaH; III)

KH

(OM. 32829)

1989

До, 3,

номеров.

книж.,

описание.

состав.

мерем.

парем

Tamassy - Lentei I.,

Derecski - Kovacs A.,

Int. J. Quantum Chem.

1989, 36, N3, 277-285

Pseudopotential Investi-  
gation of some Alkali  
Metal Molecules.

(AM-35668)

1991

KH

KH<sup>+</sup>

KH<sup>-</sup>

Stwalley W.C., Lemke W.T.,  
Yang S. Ch.,

J. Phys. and Chem. Ref.  
Data, 1991, 20, N1, 153-  
-187.



one mp.  
M.P.,  
some  
K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>

КН

1991

2 17 Б1031. Исследование точности приближения СК12+3(СК12). Электрические свойства КН и RbH. A study of the accuracy of the CCSD+T(CCSD) approximation. Electric properties of KH and RbH / Urban Miroslav. Sadlej Andrzej J. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 7.— С. 5490—5491.— Англ.

На примере расчета электрич. св-в молекул КН и RbH исследована точность метода связанных кластеров с учетом одно- и двукратных возбуждений и с итерационной оценкой вкладов трехкратных возбуждений (метод СК12+3(СК12)). Дипольный момент и компоненты дипольной поляризуемости молекул КН и RbH рассчитаны по теории возмущений Меллера—Плессета различных порядков и различными вариантами метода связанных кластеров. Используются большие базисы, позволяющие учесть поляризац. эффекты, индуцированные электрич. полем:  $(6s4p)/[3s2p]$  на H,  $(15s13p4d)/[9s7p4d]$  на K и  $(18s15p10d)/[11s9p4d]$  на Rb. В рамках метода связанных кластеров трехкратные возбуждения дают значит. вклад в электрич. свойства. А. А. Сафонов

М.П.

Δ  
④

X-1992, N 17

KH

1993

Essig Kay, Urban  
Rolf Dieter, et al.

sp. n.,

Z. Naturforsch., A: Phys.

UK example

Sci. 1993, 48 (11), 1111-14.

● (see. Na D ; III)

KH

DM. 37237

1993

Rafi M., Ali N., et al.,

(u.n., do)

J. Phys. B: At Mol.

Opt. Phys. 1993, 2129—

2134.



KH

1995

123: 20766r Observation of the rotational spectrum of KH using a tunable far-infrared spectrometer. Odashima, Hitoshi; Wang, Dongbing; Matsushima, fusakazu; Tsunekawa, Shozo; Takagi, Kojiro (Dep. Phys., Toyama Univ., Toyama, Japan 930). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 171(2), 513-17 (Eng). Pure rotational transitions of KH were obsd. for the first time using a tunable far-IR spectrometer. Transition frequencies of R(J) with  $J = 0$  to 12 were measured with an accuracy better than hundreds of kHz. These precise data have enabled us to det. improved rotational parameters of KH.

(Kraus. chem)

C. A. 1995, 123, N 2

KH

1996

Mag. Kpu 628  
Al  $\Sigma^+$  conf.

J. Phys. B, Atom, Mol. Opt. Phys.  
1996, 29, 114, p. 1533



КН

1996

Ф-23Б132. Кривая потенциальной энергии Ридберга—Клейна—Риса для  $A^1\Sigma^+$ -состояния КН. The Rydberg—Klein—Rees potential energy curve of the  $A^1\Sigma^+$  state of КН / Rafi M., Al-Tuwirqi Reem, Fayyazuddin // J. Phys. B.— 1996.— 29, № 14.— С. L533—L536.— Англ.

С использованием новейших спектроскопических данных уточнены форма кривой потенциальной энергии Ридберга—Клейна—Риса и спектроскопические постоянные состояния  $A^1\Sigma^+$  молекулы КН с  $v$  от 27 до 38.

Е. В. Борисов

М.А.

.. л.

Х. 1997, № 22

KH

1996

125: 259774v The Rydberg-Klein-Rees potential energy curve of the  $A^1\Sigma^+$  state of KH. Rafi, M.; Al-Tuwirqi, Reem; Fayyazuddin (Phys. Dep., King Abdul Aziz Univ., Jeddah, Saudi Arabia). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1996, 29(14), L533-L536 (Eng). New spectroscopic data were used to extend the Rydberg-Klein-Rees potential energy curve of the  $A^1\Sigma^+$  state of the KH mol. from  $v = 27$  to 38.

( $A^1\Sigma$ )

nomerus. q-ur



C. A. 1996, 125, N 20

KH

[Um. 39072]

1997

Mironici U., et al.,

J. Neel. Street., 1997,  
413-414, 457-462.

Analysis of  
rotational

● Vibration-  
spectra of KH

KH

1997

127: 363632z Analysis of vibration-rotational spectra of KH. Uehara, Hiromichi; Horiai, Kouji; Konno, Toichi (Department of Chemistry, Faculty of Science, Josai University, Keyakidai, Sakado, Saitama, Japan). *J. Mol. Struct.* 1997, 413-414, 457-462 (Eng), Elsevier. A modified Dunham potential model developed recently was applied to the anal. of vibration-rotational spectra of KH. The spectral data set consisted of 107 lines from the literature and an addnl. 12 lines measured of KD. In total 119 spectral lines for 4 isotopomers were simultaneously fitted to a single set of only 11 mol parameters,  $U_{\infty}$ ,  $U_B$ ,  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ ,  $a_4$ ,  $a_5$ ,  $\Delta_{\infty}^H$ ,  $\Delta_B^H$ ,  $r_0^H$ , and  $\Delta_{n1}^H$ , well within exptl. errors. Values of  $\omega_e$  ( $^{39}\text{KH}$ ) and  $r_e$  within the Born-Oppenheimer approxn. are  $986.6484(41) \text{ cm}^{-1}$  and  $224.0164(10) \text{ pm}$ , resp., assuming that  $\Delta_{\infty}^K$  and  $\Delta_B^K$  are equal to zero.

романы.  
Датхема,  
М.А.

C. A. 1997, 127, N 26

KH

1998

130: 73254y Analysis and transition probabilities of the  $A\ ^1\Sigma^+ - X\ ^1\Sigma^+$  system of KH excited by the 4880 Å line of the argon ion laser. Camacho, J. J.; Poyato, J. M. L.; Pardo, A.; Reyman, D. (Facultad de Ciencias, Departamento de Quimica-Fisica Aplicada, Universidad Autonoma de Madrid, Cantoblanco, Madrid, Spain 28049). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(21), 9372-9383 (Eng), American Institute of Physics. The fluorescence spectrum of KH induced by the 4880 Å line of an Ar ion laser was analyzed. This work extends previous observations on K hydride in visible region by using this excitation line. Along with the principal fluorescence series for the  $A\ ^1\Sigma^+ - X\ ^1\Sigma^+$  band system, corresponding to the excitation transition,  $v'=7, J'=6 - v''=0, J''=5$ , the authors analyzed a very interesting satellite rotational and vibrational structure induced by collision. The radiative transition probabilities for the  $A\ ^1\Sigma^+ - X\ ^1\Sigma^+$  band system of KH were calcd. by using hybrid potential

( $A\ ^1\Sigma^+ - X\ ^1\Sigma^+$ )

C. A. 1999, 130, N. 6

energy curves for the X  $^1\Sigma^+$  and A  $^1\Sigma^+$  states and transition dipole moment function from the radiative lifetimes of different vibrational levels ( $v'=5-22$  in the A  $^1\Sigma^+$  state) reported by Giroud and Nedelec. The transition probabilities and lifetimes are in good agreement with the corresponding obsd. measurements usually within the exptl. uncertainty. Collision-induced rotational and vibrational energy transfer in the A  $^1\Sigma^+$  state was studied. From the rotational and vibrational satellite structure of some bands, cross sections for rotational and vibrational energy transfer were detd.

KH

1998

Farcia V.M. et al.,

g, Ae,  
Tz, meop.  
p a crem

g. Chem. Phys. 1998, 109  
(2), 504-511.

(all K, III)

KH

UM. 40250

2000

Myo Sng Lee, Yoon Sng Lee  
et al.,

Chem. Phys. Lett.,  
2000, 325, 46-52.  
Singlet and excited states of  $\Sigma^+$   
of NaH and



KH: undulating potential energy curves.



KH

2000

Tamaszy - Zentei I, et al.

соединю

к

THEOCHEM 2000, 501-502,

кампанию 403-406

(all. H<sub>2</sub>; III)

КН

2007

Beem N. et al.,

J. Chem. Phys., 2001,  
115 (13), 5984-88

К. мех.  
расчет  
потенц.  
Жемин,  
построит.  
Пар-др-лаамс.  
взаимодей.

(all. ●  $ZiH$ , II)

KPL

[ OM. 41320 ]

2002

ab initio  
paris Neji Khelefi and  
Brahim Dujia,

J. Chem. Phys., 2002,  
116, N7, 2879-2887

Ab Initio • adiabatic  
and diabatic energies and

dipole moments of the KH mo-  
lecular.