

He

I (He, Li^+ , Be^{++}) I 3667-BP 1929
BP-2258-IX

Hylleraas & a.

Naturwissenschaften 1929, 17, 982-3

"Ionization potentials of atom
configurations with two
electrons."

10

✓(∞)

C.A., 1930, 1285

I-3615

1930

He (I)

Kellner G.W.

Naturwissenschaften 1930, 18, 86

"Ionization potentials of
atom configurations with two electrons

C.A., 1930, 2046

He

Bcp - 57 - X

1936

Wn - Ta - You

(A)

Phil. Mag. 1936,
22, 837 - 46.

He

Bp-2872-III | 1938

Eriksson H. A. S

(7)

"Z. Physik", 1938, 109,
762-73.

He

BCP-5427-III

1947

Bates D.R

(Y; A;) "Proc. Roy. Irish Acad."

1947, 51 A, N12, 151-61

The study of negative ions by...

~~He~~ ^{Bayet} M. Michel Bayet 1951.
~~He₂~~ Compt rend Acad Sci 1951, 232, 7, 612
~~He₂~~ О световой эмиссии, сопровождающей
 электрическое возмущение разреж.
 газот. Случай гелия.

Ион He^+ , присут. в газе, или резонанс.
 прямо с электронами или образует ~~ионы~~
 двухатомный He_2^+ в результате удара с ~~атомом~~
~~He~~ который в  свою очередь резонанс.
 с электроном дает нестаб. молекулу He_2 .

He (I-1188) | BQP-1165-III | 1952
Bogaardt M.; et al.

(Y)

"Physica", 1952, 18, 249-64.

I-1215

/ BPP-5388-III

1952

He, Ar, Xe (I)

Hanle W., Riede D.

Z.Physik, 1952, 133, 537-40.

Excitation and ionization functions
in the scattering of fast electrons.

Ch.A., 1953, 7309F

He I

139-1151-III - 1953

Chandrasekhar S; et al.

(3)

"Phys. Rev"

1953, 91, N5, 1172-73.

I-1264 , Bp III - 1085

I953

H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl(A)

Skinner H.A., Pritchard H.O.

Trans. Faraday Soc., I953, 49, I254-62.

Measure of electronegativity.

Ch.A., I954, 7952c

10

✓ op

I-1261

1953

He (I)

Sessler A.M., Foley H.M.

Phys.Rev., 1953, 92, 1321-2.

The relativistic correction to the
groundstate energy of helium.

Ch.A., 1954, 24691

1-1251

I /He, Ne, Ar, Kr, Xe, N₂, HCl, CO₂)

I953

Morrison J.D.

J.Chem.Phys.I953, 21, N 10, I767-I772

()

Studies of ionization efficiency.
Part III.The detection and interpretation
of fine structure.

PX, I955, 2055I

He

Фок В. А.

1954

Изв. АН СССР сер. физ. 1954, т. XVIII

№ 161-174

Об уравнении Шредингера для
атома гелия.

He (I-1213)

J. F. Hart

1957

G. Herzberg

" Phys. Rev. 4

1957, 106, N1, 79-82.

bp-3535a-X

изменен
основан
состав

I-1236

1957

He (I)

Kinoshita T.

Phys. Rev., 1957, 105, N 5, 1490-1502
(*OH*.)

Ground state of the helium atom.

PX, 1958, N 3, 6865

10

✓_φ

He

Pluvillage D. 1957.

Kb. ex.
pucier

I-8645-cbci

"J de physique et Le
Radium."
1957, 18, 474-75.

He

1957

Sucker 7

(7)

BGP - 1270 - 1

p - 1010 - 1011.

He
молек.

1958

Gray B. F.,

J. Chem. Phys., 1958, 29, 272.

О приближенном раскре сдот-
свешных янэвон с галрвн.
кромером аюма геллн.

I-1327

$\frac{\text{He}^4}{\text{He}^3}$

(I)

1958

Herzberg G.

Proc. Roy. Soc., 1958, A248, N I254, 309-332
(англ.)

Ионизационные потенциалы и смещения Лемба
в основных состояниях He и He⁴.

РЖХ, 1959, № 7,
22172.

W

He (I)

Sucher J.

Phys. Rev., 1958, 109, N 3, 1010-1011
(AMPA.)

Energy levels of the two-electron atom
to order 3γ , ionization energy of
helium.

PX, 1958, 72936

T-1328
He⁴, He³ (I)

T-1308

1960

Herzberg G.
J. Opt. Soc. America, 1960, 50, N. 4, 404
(англ.)

Лембовский сдвиг основных состояний He⁴
и He³.

РЖХим., 1961,
8Б44

10

90✓

1960

Н⁻
 Li⁻
 (He⁻)

1Б49. О возбужденных связанных состояниях отрицательных атомных ионов. Holstien E. On excited bound states of negative atomic ions, «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 1, 310—311 (англ.).—На основании эмпирич. экстраполяционной ф-лы оценены разности энергий между потенциалами возбуждения и ионизации отрицательных ионов Н⁻, He⁻, Li⁻. Предсказаны стабильные отрицательные возбужденные ионы Н⁻-(1s2p, ³P), He⁻-(1s²2p, ²P) Li⁻-(1s²2p²; ¹D) и, возможно, He⁻-(1s²3p, ²P). Е. Никитин

x. 1961.1

He. I

1961-21

21Б60. Энергетические уровни и спектры нейтрального атома He(⁴HeI). Martin William C.

Energy levels and spectrum of neutral helium (⁴HeI). «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1960, A64, № 1, 19—28 (англ.).—Приведены таблицы энергетич. уровней He, длины волн линий в области 320—21132 Å, их классификация и оценка относительных интенсивностей. Таблицы составлены на основе сопоставления и проверки наилучших опубликованных эксперим. данных. Длины волн более половины линий рассчитаны по разностям соответствующих энергетич. уровней (особенно в УФ-области). Обсуждены и сопоставлены с эксперим. данными теоретич. представления о схеме энергетич. уровней He⁴. Показано, что первый ионизационный потенциал He⁴, вычисленный как среднее по трем сериям $3d^3D$ и f^3F^0 ; $2p^3P^0_{1,2}$ — nd^3D и $2p^1P^0_1$ — nd^1D_2 и равный $198310,81 \text{ см}^{-1}$, хорошо согласуется с экспериментально измеренным значением $198310,82 \pm 0,15 \text{ см}^{-1}$.

Ю. Коровин

Х. 1961.21

К I

I - 1246

1961

10B89. Энергетические уровни и спектр нейтрального атома гелия He^4 I. Martin William C. Energy levels and spectrum of neutral helium (^4He I). «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1960, A64, № 1, 19—28 (англ.).— Путем точных измерений получена таблица энергетич. уровней и длин волн спектральных линий нейтрального атома He^4 в области 320—21132 Å. Проведено сравнение полученных эксперим. результатов с теорией.

Ф.10B89.1961

He⁻

Riviere A.C.,
Sweetman D.R.

1960

Phys. Rev. Letters, 5, 560

Диссоциация H_2^+ и He^- под
действием электрических
полей.

(Сер. H_2^+) III.

I-1190

He (расчет D_0)

1961

Brigman, G.H., Brient S.J., Matsen F.A.
J.Chem.phys., 1961, 34, N 3, 958-960
(англ.)

Взаимодействие триплетного и нормаль-
ного атомов гелия.

РЖХим., 1961, 22Б51

7-1196

I96I

Kr, He,
Hg } (I)

Derman F.H., Morrison J.D.

J.Chem.Phys., I96I, 34, N 4, I407-
I410 (AH11.)

Ionization potentials of multiply
charged krypton, xenon and mercury.

PX, I962,
23561.

He

Erling Holoeien

1961

Phys. Norvegica, I, 53

Investigation of quasistationary
states of two-electron atomic sys-
tems with a special study of nega-
tive atomic ions.

W. H. Holoeien

1961

He

Hamaka H.F.

Атомный
ракет

J. Chem. Phys., 1961, 34, 884.

Взаимодействие низкого возбужден-
ного атомной энергии с атомом

2.1.1

He

1961

New emission continuum of helium in the vacuum ultraviolet region. Robert E. Huffman, W. W. Hunt, Jr., and Yoshio Tanaka (Air Force Cambridge Research Labs., Bedford, Mass.): *J. Opt. Soc. Am.* 51, 693(1961).—A condensed discharge was used at pressures of 150–800 mm. The new continuum extends from at least 1050 to beyond 4000 Å. Under the same conditions, the He mol. continuum also appeared in the region 600–900 Å. and the very much broadened, self-absorbed principal series of He I, beginning at 584.33 Å. An excited state of He_2^+ may be responsible for the continuum. George M. Murphy

C.A. 1961.55.20
19463a

1^1S , 2^1S , and 2^3S states of H^- and of He. C. L. Pekeris
 (Weizmann Inst., Rehovoth, Israel). *Phys. Rev.* 126, 1470-6
 (1962). The ionization energy J , including mass-polarization
 and relativistic corrections, but not the Lamb shift correction,
 was evaluated for the 1^1S state of H^- by using determinants up
 to order $n = 444$. $J(444) = 6083.0943 \text{ cm.}^{-1}$, and, by extra-
 polation, $J(\infty) = 6083.0958 \text{ cm.}^{-1}$. A search for bound states
 2^1S and 2^3S of H^- led to neg. results. In the case of He, an
 upper bound to the nonrelativistic energy eigenvalue ν for the
 1^1S state was evaluated at $n = 1078$ to be $\nu_+ = 198,317.866$
 cm.^{-1} , as against the previously detd. lower bound of ν_- (1078)
 $= 198,317.374 \text{ cm.}^{-1}$. For the 2^3S state this gap is already com-
 pletely closed at $n = 715$, with $\nu_+(715) = 38,453.1299 \text{ cm.}^{-1}$
 and $\nu_-(715) = 38,453.1292 \text{ cm.}^{-1}$. At $n = 1078$, $J = 38,454.82-$
 7375 cm.^{-1} , and the electron charge d. at the nucleus $D(0)$ is

C.A. 1963. SB -1

143h-144a

(C.L. Pekeris H^-) III

3.18414092, in agreement with previously extrapolated values. This substantiates a disagreement of the order of 1 part in 10^5 between theory and expt. in the hyperfine structure of the 2^3S state of He^3 which was established by White *et al.* (CA 54, 52401a). With Suh and Zaidi's value for the Lamb shift of $-0.109 \pm 0.009 \text{ cm.}^{-1}$, the ionization energy of the 2^3S state is $38,454.718 \pm 0.009 \text{ cm.}^{-1}$, as against Herzberg's exptl. value of $38,454.73 \pm 0.05 \text{ cm.}^{-1}$. For the 2^1S state $J(615) = 32,033.318 \text{ cm.}^{-1}$, which, with a Lamb shift of $-0.104 \pm 0.014 \text{ cm.}^{-1}$, evaluated by S. and Z., leads to an ionization energy of $32,033.214 \pm 0.014 \text{ cm.}^{-1}$. The exptl. value is, according to Herzberg, equal to $32,033.26 \pm 0.03 \text{ cm.}^{-1}$, or, at worst, $\pm 0.05 \text{ cm.}^{-1}$. A summary is given of the verification of the Lamb shift in 2-electron atoms.

CA

1962

27828) EXCITED S STATES OF HELIUM. C. L. Pekeris (Weizmann Inst., Rehovoth, Israel). Phys. Rev., 127: 509-11 (July 15, 1962).

As part of a program aiming to determine all the observed term-values of two-electron atoms on the basis of the Schrödinger wave equation, the $1s\ ns$ levels of helium up to $n = 9$, in both the singlet and the triplet states were evaluated. The previous method, using perimetric coordinates, was extended to allow for the asymmetry between the $1s$ and the excited electrons. The mass polarization and relativistic corrections were also determined. The difference between the ionization energies $J(220)$, obtained by solving a determinant of order 220, and the experimental values, ranges from 3.6 cm^{-1} for 3^1S to 5.8 cm^{-1} for 9^1S , and from 0.5 cm^{-1} for 3^3S to 5.7 cm^{-1} for 9^3S . The extrapolated values indicate that with a faster computer than WEIZAC it should be feasible to determine all of the 31 observed $1s\ ns$ levels ($n \leq 17$) of helium to within the experimental accuracy. (auth)

Rf. - see

paper

append

He

-

NSA - 1962
16. 20

I-1259

1962

He (I)

Salpeter E.E., Raidi M.H.

Phys.Rev., 1962, 125, II I, 248-255
(англ.)

Lamb shift excitation energy in
the ground state of the helium atom.

PX, 1962,
I46I2

1962

He

Correlation function for the helium 1^1S state. O. C. Simpson and D. McColl (Argonne Natl. Lab., Lemont, Ill.). U.S. At. Energy Comm. TID-17152, 18 pp.(1962). Tables of values and graphs of the correlation function for the 1^1S state of the He atom are given for 2 different He 1^1S functions, and some comparison of Hartree-Fock and Hylleraas wave functions for the He ground state is made. From *Nucl. Sci. Abstr.* 17(17), Abstr. No. 29395(1963). TCNG



C.A. 1964. 61. 13

15527 gh

He I

139p-7125-IV | 1963

Akerib R.

уровни
энерг.

"J. Opt. Soc. America, 1963,
53, №8, 918-23.

Empirical relations for...

I-3191

1963

J(He, Ne, Ar, Kr, Xe)

Blanc Claude, Blanc Daniel, Degeilh
André, Malossot Claude.

Application de la spectrométrie
de masse à l'étude de l'ionisation
des gaz. "J.phys.et radium", 1962, 23,
N 4, 219-222 (apparus.; pub. ann.)

PX., 1963, 5, 644

(10)



Expo. sp.

1963

He⁴

/ 4 Д75. Трехатомное связанное состояние He⁴.
Blatt J. M., Lyness J. N., Larsen Sigurd
Yves. Three-body bound state in He⁴. «Phys. Rev.»,
1963, 131, № 5, 2131—2132 (англ.)

Приведены результаты численных вычислений энергии связи систем двух- и трехатомного He⁴. Вычисления проведены для нескольких потенциалов парного взаимодействия между атомами (потенциал 6—12 Леннарда-Джонса, модель твердых шаров с потенц. ямой и др.) и для различных значений параметров потенциалов. В ряде вариантов расчетов с достаточно малым диаметром твердого шара (доли Å) связанное состояние He⁴ имеется и тогда, когда энергия связи He₂⁴ равна нулю. Однако при более правдоподобном значении диаметра потенциала отталкивания (~2 Å) существует корреляция связанных состояний He₂⁴ и He₃⁴, выражающаяся в том, что последние реализуются или исчезают примерно при одних и тех же значениях параметров потенциала. Воп-

см. нефоб.

ф. 1964. 48

рос о существовании связанного состояния He_3^4 имеет прямое отношение к вычислению третьего вириального коэф. He^4 . Имеющиеся теоретич. и эксперим. исследования взаимодействия атомов He^4 при низких т-рах не дают однозначного ответа даже на вопрос о существовании связанного состояния He_2^4 . Проведенные расчеты могли бы быть особенно полезными в сочетании с эксперим. данными о 2- и 3-вириальных коэф. He^4 при т-рах 1—20° К. Требуемая для этого точность измерений составляет, соответственно, 1 и 20% для 2-го и 3-го вириальных коэффициентов.

Н. Кузнецов

He

спектр.

9 Д14. Расчет автоионизационных уровней He. Burke P. G., McVicar D. D. Smith K. Calculation of autoionization levels in He. «Phys. Rev. Letters», 1963, 11, № 12, 559—561 (англ.)

Проведен расчет ширины и положения некоторых автоионизационных уровней He. Для этого рассчитано рассеяние $e - He^+$. В расчете использовано разложение полной волн. ф-ции системы по атомным волн. ф-циям, предложенное в предыдущей работе (РЖФиз, 1962, 11В31). Используемое разложение имеет следующие преимущества: 1) виртуальные переходы в $2s$ - и $2p$ -состояния трактуются как точные, переходами в высшие состояния пренебрегается и 2) перемешивание дискретных уровней и континуума получается из начальных условий, а не вследствие возмущений, фазовые сдвиги вычислены методом итераций на электронной счетной машине.

Ю. Беляев

ф. 1964. 98

1963

He

Considine J. P., Bauman R. P.

Li⁺

J. Chem. Phys., 1963, 38, 1278 (v6)

O⁺⁶

Screening parameters for two-,

Ne⁺⁸

three-, and four-electron sys-

Pauet

tems.

Zyobret

Zyobret

Zyobret

He

B ϕ -5624-III

I963

Crosley R.J.S.

Coulson C.A.

Proc. Phys. Soc., I963, vol.81, pp211-218

1963

He

Davis K. L.

Кб.-мех.

J. Chem. Phys., 1963, 39, 1183 (N:5)

расчет

Применение комбинационного
взаимодействия к 2^3S -состоянию
гелия. II.

He
Кв. мех.

расчет
атомов.

6 Д56. Радиальный предел в методе наложения конфигураций для изоэлектронного ряда гелия 1^1S . Davis H. L. Radial limit in the configuration-interaction method for the 1^1S state of the helium isoelectronic sequence. «J. Chem. Phys.», 1963, 39, № 7, 1827—1832 (англ.)

Методом наложения конфигураций вычислена энергия основных состояний всех членов изоэлектронного ряда гелия от отрицат. иона водорода до двухэлектронного иона кальция. Пробные волн. ф-ции строились с помощью базисов, включающих разное число радиальных ф-ций от 21 до 66. Приведена таблица значений энергии основных состояний двухэлектронных систем ($1 \leq Z \leq 20$), вычисленных с помощью 21, 28, 36, 45, 55 и 66-конфигурационных ф-ций, и эффективных зарядов, соответствующих миним. значениям энергии для заданных базисов. Там же даны предельные значения энергии, которые могут быть получены при рассмотрении конфигураций, включающих только члены с $l=0$. Представлена таблица коэф. разложения для 66-конфигурационных волн. ф-ций, отвечающих следующим членам изоэлектронного ряда гелия: $Z=1, 2, 3, 5, 10$ и 20 . Предельное значение энергии для гелия хорошо согласуется с результатами других расчетов.

А. Иванова

ф. 1964. 68

He (Te) XI 1632 1963

Dewar M. J. S., Chung A. L. H.,
J. Chem. Phys., 1963, 39, 17,
1741-47

SPO - (split-p-orbital) method IV
Calculations for the $(2p)^2$ state
of helium

10 p9p6-y

ЕСТЬ ОРИГИН.

He⁻

1963.
Ellison F.O., Huff R.T.

J. Chem. Phys., 1963, 39, 2051
(118.)

Use of rescaled eigenfunctions
as variational wavefunction in
calculations on atoms and ions.

He, Li⁺, Be⁺⁺,
B⁺⁺⁺, O⁶⁺,
Ne⁸⁺, Mg¹⁰⁺

Hart J.F., Herzberg G.,
Z. Physik, 171, 83

1963

195

Диагностический спектральный анализ и
энергия возбуждения 2^3S атома He и
использование ионов

Есть отскан N195



He

Kauffman M., 1963

Astrophys. J.

137, NY, 1296

$A\bar{e}(\text{He}^-)$

(see. H) III

1963

He
 Ar
 H
 C₂H₄
 (чекер)

Electron-impact spectroscopy. Aron Kuppermann and L. M. Raff (Univ. of Illinois, Urbana). *Discussions Faraday Soc.* 1963(35), 30-42. A spectrometer has been devised for detg. electronic energy levels of mols. by inelastic scattering of low-energy electrons (25-75 e.v.). It permits the detection of optically forbidden electronic transitions as clearly as optically allowed ones in a routine manner. The spectrometer was used to obtain excitation spectra for He, Ar, H, and ethylene. For the first 3 of these substances, the spectra agree with previous expts. For ethylene, in addn. to optically allowed transitions, 2 forbidden ones occur at about 4.6 and 6.5 e.v. Variation of peak heights with incident electron beam energy suggest that the 1st corresponds to a triplet state but that the 2nd does not.

S. E. Whitcomb

C.A. 1964. 60. 4
 3629 ab

He

О 13 Б1. Решение задачи двух электронов в квантовой механике путем прямого определения натуральных орбиталей. II. Приложение к основным состояниям гелия и изоэлектронных ионов. Kutzelnigg Werner. Résolution du problème à deux électrons en mécanique quantique par détermination directe des orbitales naturelles. II. Application aux états fondamentaux de l'hélium et des ions isoélectroniques. «Theoret. chim. acta», 1963, 1, № 4, 343—352 (франц.; рез. нем., англ.)

Методом разложения по полной системе функций Лягерра получено приближенное решение интегро-дифференциального уравнения для натуральных одноэлектронных функций в изоэлектронном ряду гелия. Полученный ряд по натуральным орбиталям хорошо сходится: существенный вклад в энергию вносят только состояния с главными квантовыми числами менее 4. В результате расчета удалось учесть 95% энергии корреляции. Исследована роль различных слагаемых в энергии корреляции. Дано приближенное представление корреляционного потенциала. Сообщение 1 см. РЖХим, 1965, 6Б17.

Т. Ребане

ж. 1965. 13

He

1963

серобр.

сост.

/ Ground state of atomic helium. Wilbur Lakin. U.S. At.
Energy Comm. NYO-10430, 14 pp.(1963). Math. From
Nucl. Sci. Abstr. 17(24), Abstr. No. 41556(1963). TCNG

C. A. 1964 GO N13 15/62 e.

1963

X1-2011

New autoionizing atomic energy levels in He, Ne, and Ar. R. P. Madden and K. Codling (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *Phys. Rev. Letters* 10, 516-18(1963). A 180-m.e.v. electron synchrotron was used as a continuum light source for absorption spectroscopy, 180-470 Å. Autoionizing states caused by 2-electron transitions were found in He, Ne, and Ar. Such autoionization can take place when neutral atoms are excited to energy levels above their 1st ionization limit. The lifetime of the discrete level is detd. by the strength of the interaction of these states with the continuum states, resulting in an interference imparting an unusual shape to the absorption band near the discrete level. In Ar at 0.3 mm. with absorption path length ~ 83 cm. there are discrete windows in the absorption continuum. This region of the spectrum lies 35-40 e.v. above the 1st ionization limit of 24.58 e.v. for He. The absorption in He is enhanced on the low-frequency side and reduced on the high-frequency side. The breadths of the anomalies decrease with progression to the higher series members. The intensity distribution in these anomalies is in qual. agreement with theoretical predictions. Autoionized lines in Ne were observed in the 250-280-Å. range, the 1st ionization potential of Ne being 21.56 e.v., at 0.1 mm. pressure and 95 cm. absorption path. Some autoionized lines were found with Ar at 420-470 Å. (1st ionization potential 15.76 e.v.) at 0.01 mm. pressure and for a 105-cm. absorption path length.

Manfred Mannheimer

He, Ne, Ar
y p o b u m a n g -
(19) m u

C.A. 1963

59.8

8250 de

He

Ne

Ar

3 Д148. Новые автоионизационные атомные энергетические уровни He, Ne и Ar. Madden R. P., Codling K. New autoionizing atomic energy levels in He, Ne, and Ar. «Phys. Rev. Letters», 1963, 10, № 12, 516—518. (англ.)

На синхротроне до 180 Мэв Национального бюро стандартов (США), используемом в качестве источника сплошного спектра в измерениях поглощения в области 180—470 Å, наблюдались двухэлектронные переходы до автоионизационных состояний в атомах He, Ne и Ar. Вакуумный спектрограф с решеткой (600 штрихов/мм) обеспечивал в области 200 Å дисперсию ~ 1 Å/мм при разрешающей способности $< 0,1$ Å. Спектры в далекой УФ-области (для He 180—210 Å, для Ne 250—280 Å, для Ar 425—465 Å) характеризуются наложением дискретной структуры на непрерывное поглощение, связанное с фотоионизацией. Приведены фотографии и денситометрический график спектров поглощения. Наблюдаемые линии приписаны переходам $1s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^1P_1^0$ (для первой линии серии He), $2s^22p^6\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p^6np\ ^1P_1^0$ (Ne) и $3s^23p^6\ ^1S_0 \rightarrow 3s3p^6np\ ^1P_1^0$ (Ar). Показано, что появление этих серий следует ожидать и теоретически. Библ. 15 назв.

А. Шеклени

ф. 1964. 370

1963

X1-2011

He (Te)

XI 2034

1963

Meath W. J., Sando K. M.,
Goscinski S. O., Hirschfelder F. O.,
J. Chem. Phys., 1963, 39, N10,
2429-34

Truncated reaction operators

ppp64

1963

He

Perkins J. F.

J. Chem. Phys., 1963, 39, n 3, 687

Вычисления некоторых S-состояний двухэлектронных атомов с помощью вариационного метода.

ф. 1964. 6А

(см. III Be⁺⁺)

1963

He

The correlation energies of excited states of the helium sequence. R. Perrin and A. L. Stewart (Queen's Univ., Belfast, Ire.). *Proc. Phys. Soc.* (London) 81, 28-34(1963). The method of superposition of configurations was used to det. the contributions from radial and angular correlation to the 2nd-order term in the expansion of the energies of excited states of the 2-electron systems in inverse powers of the nuclear charge. Comparison with the similar calcn. carried out by Sharma and Coulson in 1962 by using an expansion in terms of Hylleraas coordinates shows that the superiority of the method of incomplete sepn. of variables over the method of superposition of configurations is not so pronounced as for the ground state. The contributions to the 2nd-order energy of the $1s2s^1S$, $1s2s^3S$, $1s2p^1P$, and $1s2p^3P$ states from correlation are -0.0180 , -0.0041 , -0.0068 , and -0.0069 rydberg, resp., compared with the Hartree-Fock contributions -0.2068 , -0.0906 , -0.2931 , and -0.1358 rydberg, resp. 3rd-order terms were also calcd. CA

C.A. 1963 · 58 · 10.

9753 a

He

BP-2972-III	1963
-------------	------

(T.)

Reeves C. M.

J. Chem. Phys., 1963,
39 (1), 1-10

1963

He

Bi

Roger der Agobian, Jean Lou-
is Otto Rolland Richard,
Roland Cagnard.

Compt. Rend. 257 (25), 3844.

Stimulated emission of
new infrared transitions
of neon.

C.A. 1964.60.8

8807h

(cm $\overline{\text{m}}$, Ne)

1963

BPP VI - 3446

~~He I~~
He I

Infrared emission spectra of cadmium and helium. Jacques Segulier. *Compt. Rend.* 256, 1703-4(1963). The spectra of Cd and He were observed in the spectral region 1.6-3.7 μ . The following Cd I lines were observed: (proposed assignment, frequency (cm.⁻¹)) 8 ³D₁ - 6 ³P₂, 10,764.8; 7 ³D₁ - 6 ³P₁, 9528.5; 7 ³D₂ - 6 ³P₁, 9531.3; 7 ³D₂ - 6 ³P₂, 9361.8; 7 ³D₂ - 6 ³P₂, 9357.2; 5 ³F₂ - 5 ³D₁, 8607.9; 5 ³F_{2,3} - 5 ³D₂, 8595.8; 6 ³D₁ - 6 ³P₀, 6962.6; 6 ³P₂ - 6 ³P₁, 6897.7; 6 ³D₁ - 6 ³P₁, 6891.9; 6 ³D₂ - 6 ³P₂, 6723.6; 6 ³D₁ - 6 ³P₂, 6717.8; 5 ¹D₂ - 4 ³F, 6361.9; 7 ³P₂ - 5 ³D₃, 5576.8; 6 ¹D₂ - 6 ¹P₁, 5229.3; 7 ³S₁ - 6 ³P₀, 4172.6; 7 ³S₁ - 6 ³P₁, 4101.9; 7 ³S₁ - 6 ³P₂, 3927.8. New transitions were observed in the He spectrum at 7980.34 cm.⁻¹ (4 ³P - 3 ²S) and 5115.52 cm.⁻¹ (4 ³P - 3 ³D). Walter J. Lafferty

Cuey p

(9)

C.A. 1963-5B.12

120856

☑

He (ϵ_i)

XI 2357

(1955)

Stewart A. L.

Advances Phys., 1963, 12, v 47, 239-253 (acme)

The properties of the helium atom and
the two-electron systems

Rev. Mod. Phys., 1965, 36, 5



10

1963

He

Li⁺

of anomalous

545 PHOTO-IONIZATION OF HELIUM AND IONIZED LITHIUM. A. L. Stewart and T. G. Webb (Queen's Univ., Belfast). Proc. Phys. Soc. (London), 82: 532-6 (Oct. 1, 1963).

The work of Stewart and Wilkinson on the photo-ionization of helium using six-parameter Hylleraas ground state and Hartree-Fock continuum wave functions was extended to higher energies. Agreement to within 10% is obtained with the recent measurements of Baker, Bedo, and Tomboulion over the spectral range 504-180 Å. Results for Li⁺ based on the same approximations are also presented. (auth)

NSA-1964-18.2

Cd He

1963

, 7 Б20. Инфракрасные спектры испускания кадмия и гелия. Séguier Jacques. Spectres d'émission infrarouge du cadmium et de l'hélium. «C. r. Acad. sci.», 1963, 256, № 8, 1703—1704 (франц.)

Изучены ИК-спектры испускания He и Cd в области 1,6—3,7 μ ; между экспериментально и теоретически вычисленными данными наблюдается хорошее соответствие. Для He были обнаружены новые линии 12 526 и 19 542 Å, идентифицированные как линии типа 4^3P-3^3S и 4^3P-3^3D соответственно. Ряд линий в спектре Cd (17 635, 23 735, 25 220, 25 655, 29 290, 30 083, 30 115, 30 175 и 35 610 Å) идентифицирован не был; помимо этого, линия 15 258 Å, указанная Пашеном, в спектре не наблюдалась и, очевидно, не соответствует теоретич. спектру Cd. Б. Рассадин

X. 1964. 45

1963

He

7 Б20. Инфракрасные спектры испускания кадмия и гелия. Séguier Jacques. Spectres d'émission infrarouge du cadmium et de l'hélium. «C. r. Acad. sci.», 1963, 256, № 8, 1703—1704 (франц.)

Изучены ИК-спектры испускания He и Cd в области 1,6—3,7 μ ; между экспериментально и теоретически вычисленными данными наблюдается хорошее соответствие. Для He были обнаружены новые линии 12 526 и 19 542 Å, идентифицированные как линии типа 4^3P-3^3S и 4^3P-3^3D соответственно. Ряд линий в спектре Cd (17 635, 23 735, 25 220, 25 655, 29 290, 30 083, 30 115, 30 175 и 35 610 Å) идентифицирован не был; помимо этого, линия 15 258 Å, указанная Пашеном, в спектре не наблюдалась и, очевидно, не соответствует теоретич. спектру Cd.

Б. Рассадин

X. 1964. 7520

Теория H.S. Taylor, F.E. Harris 1965-64г.

He, H Mol. Physics. 1965-64, 7N3, 287.

Квантово-механическое изу-
чение He, H⁻, He-He и
He-H систем.

(обсуждаются энергии взаимодействия этих атомов в осн. состояниях)

He

1963

У 9 БЗ. Поправки возмущения первого порядка к приближению Хартри — Фока для гелия. Weiss A. W., Martin J. B. First-order perturbation corrections to the Hartree — Fock approximation for helium. «Phys. Rev.», 1963, 132, № 5, 2118—2122 (англ.)

С помощью вариационного метода и теории возмущений, в которой в качестве исходной взята волновая функция Хартри — Фока, в первом приближении вычисляются средние значения одно- и двухэлектронных операторов и энергия основного состояния для атома He и его изоэлектронного ряда (H^- , Li^+ , Be^{2+}). Энергия получена в виде разложения по убывающим степеням Z , начиная с Z^2 . Показано, что уже первое приближение дает существенное улучшение результатов, хотя расхождение с точными значениями величины еще велико (ошибка для энергии, напр., остается равной $3 \cdot 10^{-2}$ эв). Более высокие приближения играют особенно важную роль для отрицательных ионов и должны быть учтены при вычислении, напр., электронного сродства.

А. Зимин

1

x. 1965.9

1964

He

9 Д33. Вычисления зависящего от температуры отношения интенсивностей линии He II-4686 Å и окружающего ее континуума. Berg Н. F., Tondello G. Calculations on the temperature sensitive intensity ratio of the He II-4686 Å line and its neighbouring continuum. «Ber. Kernforschungsanlage Jülich», 1964, № 182, 11 pp., ill. (англ.)

Отмечается, что с помощью метода, в котором используется отношение интенсивностей линии и близлежащего континуума, удобно определять т-ру нейтрального водорода и ионов гелия при т-рах, превосходящих $35\,000^{\circ}\text{K}$. Авторы статьи проводят вычисления интенсивностей непрерывного спектра нейтрального и ионизованного гелия в области $\lambda=4686\text{ Å}$ в диапазоне т-р $10\,000\text{—}100\,000^{\circ}\text{K}$. Результаты расчета представлены на

ф. 1965. 98

графиках. Рассчитывается также интенсивность линии He II-4686 Å и находится ее отношение к интенсивности близлежащего континуума. Результаты этих вычислений, относящиеся к интервалу т-р $T=20\,000—100\,000^{\circ}\text{K}$ приведены на графике. Отмечается сильная температурная зависимость величины этого отношения. Рассматриваются полученные различными авторами критерии для плотности электронов, необходимые для существования термодинамич. равновесия. Указывается, что если используются только верхние уровни, то нет необходимости требовать существования термодинамич. равновесия по всем состояниям. В этих условиях авторы получают свой критерий для плотности электронов. Н. Генералов

1964

He
Убунд
parent

Solution of the self-consistent-field equations for atoms by the application of BESM-2M. V. F. Brattsev. *Vestn. Leningr. Univ.* 19(10), *Ser. Fiz. i Khim.* No. 2, 24-30(1964). A method of solving S.C.F. equations by applying the computer BESM-2M is given. By this program (entirely automatic), ground and excited states of light atoms ($Z = 2-18$) were calcd. As an example, calcs. related to He were examd. S. Folek

C.A. 1964. 61. 10
11474.c

He (8i) XI 1586 1964

Chan Y. M., Dalgarno A.,

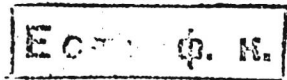
Phys. Letters., 1964, 13, No. 2,
130-131.

The calculation of atomic
energy spectra

ppp 65



20



1964

12103

HELIUM AFTERGLOW IN A FLOWING SYSTEM. C. B. Collins and W. W. Robertson (Univ. of Texas, Austin). 50p. (CONF-531-9)

From American Physical Society 1964 Southwestern Meeting, Tucson, Ariz., Feb. 1964.

Atomic Spectrum. Spectroscopic investigation of a flowing helium afterglow revealed the presence of strong lines of neutral helium. An examination of the population distribution of the excited atomic states revealed the presence of a Saha-equilibrium between the upper states and the free electrons indicating that the primary process of populating these states was the collisional-radiative recombination of He^+ . A comparison of the axial variation and pressure dependence of the intensity of the emission with the He_2^+ and He^+ concentrations strengthened this conclusion. Observations were made at times from 50 - 250 μsec into the afterglow (flow velocity $\sim 6 \times 10^4$ cm/sec) in a system having a diffusion half-life for He^+ of the order of 100 μsec , an ion density of 5×10^{12} /cc, and a maxi-

He,
He₂
chemistry

NSA 1965-19-7

mum electron temperature corresponding to ~ 0.15 ev.
Molecular Spectrum. Spectroscopic investigation of a
flowing helium afterglow revealed the presence of strong
bands of He_2 . An examination of the axial variation and
pressure dependence of the intensity of the emission and
 He_2^+ concentration, as evidenced by titration, served to
identify the dominant reaction populating the excited mo-
lecular states as being the collisional-radiative recombi-
nation of He_2^+ . (auth)

He,

He₂

(спектр)

10 Д81. Молекулярный спектр в послесвечении гелия. Collins C. B., Hurt W. B., Robertson W. W. The molecular spectrum in a helium afterglow. «Atomic Collision Processes». Amsterdam, 1964, 517—524 (англ.)

Исследовались спектры послесвечения (ПС) He, пропущенного через зону СВЧ-разряда. ПС имеет яркую розовато-фиолетовую окраску. В зависимости от давления He длина области ПС менялась от нескольких см до 15 см и более. Спектр ПС состоит из линий He* и полос He₂. Для выяснения процессов образования носителей ПС изучались зависимости интенсивности спектров He* и He₂ от давления He (5—45 мм рт. ст.) и времени (60—250 мсек. после выхода из зоны разряда), причем одновременно измерялась относит. конц-ия ионов He₂⁺ с помощью метода титрования добавками O₂ или N₂ (ре-

ф. 1965. 1075

1964

гистрировалось свечение, обусловленное возбужденными ионами O_2^+ и N_2^+ , образующимися при перезарядке). Зависимости интенсивности спектра He_2 и конц-ии He_2^+ от давления симбатны, поэтому сделан вывод, что He_2 образуется при рекомбинации иона He_2^+ с электроном. Зависимость интенсивности спектра He^* от давления имеет другой характер, что указывает на образование He^* при реакциях частиц, отличных от He_2^+ . Предполагается, что He^* образуется при рекомбинации ионов He^* , присутствующих в области ПС, а не ионов He_2^+ .

В. Скурат

1964

$\{ \text{He}$
 He^+
 He_2^+

Collins C. B., Robertson W. W.

J. Chem. Phys., 1964, 40, 201 (№ 3)

Спектры, возбужденные в после-
свечном свете.

Изучением спектров разряда
Лазер, наблюдающиеся в после-
свечном He.

Das

He

Collins C. B., Robertson W. W.

J. Chem. Phys., 1964, 40, 2202 (№ 8)

Росси́йское издани́е. I. Атомный
спектр.(см. III He₂)

He

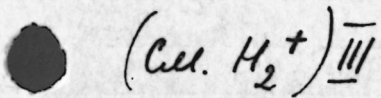
кв.-мех.
расчет

Сонгау Н.

у. chem. Phys.,
41, N 5, 1336

1964

Ур-ние шредингера для
мол-л. III. Расчет энергии
основного состояния
посредством жетрандиз-
ции.



He

Crossley. R. J. S.

1964

A-148

(A, y)

"Proc. Phys. Soc." (L.)

1964, 83, N533, 379-389

He

1964

6 Д9. Одноконфигурационные расчеты возбужденных состояний гелия, Davidson Ernest R. Single-configuration calculations on excited states of helium. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 3, 656—658 (англ.)

Методом самосогласованного поля Рутана вычислены потенциалы ионизации ϵ_n возбужденных состояний $1s2p^3P$, $1s2p^1P$, $1s3p^3P$, $1s3p^1P$, $1s4p^3P$, $1s4p^1P$, $1s3d^3D$, $1s3d^1D$, $1s4d^3D$, $1s4d^1D$, $1s4f^3F$, $1s4f^1F$ атома He. Отличие величин ϵ_n от эксперим. значений не превышает 1%. В качестве базисных ф-ций при вариационном расчете использовались ф-ции Слейтера, число которых составляет: 4 для $1s$ -оболочки, 10 для $4p$ -оболочки и 6 для всех остальных рассмотренных оболочек. С. Ветчинкин

ф. 1965. 6 Д

1964

He 17 Б8. Одноконфигурационные расчеты возбужденных состояний гелия. Davidson Ernest R. Single-configuration calculations on excited states of helium. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 3, 656—658 (англ.)

С использованием вариационного принципа в рамках метода самосогласованного поля получены наилучшие одноконфигурационные волновые функции, позволяющие, в частности, вычислять энергии не слишком высоких возбужденных уровней с точностью 0,5—1%. Этот метод существенно лучше согласуется с эксперимен. данными, чем, напр. теория псевдовозмущений, использованная для тех же расчетов. Метод может быть использован для изучения возбужденных состояний водорода. А. Зимин

X. 1965. 17

De Heer, F. J. Van den Bos, J.

1964₂

Physica 30, 1964, 741-744.

Возбуждение гелия новым
лучом.

$\text{He}^+ + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^+$
при кинетической энергии менее
5 и 100 keV. ●

He^v

1964

Тонкая
структура
уровней

2 Д8. Тонкая структура уровней n^3P атома He⁴
Descoubes, Jean-Pierre. Structure fine des niveaux n^3P de He⁴. «C. r. Acad. sci.», 1964, 259, № 2, 327—330 (франц.)

Методом пересечения уровней измерена тонкая структура первых состояний типа n^3P атома He⁴. Возбуждение атомов производилось электронным ударом; направление скорости электронов составляло прямой угол с направлением постоянного магн. поля H_0 . Регистрировалась разность интенсивностей плоско-поляризованных компонент испускаемого вдоль магн. поля света, электрич. векторы которых составляли углы соответственно α и $\alpha + \pi/2$ с направлением скорости налетающих электронов. При $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi/2$ регистрировались кривые поглощения, а при $\alpha = \pi/4$ и $3\pi/4$ — кривые дисперсии. Определены точки пересечения (при изменении H_0) подуровней $(J, M) = (2, 2)$ с $(1, 0)$ и $(2, 1)$ с $(1, -1)$. Вычислены расстояния между компонентами тонкой

ф. 1965.28

структуры $^3P_1—^3P_2$ и $^3P_0—^3P_1$, равные соответственно (в Мгц): для ^{33}P $658,55$ и 7740 ± 980 ; ^{43}P $270,7 \pm 0,2$ и 2970 ± 300 ; ^{53}P $135,5 \pm 0,2$ и 1500 ± 200 ; ^{63}P $78,24 \pm 0,4$ и 860 ± 200 . По ширине линий поглощения определены времена жизни атома в указанных состояниях n^3P , равные соответственно (в 10^{-7} сек): $0,90 \pm 0,10$; $1,67 \pm 0,17$; $2,06 \pm 0,3$; $2,7 \pm 0,5$.

Т. Ребане



He⁴

1964

— 9 Б12. Тонкая структура уровней n^3P атома He^4 .
Descoubes Jean-Pierre. Structure fine des niveaux n^3P de ^4He . «C. r. Acad. sci.», 1964, 259, № 2, 327—330 (франц.)

Методом пересечения уровней измерена тонкая структура первых состояний типа n^3P атома He^4 . Возбуждение атомов производилось электронным ударом; направление скорости электронов образует прямой угол с направлением постоянного магнитного поля H_0 . Регистрировалась разность интенсивностей плоскополяризованных компонент испускаемого вдоль магнитного поля света, электрич. векторы которых составляли углы соответственно α и $\alpha + \pi/2$ с направлением скорости налетающих электронов. При $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi/2$ регистрировались кривые поглощения, а при $\alpha = \pi/4$ и $3\pi/4$ — кривые дисперсии.

x. 1965. 9

Определены точки пересечения (при изменении H_0) подуровней $(J, M) = (2, 2)$ с $(1, 0)$ и $(2, 1)$ с $(1, -1)$. Вычислены расстояния между компонентами тонкой структуры $n^3P_1 - n^3P_2$ и $n^3P_0 - n^3P_1$ (в $M\mu$), равные соответственно: для 3^3P $658,55$ и 7740 ± 980 ; 4^3P $270,7 \pm 0,2$ и 2970 ± 300 ; 5^3P $135,5 \pm 0,2$ и 1500 ± 200 ; 6^3P $78,24 \pm 0,4$ и 860 ± 200 . По ширине линий поглощения определены времена жизни атома в указанных состояниях n^3P , равные соответственно (в 10^{-7} сек.): $0,90 \pm 0,10$, $1,67 \pm 0,17$, $2,06 \pm 0,3$, $2,7 \pm 0,5$.

Т. Ребане

He
ссылка

У 11 Д255. Спектроскопическое исследование импульс-ного высокочастотного разряда в гелии. Фуголь И. Я., Пахомов П. Л., Резников Г. П. «Оптика и спектроскопия», 1964, 16, № 6, 941—948 1964

Исследована кинетика свечения гелиевой плазмы в импульсном безэлектродном ВЧ-разряде в области давлений 0,1—40 мм рт. ст. при различных мощностях и т-рах. Убывание интенсивности линий за время ВЧ-импульса при 290° К объяснено на основе механизма атомной рекомбинации. При понижении т-ры газа до 77° К обнаружены особенности высвечивания и наличие интенсивного послесвечения у ряда линий спектра HeI. Для объяснения послесвечения при 77° К привлечен процесс диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов, в образовании которых существенную роль играют метастабильные 2^3S атомы He. Определены временные константы свечения гелиевой газоразрядной плазмы. Библ. 12 назв.

ф. 1964. 118

1964

Ив. мур.
расчет
агонов
(He)

5 Б13. Радиальная корреляция в гелии. Handler George S., Joy Hubert W. Radial correlation in helium. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 8, 2408 (англ.)

Исследована возможность представления электронной волновой функции основного состояния атома He в виде линейной комбинации парных произведений одноэлектронных функций Слейтера. Вариационным методом рассчитаны энергии основного состояния He и его волновой функции, включающей 3 и 4 члена. С учетом 8 и 11 вариационных параметров получены значения энергии —2,8781 и —2,8788 ат. ед. соответственно. Эти величины несколько меньше, чем в расчетах по методу Хиллерааса.

С. Ветчинкин

x.1965.5

1964

He
 W. J. Zung,
 Parr

Approximate Hartree-Fock wave function for the helium atom. Joseph T. Zung (Coll. of William and Mary, Williamsburg, Va.), and Robert G. Parr. *J. Chem. Phys.* 41(9), 2888-92(1964). The given function is a good anal. approxn. to the Hartree-Fock orbital of the He atom, giving an energy of -2.86167 a.u., vs. the exact Hartree-Fock energy, -2.86168 a.u. Differences between this and other approx. orbitals, and the exact H.-F. orbital, are discussed. The orbital form due to Green is recovered as a special case. It also yields the energy -2.86167 a.u., but it gives less accurate values for $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$, $\langle r^3 \rangle$, and $\langle r^4 \rangle$ than are given by the generalized form.

RCJQ

C.A. 1964. 61. 12
 13887 f

He⁴

Hel. cong.

The ground state of liquid helium-four. William Lauchlin
McMillan (Univ. of Illinois, Urbana). *Univ. Microfilms* (Ann
Arbor, Mich.), Order No. 64-8414, 49 pp.; *Dissertation Abstr.*
25(2), 1285(1964). SNDC

C.A. 1964-61-12
13893 c

1964

He
 kb. sup.
 parey

A survey of Gaussian two-electron functions. I. The ground state of the helium atom. J. V. L. Longstaff and K. Singer (Univ. London). *Theoret. Chim. Acta* 2(4), 265-80(1964)(in English). The energy of the ground state of He is calcd. according to the variation method with trial functions formed from a no. of different types of linear combinations of Gaussian functions. These functions are compared with respect to (a) their convergence toward the exact wave function with increasing no. of linear terms, (b) the effectiveness of different kinds of correlation functions, and (c) numerical labor. RCTC

C.A. 1964. 61. 12
 13887e

He

1964

Д 6 Д8. Исследование гауссовых двухэлектронных волновых функций. I. Основное состояние атома гелия. Longstaff J. V. L., Singer K. A survey of gaussian two-electron functions. I. The ground state of the helium atom «Theoret. chim. acta», 1964, 2, № 4, 265—280 (англ.; рез. франц., нем.)

Рассчитана энергия основного состояния атома He вариационным методом с использованием волн. ф-ций, представляющих линейные комбинации гауссовых ф-ций. Исследованы сходимость ф-ций при увеличении числа членов, эффективность различных корреляционных членов и методы численных расчетов. Исследование предпринято с целью использования полученных волн. ф-ций двухэлектронных систем в сложных молекулярных системах.

А. Зимин

ф. 1965. 69

He

Bsp-10029-x

1964

Machacek M
Scherr CW

Te, parent

p-3151-5 2

He⁻

Минн F. L.

1964

Diss. Abstr., 25, 12, 869

Одно-цифровое вариаци-
онное расчение трех-
мерных сечений:
H₃, Li-атом, He⁻.



He Richards H. L. 1964
Diss. Absts, 1964, 24, N10, 4012

Angular dependence of the
Scattering of metastable helium
atoms in helium and neon

He
смет

1964

22 Б14. Исследование спектра гелия методом электронного удара с помощью аппаратуры с высокой разрешающей способностью. Skerbele Ausma M., Lassetre Edwin N. Higher-resolution study of the electron-impact spectrum of helium. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 5, 1271—1275 (англ.)

Описан источник электронов с электростатич. анализатором скоростей до рассеяния. Прибор применен к исследованию неупругого рассеяния вперед электронов с энергиями 250, 300 и 350 эв на атомах гелия. Малая ширина (в энергетич. шкале) электронного пучка позволила разделить потенциалы возбуждения гелия 5^1P - и 6^1P -состояний, различающихся на 0,17 эв. Более точно определены потенциалы возбуждения, соответствующие состояниям гелия 2^1S , 2^1P , 3^1P , 4^1P . Е. Пшеничнов

к. 1964 №22

1964

He

Смелов

8-Д29. Исследование спектра гелия методом электронного удара с помощью аппаратуры с высокой разрешающей способностью. Skerbele Ausma M., Lassettre Edwin N. Higher-resolution study of the electron-impact spectrum of helium. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 5, 1271—1275 (англ.)

Описан источник электронов с электростатич. анализатором скоростей. Эта аппаратура позволяет произвести селекцию по скоростям электронного пучка до рассеяния. Прибор применен к исследованию неупругого рассеяния электронов под углом $\sim 0^\circ$ на атомах гелия.

ф. 1964. 88

Эксперименты проводились с начальными энергиями электронов 250, 300 и 350 эв. Ширина (в энергетич. шкале) электронного пучка была такой, что оказалось возможным разделить потенциалы возбуждения гелия в 5^1P - и 6^1P -состояния, различающиеся на 0,17 эв. Более точно, чем ранее, определены потенциалы возбуждения, соответствующие состояниям гелия 2^1S , 2^1P , 3^1P , 4^1P . Для серии $1^1S - m^1P$ ($m=1, \dots, 5$) определены силы осцилляторов. Получено хорошее согласие с результатами Далгарно и Стюарта.

Е. Пшеничнов

Ne, He (Te) № 2327 1964

Simpson J.A., Mielczarek S.R.,

Cooper J.,

J. Opt. Soc. America, 1964, 54,

112, 269-270

Есть

1964

10

ЕСТЬ ОРИГИН.

1964

X-174

He

и. мер.
равн.

© 7Д23. Расчет атомов гелия и лития в адиабатическом приближении. Веселов М. Г., Лабзовский А. Н., Штофф А. В. «Тр. Комис. по спектроскопии. АН СССР», 1964, вып. 1, 72—80.

Проведено численное интегрирование ур-ний для ряда состояний атомов гелия и лития в адиабатич. приближении с учетом обмена. Вычислены вероятности соответствующих оптич. переходов. Произведено сравнение полученных термов и волн. ф-ций с результатами расчетов по методу Хартри—Фока.



ф. 1965. 7А

1965

He⁺⁺₂

W. B. W. exp. part.

Some excited states of He₂⁺⁺: mixed basis-set calculations. J. C. Browne (Univ. of Texas, Austin). *J. Chem. Phys.* 42(4), 1428-31(1965)(Eng). Quantum-mech. calcs. were made which yield approx. potential curves for the lowest ¹Σ_u⁺, ³Σ_u⁺, and ³Σ_g⁺ states and the 1st excited ¹Σ_g⁺ state of He₂⁺⁺. The ³Σ_g⁺ and ³Σ_u⁺ states exhibit no min. in their computed potential curves, but the ¹Σ_u⁺ and (¹Σ_g⁺)^{*} states are bound. Rigorous lower bounds of 0.29 and 0.24 ev. are found for D_e of ¹Σ_u⁺ and (¹Σ_g⁺)^{*}, resp. The probable errors in these D_e are <0.1 ev. RCJQ

C.A. 1965. 62. 7
7242 ab.

1965

He

Inelastic scattering of electrons by helium. G. E. Chamberlain (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.) and H. G. M. Heidman. *Phys. Rev. Letters* 15(8), 337-8(1965)(Eng). Resonances in the inelastic scattering of electrons by He were studied at 19.3-58.2 ev. The cross section of the 2^3S is due almost entirely to resonance structures. There is a steplike rise in the 2^3S and 2^1S excitation cross section at the threshold. Above this, resonance structures are assocd. with the neg.-ion states from the $n = 3, 4$, and 5 levels of He. Resonance structure is shown in the 2^3S , 2^1S , and 2^3P loss curves due to the neg. ion states at 57.1 and 58.2 ev. Lilyan S. Mastrolia

C.A. 1966.64.1
27c

He

Li

(8)

1965

6 Д21. Расчет некоторых возбужденных состояний He и Li. Cook D. B., Murrell J. N. Calculation on some excited states of helium and lithium. «Molec. Phys.», 1965, 9, № 5, 417—425 (англ.)

Вычислена энергия E перехода из основного в некоторые возбужденные синглетные и триплетные состояния He, а также Li. Обсуждается отличие Δ величины E от значения, найденного по ф-ле Ридберга (водородоподобный атом). Расчет произведен в одноэлектронном приближении. В качестве волн. ф-ции возбужденного электрона использованы водородоподобные ф-ции; рассмотрены различные представления волн. ф-ции остова. Найдено, что для s -термов значения E близки к экспе-

ф. 1966. 68



Efficient visible injection electroluminescence from *p-n* junctions in $\text{ZnSe}_x\text{Te}_{1-x}$.
 Appl. Phys. Letters, 1965, 7, N 6, 146—148.

Эффективная инжекционная электролюминесценция в *p-n* переходах в $\text{ZnSe}_x\text{Te}_{1-x}$. С. Ветчинкин

рим. величинам только в том случае, если при расчете учитывается изменение состояния остова при переходе. Изменение энергии корреляции меньше, чем изменение энергии, связанное с поляризацией остова. Для *p*-термов вклады кулоновского, обменного и корреляционных взаимодействий в величину Δ сопоставимы друг с другом. Для *d*-термов основной вклад в величину Δ вносит изменение корреляции оптич. электрона с остовом.

1965

He⁻
Hg⁻
mercur.
yobur

Identification of energy levels of negative ions. U. Fano and J. W. Cooper (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *Phys. Rev.* 138(2A), 400-2(1965)(Eng). Levels of He⁻ at 57.1 and 58.2 ev. and of Hg⁻ at 4.0₇, 4.2₉, and 4.8₉ ev. are identified spectroscopically as $2s^2 2p\ ^2P$, $2s^2 2p^2\ ^2D$, $6s6p^2\ ^4P_{1/2,3/2,5/2}$, resp.

The identification combines elements of spectroscopy and collision theory.
RCPJ

+1
C.A. 1965. 62-11
12450h-12451a

7

1965

Continuous representations in the statistical theory of electronic energies. The self-consistent field. George S. Handler (Tufts Univ., Medford, Mass.) and Sidney Golden. *J. Chem. Phys.* 42(4), 1290-3(1965)(Eng). Calcns. were carried out for He (1S and 1S), Be $^{2+}$ (1S), Be(1S), and Ne(1S). Binding energies are $\sim 6\%$ greater than exptl. values. No shell structure in electron d. was obtained, which reflects an inadequacy of the theory in approximating such properties. The ds. obtained gave relatively good estimates of the mean values of r^n , $-2 \leq n \leq +2$

RCJQ

He

Be $^{2+}$

Be

Ne

Wb. msp.

pairs

n 4 up

C.A. 1965.62.7

71258



1965

18703

IDENTIFICATION OF ENERGY LEVELS OF
NEGATIVE IONS. U. Fano and J. W. Cooper (National
Bureau of Standards, Washington, D. C.). Phys. Rev., 138:
A400-2 (Apr. 19, 1965).

Levels of He^- at 57.1 and 58.2 ev and of Hg^- at 4.0, 4.2,
and 4.8 ev are identified spectroscopically as $2s^2 2p^2 P$,
 $2s 2p^2 {}^2D$, $6s 6p^2 {}^4P_{3/2, 1/2, 1/2}$, respectively. The identifica-
tion procedure, which combines elements of spectroscopy
and collision theory, is described. (auth)

NIA-1965-19-10

12 Д15. Волновые функции возбужденных состояний нейтрального гелия. Green Louis C., Kolchin Eleanor K., Johnson Norma C. Wave functions for the excited states of neutral helium. «Phys. Rev.», 1965, 139, № 2A, 373—378 (англ.)

1965

Вариационным методом Ритца рассчитаны энергия и волн. ф-ции основного и $1S, 3S, 1P, 3P, 1D, 3D$ возбужденных состояний атома He. Рассмотрены термы, соответствующие возбуждению электрона в состояния, характеризующиеся главными квантовыми числами $n \leq 9$ для S -термов и $n \leq 8$ для P - и D -термов. Пробная волн. ф-ция представлена в виде ряда взаимодействующих конфигураций, составленных из ф-ций Слейтера. Общее число конфигураций равно 50 для состояния 1^1S , 42 для 2^1P и 2^3P , 7 для 5^3S , 8 для 6^3S , 9 для 7^3S , 4^1P и 4^3P . Погрешность в оценке нерелятив. значения энергии возбужденных состояний составляет 10^{-5} — 10^{-6} *ридберг*; достигнутая точность несколько выше, чем в аналогичных расчетах Пекериса (РЖФиз, 1963, 1Д9). Вместе с тем, погрешность в оценке энергии основного состояния относительно велика (0,000684 *ридберг*). С. Ветчинкин

He

(6_i)

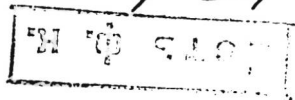
ф. 1965. 12 А

XI - 3025

(1965)

He (mat. used.)

Goldfarb L.J.B., Hug A.,
Helv. Phys. Acta,
1965, 38, No, 541-50



HO

He

R. M. St. John, Tzu Wei Na ¹⁹⁶⁵

J. Opt Soc of America 1965, V55
N4 p. 426 -

Взаимные интересы в
своих отношениях.

He
spee .

Madden R.P., Codling K. 1965.

Astrophys. J., 1965, 141, 52, 364-375.

Объяснение возд. содержания
в реаним

1965

4 Д70. Идентификация энергетических уровней отрицательных ионов. Fano L., Cooper J. W. Identification of energy levels of negative ions. «Phys. Rev.», 1965, 138, № 2A, 400—402 (англ.)

Большое число резонансов, наблюдавшихся при рассеянии медленных электронов на атомах Hg и инертных газов, объясняется обратимым образованием в процессе столкновения отрицат. ионов по схеме $e + A \rightarrow A^- \rightarrow e + A$. При идентификации энергетич. уровней, соответствующих наблюдаемым резонансам при 57,1 и 58,2 эв в случае He и при 4,07; 4,29 и 4,89 эв в случае Hg, учет того, что четность и полное квантовое число I системы до и после столкновения должны оставаться неизменными, позволяет ограничить число исходных состояний $e + A$ следующими: $3S_{1/2}$, $2P_{1/2, 3/2}^0$, $2D_{3/2, 5/2}$, $2F_{5/2, 7/2}^0$ и т. д. Далее энергетич. соображения позволяют отыскать конфигурацию электронных оболочек (в случае He⁻ — оболочка из трех электронов с $n=2$) и термы. Указанные выше резонансы соответствуют $2s^2 2p^2 P$ - и $2s 2p^2 2D$ -состояниям He⁻ и $6s 6p^2 4P_{1/2, 3/2, 5/2}$ -состояниям Hg⁻.

Ю. Беляев

Физ. журн.

Иониз.

ф. 1966. 42

1965

He

измер.
расчет

7 Д24. Прямое вычисление матрицы плотности первого порядка для атомов. Hall G. G., Jones L. L., Rees D. The direct calculation of the first-order density matrix for atoms. «Proc. Roy. Soc.», 1965, A283, № 1393, 194—202 (англ.)

Показано, что задача расчета матрицы плотности первого порядка может быть сведена к решению одноэлектронных уравнений. Указанные уравнения сформулированы в общем случае и решены аналитически для основного состояния атома He, триплетного 3S -состояния атома He и для основного состояния атома Li. С помощью найденных матриц плотности рассчитаны средние значения целого ряда одноэлектронных операторов, которые хорошо согласуются с данными прецизионных расчетов. Указывается, что собств. состояния матрицы плотности представляют собой т. наз. натуральные орбитали, причем эти орбитали с точностью до членов первого порядка включительно совпадают с молекулярными орбиталями неограниченного метода Хартри—Фока. Сформулирован-

ф. 1965. 7Д

ная теория включает произвольный параметр (постоянную экранирования), который можно определить из условия стационарности средних значений операторов относительно его вариаций; при этом вклад в среднее значение от приближения первого порядка для матрицы плотности обращается в нуль.

В. Быховский

1965

He
-сдвиг
12 Д319. Распределение интенсивности в хопфилдовском сплошном спектре гелия, измеренное по фотоионизации Ar, Kr и Xe. Metzger P. H., Cook G. R. Flux distribution of the Hopfield helium continuum from the photoionization of Ar, Kr, and Xe. «J. Opt. Soc. America», 1965, 55, № 5, 516—520 (англ.)

Измерено распределение абс. интенсивности излучения импульсного разряда в капилляре с гелием в области сплошного спектра Хопфилда (600—1000 Å). Измерения производились с помощью ионизационной камеры, заполняемой Ar, Kr или Xe, и снабженной фотокатодом. Одновременно регистрировались фототок, пропорциональный пропусканию газа и ионизационный ток, про-

ф. 1965. 128

1

порциональный скорости образования ионов в камере. Комбинирование этих данных, с учетом 100% квантового выхода ионизации для области между ионизационным потенциалом и сериальным пределом для автоионизованных состояний, дает возможность определить абс. интенсивность излучения, попадающего в камеру, и вычислить поперечное сечение фотоионизации для Ag, Kr, Xe. Для ионизационного континуума и для ряда переходов на уровни, лежащие между ионизационными пределами Ag, Kr, Xe, рассчитаны силы осцилляторов. Библи. 21 назв.

He

12 Д18. Корреляционные орбитали для возбужденных состояний He и H⁻. Pritchard H. O., Wallis Anthony. Correlated orbitals for excited states of He and H⁻. «J. Chem. Phys.», 1965, 42, № 10, 3548—3552 (англ.)

Рассчитан ряд возбужденных *msns*- и *msnp*-состояний атома He ($m=1, 2$, $n=2, 3$), а также некоторые ($m=n=2$) состояния H⁻. Расчеты проводились с волн. ф-циями, включавшими в себя множители типа $(\zeta r_{12})^k \exp(+c\zeta r_{12})$. Здесь ζ и c — параметры. Результаты расчетов приведены в таблице вместе с эксперим. данными. Исследована корреляция между $\langle E \rangle$, $\langle 1/r \rangle$ и $\langle 1/r_{12} \rangle$ для $1s2s(^3S)$ -состояния He.

Е. Пшеничнов

Ф. 1965. 12А



He 5 D25. Новые автоионизационные уровни в гелии. R u d d M. E. New autoionizing levels in helium. «Phys. Rev. Letters», 1965, 15, № 14, 580—581 (англ.)

Более ранние измерения автора («Phys. Rev. Letters», 1964, 13, 503), исследовавшего тонкую структуру энергетич. спектра эмиттированных при автоионизации возбужденного He электронов, расширены и уточнены с аппаратом более высокого разрешения. Наблюдались электроны, эмиттированные под углом 160° к первоначальному ионному пучку; давление He 5—6 μ рт. ст., энергия ионов H^+ или H_2^+ 75 кэв. Пик около 62,15 эв отнесен к терму $(2p^2)^1S$, рассчитанному, но еще не наблюдаемому пик вблизи 63,65 — терму $sp23^+$, идентифицированному ранее, что позволило выполнить калибровку измерений с точностью 0,05 эв. Серии $(2sns)^1S$ и $(2snp)^3P$, первые члены которых уже наблюдались, прослежены более полно (вплоть до $n=5$). Указывается, что отнесение термов этих серий облегчается тем обстоятельством, что триплетные термы не возбуждаются при бомбардировке протонами, но возбуждаются при бомбардировке ионами H_2^+ . Результаты измерений подробно табулированы.

В. Быховский.

1965

XI-2273

р. 1966. 52

Bp-6076-X

1965

He

(расч)

4 Д34. Состояния $2^{1,3}P$, $3^{1,3}P$ и $4^{1,3}P$ атома He и состояние 2^1P иона Li^+ . Schiff B., Lifson H., Pekeris C. L., Rabinowitz P. $2^{1,3}P$, $3^{1,3}P$, and $4^{1,3}P$ states of He and the 2^1P state of Li^+ . «Phys. Rev.», 1965, 140, № 4A, 1104—1121 (англ.)

Вариационным методом рассчитаны синглетные и триплетные $2P$ -, $3P$ - и $4P$ -состояния атома He и 2^1P -состояние иона Li^+ . При расчете использовались волн. ф-ции типа Брейта, число параметров в ф-циях достигало 560. Учтены поправки на движение ядра и релятив. поправки порядка $\alpha^2 Ry$. Точность расчета превышает точность эксперимента. Приведены также численные значения математич. ожиданий различных операторов. В приложениях даны методы вычисления интегралов с ф-циями, содержащими зависимость от углов. Л. Лабзовский

ф. 1966. 48



Dp - 6076 - X 11965

He

Schiff B., Lifson H.,
Pekeris C. L., Rabinowitz P.

Phys. Rev., 140 (4A), 1104-21.

$2^1 3p$, $3^1 3p$, and $4^1 3p$
states of He and the $2^1 p$
state of Li^+



He

1 Д36. Разрушение атомных частиц электрическим полем и электронным ударом. Смирнов Б. М., Чибисов М. И. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 1965, 49, № 3, 841—851

(A)

Рассмотрена задача о распаде атомной частицы в постоянном однородном электрич. поле. Получено асимптотически точное (в пределе малой напряженности поля) выражение для вероятности отрыва электрона в единицу времени. Найденный результат используется для определения энергии связи электрона в отрицат. ионе гелия по экспериментально измеренной зависимости времени жизни иона от напряженности внешнего электрич. поля, в котором он распадается. Энергия сродства атома гелия к электрону оказывается равной $0,06 \pm 0,005$ эв. Вычислено сечение разрушения отрицат. иона электронным ударом, в результате которого освобождается s-электрон. При этом предполагается, что

ф. 1966

18

1965

2750-2572

11-1

сечение развала велико по сравнению с характерным размером отрицат. нона и что налетающий электрон движется по классич. орбите. Эти предположения оправдываются полученным результатом. Рассмотрены два механизма разрушения отрицат. нона: «выдавливание» слабо связанного электрона отрицат. нона статич. полем налетающего электрона и разрушение за счет изменения во времени поля налетающего электрона. Показано, что при больших скоростях столкновения второй механизм дает результат, соответствующий борновскому приближению. Зависимость сечения разрушения H^- от скорости налетающего электрона сравнивается с результатами других расчетов.



1966

U.P.

Solution of the two-electron problem in quantum mechanics by direct determination of the natural orbitals. III. Refined treatment of the helium-atom and the helium-like ions. R. Ahlrichs, W. Kutzelnigg, and W. A. Bingel (Univ. Goettingen, Ger.). *Theoret. Chim. Acta* 5(4), 289-304(1966)(Eng); cf. CA 59, 10773a. Natural orbitals (NO) and natural expansion coeffs. for the ground states of the He atoms and some iso-electronic ions are calcd. directly as numerical self-consistent solutions of integro-differential equations derived previously. These new applications differ from the previous ones insofar as larger and more flexible sets as 1-electron functions are used and as certain simplifications are no longer made. The wave functions and energies obtained compete with the best configuration interaction results known and are obtained in an easier and more

C. A. 1966. 65.8

11541 def

straightforward way. Plots of the NO's show clearly that different NO's of the same state are localized in the same region of space. Special attention is given to the problem of the convergence of the natural expansion and to the role of the correlation potential, which is defined as the difference between the effective 1-electron Hamiltonians for the 1st (strongly occupied) NO and the Hartree-Fock (HF) orbital, resp. If this correlation potential is taken into account by using an iterative procedure better approxns. to the first NO than the HF orbitals are obtained. If only the energy is considered, it is, except for the H^- -ion, irrelevant whether or not the difference between the 1st NO and the HF orbital are ignored. 35 references.

RCTC

He I

He II

1966

12 Д171. Получение спектральных линий He I и He II с помощью возбужденных ионов He^+ , ускоренных с помощью генератора Ван-де-Граафа. Bashkin S., Beauchemin G., s. j. Production de raies spectrales de He I et He II par l'excitation d'atomes He^+ accélérés au moyen d'un Van de Graaff. «Canad. J. Phys.», 1966, 44, № 7, 1603—1607 (франц.; рез. англ.)

Пучок ускоренных ионов He^+ , проходящий через узкую щель, использован для получения возбужденных атомов He I и He II. Наблюдались три спектральные линии He I и шесть He II. Три линии He II обнаружили своеобразные изменения интенсивностей.

ф. 1966. 12Д

He

1966

/ Correlation effects in atoms. I. Helium. F. W. Byron, Jr., and C. J. Joachain (Univ. of California, Berkeley). *Phys. Rev.* 146(1); 1-8(1966)(Eng). The variational-perturbation method has been applied to the study of correlation effects in the He atom. Starting from the Hartree-Fock Hamiltonian as zeroth-order approxn., the correlation energy is evaluated through 5th order in perturbation theory. With a 10-parameter trial wave function, $E_{\text{corr}} = -0.0419$ at. units, which differs from the exact value by 0.4% and shows the rapid convergence of this type of Hartree-Fock perturbation theory. Comparison is also made with similar calcs. using Hartree or hydrogenic Hamiltonians as starting points.

RCPJ

C. A. 1966. 65. 2

1586 g

1966

6 Д15. Различные орбитали для различных спинов. Основное синглетное S-состояние атома гелия. Chong D. P. Different orbitals for different spins. Singlet S ground state of helium. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 9, 3317—3318 (англ.)

Так называемый «неограниченный» метод Хартри — Фока, использующий различные радиальные ф-ции для состояний, отличающихся лишь проекцией спинов электронов, применен для основного синглетного состояния атома He. Волн. ф-ция атома He представлена в виде разложения по натуральным орбиталам, число которых в данном случае равно 2. Натуральные орбитали, в свою очередь, разложены по базисной системе одноэлектронных ф-ций Шалла и Лёвдина. Получающаяся система алгебраич. ур-ний решается численно, число базисных ф-ций достигает 6. Метод дает примерно 39% полной энергии корреляции и 94% энергии радиальной корреляции.

Л. Лабзовский

09. 1967. 68

3 He

1966

—49400g Propagation of nuclear spin polarization in stationary and moving ^3He . G. Escher and P. Turowski (Tech. Hochsch., Karlsruhe, Ger.). *Z. Angew. Phys.* 21(6), 500-3(1966)(Ger). Degrees of polarization were calcd. according to Colegrove, *et al.* (CA 60, 1256b). The polarization of the ^3He nuclear spin generated by optical pumping was propagated from the polarization cell to attached spaces largely free from loss if the polarization cell and attached spaces were kept in a sufficiently homogeneous uniform magnetic field. Using the earth's field for generating and carrying polarization resulted in relatively low degrees of polarization. At 0.4 torr, strong polarization was seen in the secondary cells of both stationary and moving systems, while at 1.4 torr polarization was no longer seen in the moving system.

C. McGehee

C.A. 1967: 66.12

He

Garcia J. D.

1966

Phys. Rev., 1966, 147, n 1,
66-68.

Радиационные поправки к
энергиям атомов и
молекул.

(см. He)

He

1966

Near ultraviolet-visible atomic absorption spectra of the noble gases. J. A. Goleb (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Anal. Chem.* 38(8), 1059-61(1966)(Eng). A schematic diagram of the app. for at. absorption measurement by the Schueller-Gollnow water-cooled hollow-cathode emission tube is given. The at. absorption and absorption spectra of He, Ne, Ar, Kr, and Xe are given. Of 300 spectral lines checked, $\sim 1/3$ showed significant absorption. At. absorption can be used for the detn. of noble gases. The sensitivity is comparable to sensitivities reported for common impurities employing routine at. absorption techniques.

F. Schossberger

+4

C.A. 1966. 65.9

130308



1966

V 4 Д224. Атомно-абсорбционные спектры инертных газов в видимой и ближней ультрафиолетовой области. Golub J. A. Near ultraviolet-visible atomic absorption spectra of the noble gases. «Analyt. Chem.», 1966, 38, № 8, 1059—1061 (англ.)

С применением разряда в сквозном полом катоде в качестве поглощающей ячейки измерено поглощение ряда линий в спектрах He, Ne, Ar, Kr и Xe, начинающихся с нижнего возбужденного уровня. Источником света служил разряд в охлаждаемом водой полом катоде с силой тока 30 ма при давлении инертного газа 2 мм рт. ст. Силу тока разряда в сквозном полом катоде поддерживали равной 75 ма, а давление газа — 1,0 (He), 0,8 (Ne), 0,5 (Ar, Kr, Xe) мм рт. ст. Из 300 исследованных линий в видимой и ближней УФ-области ~100 линий испытывают при данных условиях заметное поглощение. Наиболее чувствительные в поглощении линии (в Å): He

+4

ф. 1967. 42



3888,65 (51,5), He 5875,62 (45,5), He 6678,15 (28,4), Ne
6402,25 (73,5), Ne 6143,06 (52,3), Ne 6382,99 (45,4), Ar
8115,31 (73,7), Ar 7635,11 (72,6), Ar 8014,79 (59,1), Kr
8059,50 (60,0), Kr 8190,05 (55,5), Kr 7601,51 (52,6), Xe
8231,63 (51,1), Xe 8280,12 (47,1), Xe 8206,34 (31,0).

В скобках указана величина поглощения (в %). Величи-
на относит. стандартного отклонения составляет $\sim 1,7\%$.

Библ. 12.

В. Мосичев

1966

He

He⁻

¹Se

12 Д16. Расчет энергий ¹Se автоионизационных состояний He и H⁻. Holøien E. Energy calculation of ¹Se autoionizing states of He and H⁻. «Proc. Phys. Soc.», 1966, 88, № 2, 538—539 (англ.)

Исправления к статьям РЖФиз, 1958, № 10, 22538; 1959, № 4, 7826.

ф. 1966. 122



1966

He He

Energy calculation of $1S^o$ autoionizing states of He and H^- .
E. Holoien (Univ. of Colorado, Boulder). *Proc. Phys. Soc.*
(London) 88(2), 538-9(1966)(Eng). A serious error was found
in a previous calcn. of the energy of the lowest $1S^o$ autoionizing
state of He and H^- made by Holoien in 1958 using the 20-order
subset in the basis. The error lies in the incorrect root which is
assocd. with the state. New results obtained by reexamn. of the
particular roots assocd. with the 2 lowest autoionizing states are
compared in detail with those obtained by expt. and other
approx. methods. RCPN

C.A. 1966. 65.2
1420a

He

1966

$1S^e$ - состоя-
ние.

4 Д20. Новое исследование $1S^e$ автоионизационного состояния He и H-. Holoien Erling, Midtdal John. New investigation of the $1S^e$ autoionizing states of He and H-. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 10, 3897 (англ.)

Сообщается, что ранее полученные авторами результаты (РЖФиз, 1967, 2Д9) хорошо согласуются с данными работы Барке и Тейлора (РЖФиз, 1967, 1Д44).

ф. 1967. 42

12

Вор - 5460 - V

1966

№ 1

6 Д192. Значения некоторых термов в гелиевой изоэлектронной последовательности. Kelly Raymond L., Booth Roger G. Some term values in the helium isoelectronic sequence. «J. Opt. Soc. America», 1966, 56, № 11, 1639 (англ.)

На электронной вычислительной машине проведена оценка параметров A , B и C для расчета термов в Не-изоэлектронной последовательности (HeI, LiII, BeIII, BIV, CV, NVI, OVII, FVIII, NeIX, NaX, MgXI и AlXII) по экстраполяционной ф-ле вида $T = A + BZ + CZ^2$. Получены численные величины следующих термов: $1s^2^1S$, $2s^1S$, $2s^3S$, $2p^3P$, $3p^3P$, $2p^1P$, $3p^1P$, $4p^1P$, $5p^1P$, $6p^1P$ и $3d^3D$. Для термов $2s^1S$ и $2s^3S$ расчет проводили двумя способами: по ф-ле Акериба $T = (a + bz)z$, параметры a и b определяли заранее по

оп. 1967. 62

14

известным величинам термов данной серии; по интервалам между $2s^1S$ - и $2s^3S$ -термами путем описания их полиномом 2-й степени. При этом получены совпадающие результаты. Для переходов $2s^2S \rightarrow np^1P$, $n=3$ и 4, предсказанные длины волн равны (в Å): 1419,65 и 1092,50 (LiII), 661,45 и 529,97 (BeIII), 380,84 и 288,06 (BIV), 247,14 и 186,24 (CV), 173,05 и 130,16 (NVI), 127,92 и 96,03 (OVII) и 98,34 (FVIII). В. Мосичев

1966

He

Auto-ionizing states in helium. Lester Lipsky and Arnold Russek (Univ. of Connecticut, Storrs). *Phys. Rev.* 142(1), 59-71(1966)(Eng). The validity of the method of diagonalizing a truncated, finite-dimensional submatrix of the Hamiltonian for the calcn. of some properties of some autoionizing states is demonstrated, using projection operators. The truncation procedure is an example of the Feshbach formalism (CA 57, 16056g). It differs from other approaches employing the Feshbach formalism mainly in point of view and in the particular choice of the projection operators. Detailed calcns. using the diagonalization method are carried out for the lowest autoionizing states of He with symmetry $^1S^e$, $^1P^o$, or $^3P^o$. The basis used for the singlet S states is of dimension 42, including all properly antisymmetrized hydrogenic functions with $Z = 2$ for all angular configurations up to $g-g$. For the P states all angular configurations up to $f-g$ are included, resulting in a 55-dimensional basis set.

C.A. 1966. 64.810417 $\frac{1}{2}$ g

The eigenvalues are compared with several different calens. of resonances in electron-He⁺ elastic scattering, and with the observation of these states by optical absorption in He and by inelastic scattering of electrons, protons, and H₂⁺ on He. The eigenvectors represent the doubly excited states after the excitation has occurred and before they decay, so that they can be used to calc. absorption cross sections and lifetimes. The detailed characteristics of the eigenvectors corroborate the classification scheme of Cooper, *et al.* (*Phys. Rev. Letters* 10(12), 518-21(1963)) as far as they have gone. Good agreement is found between the calcd. level structure and the exptl. results.

RCPJ

He

Lotz W.

1966

A8C Accession No. 43169,
Rept. No. JPP-1/49. avail.
Dep. mn, 29 pr.

Ionization potentials of
atoms and ions from He
to Ni. (cu. H)

He

Mittleman M.

1966

Phys. Rev. Letters, 1966, 16,
N 12, 498.

Однократная и двукрат-
ная ионизация He
электронами.

(см. иониза-
ция)

ф. 1966. 87 37

He (ϵ_i)

" X 2189 1966

Peat P.D., Brown R.D.C.

Canad. J. Phys., 1966, 44, 46, 1349 -
-1357 (among)

A simple density matrix approach
to atomic spectra.

Aug 9, 1966, 12 D/18

He

(J)

39-11-2296

1966

The ionization energy of the helium atom. M. J. Seaton (Univ. Coll., London). *Proc. Phys. Soc. (London)* 87(1), 337-9(1966)(Eng). An improved method of calcg. series limits T_∞ is presented: this consists in varying simultaneously T_∞ and the coeffs. in the energy expansion of the quantum defect so as to obtain a least-sqs. fit to observed series term values. Analysis of the 1D , 3D , and 3F series of He using this method gives $T_\infty = 198\,310.74 \pm 0.02 \text{ cm.}^{-1}$, compared with $198\,310.82 \pm 0.05 \text{ cm.}^{-1}$ obtained by Herzberg (CA 54, 14927b), the quoted error estimates being standard deviations in fitting procedures. An independent estimate of $198\,310.77 \pm 0.02 \text{ cm.}^{-1}$ is obtained for the 3F series using a polarization formula. The best est. of T_∞ for He is $198\,310.75 \text{ cm.}^{-1}$, with the error in fitting procedures unlikely to exceed $\pm 0.02 \text{ cm.}^{-1}$ RCPN

C.A. 1966. 64.5

57714

He

ВФ-Х/ -2296

1966

(7)

6 Д23. Энергия ионизации атома гелия. Sea-
 ton, M. J. The ionization energy of the helium atom.
 «Proc. Phys. Soc.», 1966, 87; № 1, 337—339 (англ.)

Предложен уточненный метод определения предель-
 ного значения T_{∞} энергии системы термов (энергии
 ионизации) атома He. Метод состоит в подборе вели-
 чины T_{∞} и коэф. разложения квантового дефекта μ (T)
 по степеням T/R таким образом, чтобы получить наи-
 лучшее согласие энергий ряда термов T_n из ф-лы $T_n =$
 $= T_{\infty} - R(n - (\mu))^{-2}$ с их эксперим. значениями (R — по-
 стоянная Ридберга). С помощью эксперим. данных для
 серий, соответствующих переходам $n'D \rightarrow 2'P$, $n^3P \rightarrow 2^3P$
 и $n^3F \rightarrow 3^3D$, получено значение $T_{\infty} = 198310,74 \pm$
 $\pm 0,02 \text{ см}^{-1}$. Поляризационная ф-ла для серии 3F дает
 $T_{\infty} = 198310,77 \pm 0,02 \text{ см}^{-1}$. Наилучшим значением для
 T_{∞} является величина $198310,75 \text{ см}^{-1}$. Погрешность не
 превышает $0,02 \text{ см}^{-1}$ и связана с использованием ме-
 тода наименьших квадратов. А. Шерстюк

ф. 1966. 62

Физ. 10

539.2

Wentorf R. H. Jr, Darrow K. A.

Semiconducting diamonds by ion bombardment.

Phys. Rev., 1965, 137, N 5A, 1614—1616.

Получение полупроводниковых алмазов под действием
ионной бомбардировки. Библиогр. 12 назв.

He

ВФ-5549-1к

1966

1) Д12. Релятивистские поправки к собственным значениям $2^{1,4}S$ -состояний в изоэлектронном ряду He. Stewart A. L. The relativistic corrections to the eigenvalues of the $2^{1,3}S$ states of the helium sequence. «Proc. Phys. Soc.», 1966, 88, № 2, 311—314 (англ.)

Методом Далгарно и Стюарта вычисляются релятив. поправки (ΔJ_R) к потенциалам ионизации (J) для $1s2s^{1,3}S$ -состояний, отвечающих элементам изоэлектронного ряда He. Полученные выражения для ΔJ_R с точностью до малой поправки совпадают с точными расчетами Пекериса для He и Li^+ . С помощью нерелятив. значений для J , рассчитанных Гартом и Герцбергом, для Be^{2+} , B^{3+} и O^{6+} получено соответственно: 284 740, 490 438 и 1 437 765 $см^{-1}$. Соответствующие эксперим. значения J равны: 284 729, 490 455 и 1 437 660 $см^{-1}$. Е. П.

расчет

J

+5

5549-1к

ф. 1966. 12



1966

A652

7i (H, He, Li, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si,
Cl, Ar, K, Ca, Ti, Fe, Cu, Kr, Xe, Cs)

Стреганов А.Р., Свентицкий Н.С.,

Атомиздат, М., 1966, 899 с

Таблицы спектральных линий нейтральных и
ионизованных атомов.

10

РЖФиз. 1967

Ю

Ф

He

1967
10 Д22. Некоторые свойства атомарного He.
Bell K. L., Kingston A. E. Some properties of atomic
helium. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 90, № 4, 901—907
(англ.)

Методика уточнения теоретич. значений сил осцилля-
торов f_n на основе использования известных значений
сумм вида $S(k) = \sum_n f_n (E_0 - E_n)^k$ (РЖФиз, 1958, № 5,

физич.
св-ва

10364) применяется для расчета различных физич.
свойств атомарного He. Результаты расчетов последних
лет, выполненных различными авторами, позволили ис-
пользовать в качестве исходных данных более точные
теоретич. значения сил осцилляторов некоторых диполь-
ных переходов из основного состояния в состояния
дискретного и непрерывного спектра. Значения сил ос-

ф. 1967. 10

цилляторов, для которых не имеется точных теоретич. данных, получены посредством аналитич. аппроксимации. Для уточнения исходных данных использованы известные значения $S(k)$ при $k=2, 1, 0$, и -1 . Полученные результаты позволили вычислить значения лэмбовского сдвига, средних энергий возбуждения, сечений ионизации при высоких энергиях, показателя преломления для длин волн $600 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 5462 \text{ \AA}$, постоянной Верде для длин волн $600 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 9000 \text{ \AA}$ и постоянной ван-дерваальсовского взаимодействия. Погрешности большинства вычисленных величин, согласно оценке, не превышают 1%, что подтверждается сравнением с имеющимися эксперим. данными. Т. обр., точность полученных авторами значений значительно превышает точность соот-

щих значений, вычисленных ранее этим же

А. И. Шерстюк

He (3S)

(A)

3 Д48. Измерение сродства к электрону атома гелия с помощью фотоотрыва электрона от положительного иона в луче лазера. Brehm B., Gusinow M. A., Hall J. L. Electron affinity of helium via laser photodetachment of its negative ion. «Phys. Rev. Letters», 1967, 19, № 13, 737—741 (англ.)

Установка состояла из источника отрицат. ионов, масс-фильтра, лазера, анализатора электронов по энергиям и системы регистрации электронов. Калибровка шкалы энергий анализатора производилась путем изучения фотоотрыва от отрицат. ионов H^- и D^- с известной энергией связи электрона. Для величины сродства к электрону He(3S) получено $0,08 \pm 0,002$ эв. Величины сечений фотоотрыва при $\lambda = 5145$ Å для образования атомов He в конечных состояниях 3P и 3S соответственно равны $7 \cdot 10^{-19}$ и $5 \cdot 10^{-18}$ см². Г. К.

1987

896-1X

ф. 1968. 3Д

He

(A)

6392e Electron affinity of helium via laser photodetachment of its negative ion. B. Brehm, M. A. Gusinow, and J. L. Hall (Natl. Bur. of Stds., Boulder, Colorado). *Phys. Rev. Lett.* 19(13), 737-41(1967)(Eng). The 1st direct measurement of the electron affinity of He (2^3S) is reported by the technique of energy analysis of electrons photodetached from a beam of neg. He ions by monochromatic (laser) light. With the monochromatic source one expects the electron energy spectrum to show a sharp peak at the appropriate energy-conserving kinetic energy. Transitions from excited ion states and (or) residual excitation left in the neutral atom (or mol.) will consequently appear directly in the electron energy spectrum. The app. consists basically of: ion source, Wien (mass) filter, laser light source, electron energy analyzer, and pulse-counting and control electronics. The affinity of He (2^3S) is 80.0 mv. with ~ 2 mv. probable error. A value of ± 8 mv. is assigned as the error limits at 95% confidence for systematic effects. 9 references.

JDIN

C.A. 1968. 68.2

1967

896-IX

ВФ - 5921 - V

1967

Же

Д) 1 Д19. Использование волновых функций типа функций Экарта для расчета возбужденных состояний двух-электронных атомов. Chong D. P. Eckart-type wavefunctions for excited states of two-electron atoms. «Molec. Phys.», 1967, 12, № 6, 599—600 (англ.)

(5) Представлены результаты численных расчетов низших $1,3P$ -, $1,3D$ - и $1,3F$ -состояний He , Li^+ , Be^{2+} и B^{3+} с помощью волн. ф-ций типа ф-ций Экарта. Получено удовлетворительное согласие между рассчитанными потенциалами ионизации и имеющимися эксперим. данными. Указано, что полученные результаты могут служить основой для сравнения с более трудоемкими расчетами. Волн. ф-ции Экарта могут быть полезны при сравнительном изучении приближенных значений вероятностей перехода.

Е. А. Пшеничнов

09. 1968. 12

17

He

1967

1 Д19. Использование волновых функций типа функций Экарта для расчета возбужденных состояний двух-электронных атомов. Chong D. P. Eckart-type wave-functions for excited states of two-electron atoms. «Molec. Phys.», 1967, 12, № 6, 599—600 (англ.)

Представлены результаты численных расчетов низших $1,3P$ -, $1,3D$ - и $1,3F$ -состояний He, Li^+ , Be^{2+} и B^{3+} с помощью волн. ф-ций типа ф-ций Экарта. Получено удовлетворительное согласие между рассчитанными потенциалами ионизации и имеющимися эксперим. данными. Указано, что полученные результаты могут служить основой для сравнения с более трудоемкими расчетами. Волн. ф-ции Экарта могут быть полезны при сравнительном изучении приближенных значений вероятностей перехода.

Е. А. Пшеничников

расчет

(+3)

09. 1968. 19

He, Ne, Ar, Kr, Xe (смесь ^{118.} 1967)
XI-2624

Cox H. L.

Dissert. Abstz., 1967, 28 (6),
2368.

CA, 1968, 68, N20, 90005m. 10

He

1967

12 Д20. Автоионизация D -состояний He ниже уровня $n=2$ He⁺. Cooper J. W., Ormonde S., Humphrey C. H., Burke P. G. Autoionizing D states in He below the $n=2$ level of He⁺. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 91, № 2, 285—287 (англ.)

Вычислен спектр автоионизационных D -состояний в атоме He ниже уровня $n=2$ в He⁺. Метод определения резонансов основан на приближении сильной связи $1s - 2s - 2p$ -состояний, соответствующих электрону сплошного спектра в поле He⁺. Рассмотрены спиновые состояния $S=0$ и $S=1$ и полный угловой момент системы $L=2$ при энергиях ниже первого порога возбуждения иона He⁺. В окрестности резонансов вычисленные фазы аппроксимировались ф-лой:

99. 1967-12

$$\delta(E) = \delta_0 + \operatorname{ctg} n^{-1} \frac{E_r - E}{1/2\Gamma},$$

на основании которой оценивались положения резонанса E_r и ширина уровня Γ . Сдвиг уровня из-за связи с открытыми каналами не оценивался. Отмечено, что ширины всех резонансов, за исключением 1D -серии, не доступны для прямой эксперим. проверки ($\Gamma \sim 10^{-4} - 10^{-8}$ эв).

В. Д. Объедков

He

1967

11 Д25. Исследование методом пересечения уровней сверхтонкой структуры уровней атома гелия, возбужденного электронным ударом. Descoubes J. P. Mesures, à l'aide de la méthode des croisements de niveaux, de structures hyperfinés de l'hélium excité par choc électronique. «Colloq. internat. Centre nat. rech. scient.», 1967, № 164, 335—344 (франц.; рез. англ.)

Методом пересечения уровней в магн. поле измерена сверхтонкая структура уровней атомов гелия (He^4 , He^3), возбуждаемых электронным ударом. Возбуждение атомов He производилось пучком медленных электронов, скорости которых перпендикулярны направлению внешнего магн. поля. В этих условиях возникает разница в заселенности различных зеемановских подуровней и, кроме того, в зависимости от угла наблюдения излучения изменяется картина интерференции когер. излучения

9. 1967. 112

различных зеемановских подуровней, вырожденных при пересечении (РЖФиз, 1965, 9Д42). Из зависимости интенсивности линейно поляризованного излучения от угла наблюдения для переходов с $\Delta M=1$ и 2 получены тонкая и сверхтонкая структуры уровней и естественная ширина линий излучения следующих низколежащих возбужденных состояний атомов He^4 и He^3 : $(3\div 9)^3P$, $(3\div 7)^3D$. По величине естественной ширины линий излучения вычислены времена жизни указанных состояний.

Ю. Н. Беляев

He

1967

) 5 Д170. Определение абсолютных сечений ионизации атомов гелия, неона, аргона и молекулы ацетилена электронным пучком с энергией электронов от 100 до 2000 эв. Gaudin Albert, Hagemann Robert. Déterminations absolues des sections efficaces totales et partielles d'ionisation de l'hélium, du néon, de l'argon et de l'acétylène, pour des électrons de 100 A 2000 eV.

«J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1967, 64, № 7—8, 1209—1221 (франц.; рез. англ.)

Полное и парциальные эффективные сечения ионизации He, Ne, Ar и C₂H₂ были определены экспериментально в области энергий электронов от 100 до 2000 эв. Полное эффективное сечение ионизации определялось

сп. 1968. 5-я

✓

путем измерения положения, тока ионов, образующихся в камере ионизации при прохождении электронного пучка по траектории известной длины. Электронный ток изменялся от 0,5 до 4 μ а в области энергий электронов 100—2000 эв. Давление в ионизационной камере было порядка $3 \cdot 10^{-5} \div 10^{-4}$ мм рт.ст. Погрешность определения общих эффективных сечений ионизации не превышает 10% и определяется, в основном, погрешностью в определении силы ионного тока. Общее эффективное сечение ионизации складывается из парциальных эффективных сечений образования n -кратно заряженных ионов:

$$\sigma_{\text{общ}} = \sigma_1 + 2\sigma_2 + \dots + n\sigma_n.$$

Относит. кол-во n -кратно заряженных ионов измерялось на масс-спектрометре с разрешением 150. Экспериментально определены абс. значения эффективных парциальных сечений ионизации для однократно и двукратно заряженных ионов He, от однократно до четырехкратно заряженных ионов Ne, от однократно до пятикратно заряженных ионов Ag и для следующих осколков молекулы ацетилена: $C_2H_2^{+}$; C_2H^{+} ; C_2^{+} ; CH^{+} ; C^{+} ; $C_2H_2^{++}$; C_2H^{++} . Согласно приближению Бете—Борна эффективное сечение ионизации σ уменьшается с увеличением энергии ионизирующих электронов и может быть записано:

$$\sigma_n^{+} (n > 1) = \frac{A_n + \lg B_n + E}{E} + \frac{C_n}{E}$$

где первый член соответствует оптически разрешенному переходу (дипольный тип) и второй член — оптически запрещенному переходу (квадрупольный тип). Постоянная A соответствует относит. вероятности дипольного перехода, C — относит. вероятности квадрупольного перехода и B — величина, обратная энергии, соответствующей потенциалу ионизации. Экспериментально построенные зависимости $\sigma_n^{+} \times E$ как функции $\lg E$ позволили определить области применимости законов $\sigma E = A \lg BE$ и $\sigma E = \text{const}$ для ионизации исследуемых газов в области энергий электронов от 100 до 2000 эв.

Г. П. Петрова

He³

1967

4 Д351. Микроволновое излучение однозаряженного He^3 в области H(II). Goldwire H. C., Jr, Goss W. Miller. Microwave radiation of singly charged helium 3 from H II regions. «Astrophys. J.», 1967, 149, № 1, Part 1, 15—22 (англ.)

Обсуждается сверхтонкая структура основного состояния He^3 (II). Время жизни в верхнем сверхтонком состоянии для спонтанного излучения 3,46 см оценено в 16 000 лет. Спиновая т-ра He^3 (II) в области H (II) равна кинетич. т-ре в этой области. Показано, что ожидаемые интенсивности излучения сверхтонких переходов основного состояния в области H (II) находятся на пре-

09.1968:4

деле чувствительности современных приборов. Наблюдение микроволн. излучения сверхтонких переходов He^3 позволяет повысить чувствительность обнаружения He^3 на 2—3 порядка по сравнению с обычными оптич. методами; нижний предел чувствительности для микроволн. излучения достигает $\sim 10^{-5} \text{He}^3/\text{H}$. Обсуждаются причины возникновения He^3 в межзвездном пространстве. Библ. 27. Э. В. Б.

He⁻ 8 Д29. Расчет энергии метастабильного состояния $(1s2s2p)^4P^0$ He⁻ и Li. Holøien E., Midtdal J. Energy calculation of the metastable $(1s2s2p)^4P^0$ state of He⁻ and Li. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 90, № 3, 883—885 (англ.)

Исправлена алгебраич. ошибка, допущенная в ранее опубликованной статье этих же авторов (РЖФиз, 1956, № 10, 28264) в выражении для матричных элементов оператора кинетич. энергии иона He⁻. Поправочный член отличен от нуля только при использовании базисных ф-ций, учитывающих корреляцию. Приведены исправленные значения полной энергии состояния $(1s2s2p)^4P^0$ с использованием 4 и 15 базисных ф-ций для He⁻ и коэф. разложения по 15 базисным ф-циям для He⁻ и Li. Новое значение энергии для Li лучше согласуется с эксперим. данными. А. И. Шерстюк

1967

He, Ne,
Ar, Kr, Xe

90005m An electron diffraction study of helium, neon, argon,
krypton, and xenon. Hollace Lawton Cox, Jr. (Indiana Univ.,
Bloomington, Indiana). *Diss. Abstr. B* 28(6), 2368(1967)(Eng).
Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 67-15,079, 129
pp. SNDC

2nd-1000.

group

+4

C.A. 1968-68-20



He

Lot Z W.

1967

J. Opt. Soc. Amer., 57,
N^o 7, 873.

Каталогизация ионизации
атомов и ионов с
H до Zn • (см. H)

1967

He⁴He³

(уровни)

11 Д274. Структура уровней He⁴ и He³, возбужденных электронной бомбардировкой. Maujean Michel-le, Descoubes Jean-Pierre. Structure de niveaux de ⁴He et ³He excités par bombardement électronique transversal. «С. г. Acad. sci.», 1967, 264, № 24, В 1653—В 1655 (франц.)

Измерение интенсивности двух взаимно-перпендикулярных составляющих светового излучения возбужденных уровней с помощью фотоумножителей и использование многоступенчатого анализатора позволило улучшить схему регистрации метода пересечения уровней. (РЖФиз, 1966, 4Д32). Найдены новые и уточнены ранее определенные уровни тонкой и сверхтонкой структуры He⁴ и He³ в области 2600—12 800 Å. Данные об уровнях, переходах, временах жизни приведены в таблице.

Г. В. Маргулис

09. 1967. 11 Д

He

1984

OK^o

- 16651c Atomic heat of quartz at liquid helium temperatures. N. S. Natarajan (Natl. Phys. Lab., New Delhi). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 5(8), 372-3(1967)(Eng). The heat capacity of quartz was measured at liq. He temps. with the help of a hermetically sealed vacuum calorimeter and a value for the Debye temp. (Θ) = 542°K. is obtained, which is very much nearer to the theoretical value worked out by earlier investigators (Anderson, CA 30: 3709⁴). RCXZ

C.A. 1968. 68.4

1964

He

Pebay-Peyroula F. C.,
Chenevier lbr, Bulletin 4.

Colloq. Int. Centre Nat. Rech
Sci., N 162, 71-92.

Electronic bombardment
as a method for studying
excited atomic levels.

(see Hg)

1967

He

22014j Ionization of the helium atom by electron impact. Pecul, K. (Inst. Nucl. Res., Warsaw/Zeran, Poland). *Acta Phys. Pol.* 1967, 32(4), 605-9 (Eng). Cross sections for the ionization of the He atom by electron impact were calcd. in the Born approxn. by using several sets of parameters in the wavefunction for the initial and final state. Some errors in the results published by other authors are cor. The dependence of the calcd. cross section on the choice of wavefunction is discussed. 17 references. JDJN

nomina
yes

C.A. 1968.69.6

He

1967

4 Д177. Возбуждение гелия, азота и окиси азота быстрыми протонами и атомами водорода. Robinson J. M., Gilbody H. B. Excitation of helium, nitrogen and nitric oxide by fast protons and hydrogen atoms. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 92, № 3, 589—601 (англ.)

Путем спектроскопич. анализа света, излучаемого в результате спонтанного распада возбужденных частиц, определены сечения возбуждения He, N₂ и NO протонами и сечения возбуждения He и N₂ атомами водорода. Энергия протонов E изменялась от 60 до 400 кэв, а энергия атомов водорода от 60 до 150 кэв. Измерения проводились в условиях однократных столкновений в интервале 3900—6000 Å. Пучок протонов с интенсив-

+2

ф. 1968. 4

⊗

ностью до 0,1 нА от ускорителя Ван-де-Граафа или пучок атомов водорода, образуемый в результате перезарядки протонов, проходил через щель 3×5 мм в камеру столкновений диаметром 15 см, наполненную He или N_2 до давл. $5 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. или NO до давл. 10^{-3} мм рт. ст. Излучаемый с короткого пути и под данным телесным углом свет попадал в спектрограф. Выходные сигналы от фотоумножителя ускорялись и регистрировались с помощью самописца. Абс. точность измерения сечений составляла $\pm 20\%$. В случае He определены ф-ции возбуждения уровней 4^1S , 5^1S , 4^1D и 5^1D при столкновении с протонами и уровни 4^1S при столкновении He с атомами водорода. Показано, что сечения возбуждения уменьшаются с ростом энергии протонов. Так, напр., сечение возбуждения уровня 4^1S падает от $34 \cdot 10^{-20}$ см²/атом при $E=60$ кэВ до $7,4 \cdot 10^{-20}$ см²/атом при $E=350$ кэВ.

При возбуждении уровня 4^1S атомами водорода сечение также уменьшается с ростом энергии, но при одинаковом значении энергии оно в два—три раза меньше, чем в случае возбуждения протонами. В N_2 наиболее интенсивное излучение связано с первой отрицат. полосой перехода $2\Sigma_u^+ \rightarrow x^2\Sigma_g^+$. Возбуждение его при энергии протонов свыше 100 кэВ происходит в результате столкновения, включающего ионизацию азота. В NO наблюдается излучение линий 4649 Å OII и 5005 Å NII. Они связаны с одновременно происходящими процессами диссоциативной ионизации. Сечения возбуждения заметно больше при столкновении молекул N_2 и NO с протонами, чем с атомами водорода. Измеренные значения сечений возбуждения сравниваются с данными других авторов. Абс. значения сечений весьма сильно расходятся по величине, но имеют одинаковую зависимость от энергии.

И. Флакс

He

1917

67795q Extended Hartree-Fock calculations for the helium ground state. Roland Lefebvre and Yves G. Smeyers (Centre Mecan. Ondulatoire Appl., Paris). ~~Int. J. Quantum Chem.~~ 1(4), 403-19(1967)(Eng). The extended Hartree-Fock (EHF) wavefunction of an n -electron system is defined (Loewdin, *Phys. Rev.* 97, 1509(1955)) as the best Slater determinant built on 1-electron spin orbitals having a complete flexibility and projected onto an appropriate symmetry subspace. The configuration interaction equiv. to such a wavefunction for the 1S state of a 2-electron atom is discussed. There is in this case an infinite no. of solns. to the variational problem with energies lower than that of the usual Hartree-Fock function, and with spin orbitals satisfying all the extremum conditions. Two procedures for obtaining EHF spin orbitals are presented. An application to the ground state of He within a basic set made up of 4(s), 3(p_0), 2(d_0), and 1(f_0) Slater orbitals has produced 90% of the correlation energy. 15 references. RCMS

C.A. 1967. 67. 14

He

1987

V) 10 Д21. Энергетические состояния гелия. I. Новый тип волновых функций для однократно возбужденных $1S$ -состояний. Schrader David M. Helium states. I. Novel wave functions for singly excited $1S$ states. «Theoret. chim. acta», 1967, 7, № 2, 97—102 (англ.; рез. нем., франц.)

Прямым вариац. методом проведены расчеты энергий и волн. ф-ций 2^1S -, 3^1S - и 4^1S -состояний атома He с одним возбужденным электроном. В качестве пробных ф-ций выбирались частично учитывающие корреляцию ф-ции вида:

$$\psi = \varphi(akr_{<})\psi_n(kr_{>}),$$

где $r_{<}$ и $r_{>}$ — соответственно меньшее и большее из значений r_1 и r_2 $\varphi(r)$ — водородоподобная $1s$ -ф-ция, а

9. 1967. 10

$\psi_n(r)$ — водородоподобные ns -ф-ции ($n=2, 3, 4$) с экранированным зарядом ядра. При минимизации энергии по параметру a на волн. ф-ции не налагалось требования ортогональности к ф-ции основного состояния. Для состояния 2^1S получено 2 минимума, причем более глубокий из них при $a=0,3175$, как показал анализ интегралов перекрывания с более точными волн. ф-циями, приближенно соответствует основному состоянию, тогда как минимум при $a=1,7250$ относится к 2^1S -состоянию. Для 3^1S - и 4^1S -состояний получено по одному минимуму. Расчеты дают для энергий 2^1S -, 3^1S - и 4^1S -состояний соответственно значения — 2,13920, — 2,059102 и — 2,032653 ат. ед., тогда как эксперим. значения равны — 2,14600, — 2,06130 и — 2,03361 ат. ед.

А. И. Шерстюк

He

VI-4051

1967

11 Д17. Общее рассмотрение метастабильных компонент. W a t e l G u y. Considérations générales sur les métastables. «Bibliogr. CEA», 1967, № 89, 55 p., ill. (франц.; рез. англ.)

Обзор наиболее изученных метастабильных состояний атомов He, Ne, H и Hg.

Обзор

метастабильные
состояния

ф. 1967. 11Д

2

He

1968

8 Д185. Ионизация метастабильными атомами гелия по Пеннингу. Bell K. L., Dalgarno A., Kingston A. E. Penning ionization by metastable helium atoms. «J. Phys. (Proc. Phys. Soc.) [formerly «Proc. Phys. Soc.», 1968, В 1, № 1, 18—22 (англ.)

Рассчитаны константы C ван-дер-ваальсовского взаимодействия между состояниями 2^1S и 2^3S атома гелия и атомами и молекулами Ne, Ar, Kr, Xe, H_2 , O_2 , N_2 , CH_4 , Li, Na, K, Rb, Cs и O. Использован метод частотно-зависящей дипольной поляризуемости. Необходимые параметры частиц (силы осцилляторов и дипольные поляризуемости) либо заимствованы из эксперим. данных, либо рассчитаны. Ошибка в константе C предполагается не выше 30%, а в ряде случаев значительно меньше. Для оценки константы скорости ионизации по Пеннингу использовано предположение об образовании

ф. 1968. 8Д

долгоживущего вращающегося комплекса $(\text{HeX})^*$ и модель Джинмузиса — Стивенсона, при этом сечение ионизации дается следующей ф-лой $\sigma_c = 1,66 \cdot 10^{-16} (C/E)^{1/3} \text{ см}^2$. Ранее в предположении применимости ф-лы для сечения передачи импульса было получено следующее соотношение $\sigma_c = 1,39 \cdot 10^{-16} (C/E)^{1/3} \text{ см}^2$. Рассчитанные с помощью первой ф-лы вероятности пеннинговой ионизации существенно отличаются от вероятностей, рассчитанных по второй ф-ле, причем расхождение не может быть объяснено уточнением констант ван-дер-Ваальсовского взаимодействия C . Оценены сечения пеннинговой ионизации с участием $\text{He}(2^3\text{S})$, по которым отсутствуют какие-либо эксперим. данные.

В. К. Быховский

ВФ-62-IX

1968

He

Кв. — мех.
расчет

10 Д99. Коррелированные атомные и молекулярные волновые функции с ограниченным гауссовским базисом. Chesick J. P., Fraser S. J., Linnett J. W. Correlated atomic and molecular wavefunctions using limited Gaussian basis sets. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 2, 257—268 (англ.)

Основным недостатком гауссовского базиса в атомных и молекулярных расчетах является тот факт, что для вычисления с заданной точностью полной энергии системы гауссовских ф-ций требуется приблизительно вдвое больше, чем слейтеровских. Авторы высказывают предположение, что плохая сходимость при вычислении полной энергии обусловлена в первую очередь плохой аппроксимацией волн. ф-ций внутренних электронов. Отсюда следует, что вычисления с гауссовским базисом

ф. 1968. 109

X

целесообразнее проводить для величин, содержащих разности молекулярных и атомных вкладов, напр. для энергий диссоциации. В связи с этим на основе гауссовского базиса рассчитаны энергии атомов и молекул He, Li⁺, Be²⁺, Li, Be⁺, Be, H₂, Li₂⁺, Li₂ и LiH. Учитывалась корреляция пары внешних электронов с помощью корреляционного множителя вида $\exp(-c r_{12}^2)$, где r_{12} — межэлектронное расстояние. Энергии диссоциации молекул H₂, Li₂ и LiH рассчитаны с точностью до 0,2—0,4 эв. Рассчитаны также некоторые другие характеристики молекул (частоты колебаний и т. п.).

Л. Н. Лабзовский

He

✓) 19 Б22. Коррелированные атомные и молекулярные волновые функции, построенные из ограниченных гауссовых базисных наборов. Chesick J. P., Fraser S. J., Linnett J. W. Correlated atomic and molecular wavefunctions using limited Gaussian basis sets. «Trans. Faraday Soc.», 1968, 64, № 2, 257—268 (англ.)

При использовании ограниченных гауссовых базисных наборов исследовано электронное строение He, Li⁺, Be²⁺, Li, Be⁺, Be, H₂, Li₂⁺, Li₂, LiH с целью исследования возможности получения разумных значений колебательных частот, энергий диссоциации и потенциалов ионизации с неточной функцией остова, которая дает неправильные величины полной энергии системы. Путем введения в волновую функцию специального члена электронной корреляции учитывались корреляционные эффекты для внешних электронных оболочек Be, H₂, Li₂ и LiH. Энергии диссоциации для H₂, Li₂ и LiH рассчитаны с ошибками 0,20, 0,31 и 0,40 эв соответственно.

Резюме

X. 1968.

19

IX

He

1968

11 Д19. Состояние 2^3S гелия. Ermolaev A. M.,
Sochilin G. B. 2^3S state of helium. «Internat. J. Quant.
Chem.», 1968, 2, № 3, 333—339 (англ.; рез. франц., нем.)

Ранее примененный только к основному состоянию атома гелия быстро сходящийся метод теперь обобщается на случай возбужденных S -состояний. Метод основывается на разложении волн. ф-ции по степеням $\sqrt{r_1^2 + r_2^2}$, $\ln(r_1^2 + r_2^2)$, $\omega = r_{12}/\sqrt{r_1^2 + r_2^2}$. Для внутреннего и внешнего электронов используются различные эффективные заряды ядра. Математич. ожидания для различных операторов очень хорошо согласуются с данными других работ.

З. Б. Рудзикас

9. 1968. 11/8

1968

He

~~109982x~~ Quantum mechanical study of the $F^1\pi_u$ and $f^3\pi_u$ states of helium. Gupta, Balkrishna (Univ. of Texas, Austin, Tex.). 1968, 128 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 68-10,838. From *Diss. Abstr. B* 1968, 29(2), 718. SNDC

ab. see
jacobson

C.A. 1968. 69. 26

He

8 Д13. Тонкая структура терма 3^3D атома гелия. Kaul R. D. Helium 3^3D fine structure. «J. Opt. Soc. Amer.», 1968, 58, № 3, 429 (англ.)

1968

Методом спектроскопии пересечения уровней исследовалась тонкая структура терма 3^3D_1 атома гелия. Возбуждение атомов гелия производилось бомбардировкой ионами H_2^+ , обладавшими энергией 40 кэв. В направлении, перпендикулярном к пучку ионов, прилагалось постоянное магн. поле (напряженность которого подбиралась так, чтобы достигались пересечения различных зеемановских уровней тонких компонент $J=1, 2, 3$ с $\Delta m_J=2$). В направлении, перпендикулярном как к пучку ионов, так и магн. полю, регистрировалась интенсивность линии испускания 5875 Å (переход 3^3D-2^3P), поляризованного вдоль ионного пучка. По расположению сигнала пересечения уровней определено тонкое расщепление терма 3^3D . Для разностей энергии компонент тонкой структуры найдено: $3^3D_1-3^3D_2$ ($1327,2 \pm 1,1$) МГц, $3^3D_2-3^3D_3$ ($72,7 \pm 1,0$) МГц. По ширине сигнала найдено время жизни уровня 3^3D ($1,32 \pm 0,07$) $\cdot 10^{-8}$ сек. Т. К. Ребане

ф. 1968. 8 Я

1968

He

40739z Ionization of helium near threshold by electron impact. Krige, G. J.; Gordon, S. M.; Haarhoff, P. C. (Chem. Div., At. Energ. Board, Pelindaba, S. Africa). *Z. Naturforsch.*, A 1968, 23(9), 1383-5 (Eng). The threshold law for the cross section of ionization for simple monat. gases by electron impact has recently been reinvestigated (J. W. McGowan and E. M. Clarke, 1968 and C. E. Brion and G. E. Thomas, 1968). By using the retarding p.d. technique, it has been found that the ionization efficiency curve for He^+ is nonlinear for at least 2 ev. above threshold, and that over this region, it is in agreement with the one reported by Brion and Thomas, who used a 127° electrostatic energy selector. No definite conclusion can be drawn regarding the situation prevailing at higher energies.

Raylene Adams Coad

use of zirconium
reduction
ygapoll

C.A. 1969. 70. 10

He.

1968

3 Д246. Определение коэффициента поглощения для линии He по контуру спектральных линий с помощью интерферометра Фабри—Перо. Макаров А. П. «Оптика и спектроскопия», 1968, 25, № 4, 611—613

Рассчитаны зависимости $\Delta\nu_d/\Delta\nu_D$ от K_0 ($\Delta\nu_d$ — ширина дисперсионной части контура, $\Delta\nu_D$ — доплеровская ширина, K_0 — коэф. поглощения в центре линии) для различных параметров смешанного контура (α менялось от 0 до 0,6) для линий He в газовом разряде. Учтено влияние аппаратного уширения, вносимого интерферометром Фабри—Перо. Полученные величины сравнены с найденными методом полного поглощения.

атомно-
абсорб.
метод

ф. 1969. 3 А

3 He^+

1S-2S

непереход

1968

- 107951s Multiple ionization of the rare gases by successive electron impacts (0-250 ev.). II. 1S-2S transition in He^+ . P. A. Redhead and S. Feser (Nat. Res. Counc., Ottawa, Can.). *Can. J. Phys.* 46(7), 865-9(1968)(Eng). The tertiary collision sequence of electrons with helium ($He \rightarrow He^+ \rightarrow He^{+m}(2S) \rightarrow He^{2+}$) was observed with a trapped-ion mass spectrometer. The variation of He^{2+} ion current with electron energy shows a threshold at 40.8 ev., and structure, which results from excitation to autoionizing states of the atom below the $n = 3$ threshold of He^+ , is observed in the range 45-49 ev. Est. of the cross section for the 1S-2S transition in He^+ lie slightly below the values from close-coupling calens. RCCN

C. A. 1968. 68. 24

He

Perrott R. H.,
Stewart A. L.

1968

9.
6i

Proc. Phys. Soc., London,
At. Mol. Phys., [2] 1 (6),
1226.

(see. H⁻) III

1968

He I
(Li)

~~107965Z~~ The $(ns)^2\ ^1S$ states of the helium atom. Robert
Brent Stevenson (Univ. of Iowa, Iowa City, Iowa). *Diss.*
Abstr. B 28(7), 2800(1968)(Eng). Univ. Microfilms (Ann Arbor,
Mich.), Order No. 67-17,846, 80 pp. SNDC

C.A. 1968. 68. 24

He

8 Д14. Инварианты группы R_4 для двукратно возбужденных состояний гелия. Wulfman С. Е. R_4 invariants for doubly excited states of helium. «Phys. Letters», 1968, А 26, № 9, 397—398 (англ.)

1968

Двухэлектронные состояния, обозначаемые символом $2s^{+1}\pi B_{N1Q1}(nn')$, предлагается классифицировать по схеме $NQLM$. Здесь s , π , B и n — полный спин, четность, полный орбитальный момент и главное квантовое число n , а N и Q — новые квантовые числа, соответствующие инвариантам группы R_4 (РЖФиз, 1962, 2А221). Схема $NQLM$ эффективно может быть использована для классификации тех метастабильных состояний, в которых с точностью до первого приближения оба электрона находятся на втором квантовом уровне ($n=2$). Напр., по схеме $NQLM$ состояния $1+S_{30}(22)$ и $1+S_{10}(22)$ содержат конфигурации $2s^2$ и $2p^2$ в отношении 1,732 и 0,577, а по точным расчетам они равны 1,726 и 0,600, соответственно. Классически Q определяет относит. расположение кеплеровских орбит и является весьма хорошим квантовым числом.

И. В. Чиплис

оп. 1968. 89



Библиографические записки (Би) 11 том 1968

Young R.P., He XI 566

U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform.,
AD 1968, AD-680198, B4pp

Spectrum transitions and their
wavelengths from 2000 to 10000 Å
for rare gas atoms.

~~XXXXXXXXXXXX~~ 10

6
CA, 1969, 70, 124, 110125x

He

X1-95

1969

(2;)

24 Б21. Приближенные Хартри—Фоковские энергии $1S^1$ и $2S^3$ состояний атома гелия для трехпараметрических орбит, построенных обобщением слейтеровских и гауссовых функций. Carrier Robert H., Pilar F. L. Approximate Hartree—Fock energies of the 1^1S and 2^3S states of the helium atom using three—parameter orbitals generalized from Slater and Gaussian functions. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 6, 2771—2773 (англ.)

Вариационным методом рассчитана энергия основного 1^1S и возбужденного 2^3S состояний атома гелия с использованием орбиталей вида $\psi = r^n \exp(-\alpha r^m)$. Вариационными параметрами служат n , α и m , так что АО являются функциями промежуточного типа между слейтеровскими и гауссовыми. Миним. значение энергии основ-

X. 1969. 24

ного состояния равно — 2,8615 ат. ед, что всего на 0,0002 ат. ед. выше Хартри — Фоковского значения. Рассчитанная энергия триплетного состояния равна — 2,1741 ат. ед., что на 0,0009 ат. ед. меньше оцененной величины Хартри — Фоковского приближения. Интегралы, встречающиеся при расчете энергии с предложенными функциями, вычисляются стандартными методами. Часть из них табулирована.

Е. Никитин

1969

He I

82482r: Validity of local thermodynamic equilibrium for the first excited levels of helium I. Deutsch, Claude (Lab. Rech. Phys., Paris, Fr.). *Phys. Lett. A* 1969, 28(7), 525-6 (Eng). Math. The range of validity for the existence of local thermodynamic equil. (LTE) conditions can be extended, when correct values of oscillator strengths, energy differences, lifetimes, and electron excitation cross sections are introduced. Validity criteria for the existence of LTE for He I excited levels are discussed. GXJN

н. н. н. н. н.
ок. Термод.
пале.

C.A. 1969.

40.18

1969

He

4 Д17. Расчет основного уровня энергии гелия с помощью интегралов по траекториям. ..Е.в.сеев. А. М.
«Докл. АН СССР», 1969, 189, № 6, 1197—1199

Предложен метод расчета энергетич. спектров квантово-механич. системы путем преобразования Фурье реальной и мнимой частей интеграла по траекториям. Рассчитан интеграл по траекториям как ф-ция времени для атома гелия. Расчет произведен методом Монте-Карло с помощью программы случайных чисел с отрезком аперриодичности в 400 000 чисел. Нижний уровень энергии атома гелия оценен в 2,92 ат. ед., что отличается от эксперим. значения на 0,57%.

осн. уровень
энергии

09.1970.

42

1969

He

Д 4 Д16. Основное состояние атома гелия. Федоров Ф. И. «Весті АН БССР. Сер. фіз.-матем. н., Изв. АН БССР. Сер. фіз.-матем. н.», 1969, № 5, 87—91

Волновая ф-ция основного состояния атома гелия строится из пробных ф-ций типа Хиллерааса

$$\psi = \sum_{v=1}^n C_v \psi_v, \quad \psi_v = u^{k_v} t^{l_v} s^{m_v} e^{-e_v s},$$

расчет
з;

ссылка на аб.

09. 1970.

42

с тем отличием, что показатели k_v и m_v могут принимать целые, полуцелые и отрицат. значения (l_v^I — четные) и ε_v наряду с C_v являются вариан. параметрами. [Ф-ции ψ_v выбирались последовательно из заданной совокупности 193 ф-ций. Приведены параметры ε_v , C_v и значения энергии E для $n=4, 5 \dots 9$. Полученные значения энергии меняются от $E = -2,902862$ ($n=4$) до $E = -2,90371883$ ($n=9$). Все полученные ф-ции дают значительно лучшие значения энергии, чем любые другие известные ф-ции с тем же числом членов.

Автореферат

He I, II

XI - 195

1969

спектр

10 Д174. Атомная спектроскопия с применением ускорителя Ван-де-Граафа. Исследование спектров He и N: Giradreau R., Kerwin L., Drouin R. Spectroscopie atomique à l'aide d'un accélérateur Van de Graaff: applications à l'hélium et à l'azote. «Canad. J. Phys.», 1969, 47, № 8 859—863 (франц.)

Исследованы спектры в УФ-области He I, He II, N I, N II, N III, N IV, N V (энергия He⁺ 1,0 Мэв, иона N⁺ — 1,4 Мэв). Дана принципиальная схема установки и ее основные параметры. Приведены таблицы длин волн указанных атомов и ионов и диаграммы Гроттриана.
В. Шевелько

+1

ф. 1969. 10 Д

1X1

XI-705

(1969)

He (ϵ_i)

Grissom J.T., Compton R.N.,

Garrett W.R.,

Phys. letters, 1969, A30, N2, 117-118

• 10

cc76 gvk

He

1979

кв.-мех.
расчет

4 Д18. Применение функций Грина в расчетах атомов и молекул. VI. Поправка первого порядка к собственной функции атома He в основном состоянии. На-
мека Н. F. Use of Green functions in atomic and
molecular calculations. VI. The first-order perturbation to
the eigenfunction of the helium-atom ground state. «J.
Chem. Phys.», 1969, 51, № 3, 1148—1155 (англ.)
Ч. V см. РЖФиз, 1969, 5Д2.

ф. 1970.

42

1969

16

8 Д194. Резонансные линии нейтрального гелия в излучении Солнца в ультрафиолетовой области. Негарн А. Г. The ultraviolet resonance lines of neutral helium from the sun. «Monthly Notices Roy. Astron. Soc.», 1969, 142, № 1, 53—70 (англ.)

61

Для интерпретации эксперим. данных по измерению интенсивностей резонансных линий HeI 584 и 537 Å, излучаемых Солнцем, вычислены заселенности уровней He с помощью модели атома с 41 уровнем. В расчетах учитывались данные измерений поперечных сечений возбуждения с 2^3S -уровня на синглетные уровни и эффект уширения резонансных линий. Библ. 43. Д. А. Кацков

оп. 1969. 87

He

1969

Л. М. А.

3 Б108. Обобщенная осцилляторная сила для $1^1S \rightarrow 2^1P$ -перехода гелия. Теория ограничения осцилляторных сил. Lassettre Edwin N., Skerbele Ausma, Dillon Michael A. Generalized oscillator strength for $1^1S \rightarrow 2^1P$ transition of helium. Theory of limiting oscillator strengths. «J. Chem. Phys.», 1969, 50, № 4, 1829—1839 (англ.)

Для перехода $1^1S \rightarrow 2^1P$ в гелии определены относит. обобщенные силы осцилляторов как функция изменения момента сталкивающегося электрона. Обоснованность нормализации процесса доказана теоретически и показано, что предел обобщенной силы осциллятора при нулевом изменении момента равен оптической силе осциллятора для любого атома или молекулы. Н. Кузьменко

Х. 1970. 3

He

1969

Кв.-мех.
расчет

9 Б11. Верхние и нижние границы собственных значений. II. Возбужденные состояния He. Messmer R. P., Birss F. W. Upper and lower bounds to eigenvalues. II. Excited states of He. «Theoret. chim. acta», 1969, 14, № 3, 198—202 (англ.; рез. нем., франц.)

Вычисленные верхние и нижние границы уровней энергии $1,3P$ (1 *snr*) атома He по методу, изложенному в части I. Использовалось 8 базисных орбиталей (4 *s*-типа и 4 *p*-типа). Во всех рассмотренных случаях метод авторов, основанный на оптимизации пробных функций относительно ф-лы Темпла — Като, дает хорошие границы уровней энергии (макс. расхождение верхней и

X. 1970. 9

нижней границы составляет 0,005 ат. ед.). Отмечается, что вариац. верхние границы, вычисляемые по методу Девидсона (Z. Chem. Phys., 1965, 42, 4199), несколько более точны. Это связано с тем, что метод Девидсона исходит из требования стационарности энергии: $\delta E = 0$, в то время как метод, применяемый авторами, исходит из условия вида: $\delta E + \omega \delta \Delta = 0$, где Δ — дисперсия энергии, а ω — постоянная. Сообщ. I см. РЖХим, 1970, ЗБ17.

Т. К. Ребане

He

Oldman R. 7.
Broida H. P.

1969

creeping

4. Chem. Phys., 51(6),
2764.

(Cu. N) III



1969

He

9 Д16. Преобразованные слейтеровские функции.
Применение к основному состоянию атома гелия. Shil-
lady D. D. Slater transform functions. Application to the
helium atom ground state. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3,
№ 2, 104—106 (англ.)

С использованием преобразованных слейтеровских
ф-ций вида

$$\psi(N, L, M; n, \alpha) = \sqrt{\frac{(2n-1)(2n-2)(2n-3)\alpha^{2n-3}}{2}} \times \\ \times \frac{r^{N-1}}{(r+\alpha)^n} Y_{LM}(\theta\varphi),$$

расчет

q_i

ф. 1969. 99

полученных с помощью преобразования Лапласа из ф-ций $S(m, \alpha, x) = x^m \exp(-\alpha X)$ при $m \geq 1$, вариационным методом исследуется основное состояние атома He. Рассчитанные значения энергетич. характеристик оказываются лучше, чем полученные с масштабированными функциями гауссовского и слейтеровского типа, причем отмечено, что многоконфигурационный расчет в рамках используемого приближения требует гораздо меньшего базиса, чем расчет с функциями гауссовского и слейтеровского типа. Величина полной энергии оказалась очень близкой к хартри-фоковскому значению. В. Л. Лебедев

1969

He

У20 Б130. Абсорбционный спектрометр прямой регистрации в вакуумной ультрафиолетовой области. Спектры поглощения He_2 , HF и N_2 . Waggoner M. G., Chow K. W., Smith A. L. Direct—recording absorption spectrometer in the windowless vacuum—ultraviolet. Absorption spectra of He_2 , HF and N_2 . «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 3, 151—154 (англ.)

спектр
поглощения

Описан абсорбционный спектрометр для спектральной области 600—1100 Å. Исследованы спектры поглощения He , HF , N_2 . Спектр азота, полученный с разрешением в 1,0 Å, находится в соответствии с предыдущими работами. В случае He обнаружено, что в спектральной области 600—610 Å коэф. поглощения пропорциональны квадрату плотности. Наблюдалось поглощение He_2 . В спектре HF в области выше и ниже первого ионизационного потенциала резкая колебательная структура не проявляется, а первый переход $\text{N} \rightarrow \text{Q}$ осуществляется при 13,0 эв.

О. Г. Гаркуша

X. 1969.

20

+2



$C\bar{V}(E_i)$ 10 11 14 1970
 $He I, Li II(E_i, I)$ $\bar{x} 5026$

Edlen B., Löfstrand B.,
J. Phys., 1970, B3, N°10, 1380-8 (and.)

Fermi system of $C\bar{V}$.

edit q. K.

10

③

CA, 1970, 73, 1124, 1252, 1512

He⁻

1970

59224r. Calculations on some excited states of He⁻. Eliezer, I.; Pan, Y. K. (Dep. Chem., Tel-Aviv Univ., Tel-Aviv; Israel). *Theor. Chim. Acta* 1970, 16(1), 63-74 (Eng). The stabilization technique has been used to examine several possible resonance states for He⁻. Stabilized roots have been obtained at 0.43, 19.3, 20.3, 21.2, 57.3 and 58.3 eV. These results are discussed and compared to exptl. values. RCTC

ξ_i

vb. max,
power

C.A. 1970. 72. 12

He⁻

10 Д22. Расчет автоионизационного ${}^4P_{5/2}^0$ -состояния He⁻. Estberg G. N., LaBahn R. W. Calculations on autoionization of the ${}^4P_{5/2}^0$ state of He⁻. «Phys. Rev. Lett.», 1970, 24, № 23, 1265—1267 (англ.)

Рассчитано время жизни автоионизационного ${}^4P_{5/2}^0$ -состояния He⁻ с использованием точных волн. ф-ций начального и конечного состояний. При расчете начальное ${}^4P_{5/2}^0$ -состояние описывалось вариацион. волн. ф-цией, соответствующей суперпозиции различных угловых конфигураций. Конечное континуальное ${}^2F_{5/2}^0$ -состояние описывалось волн. ф-цией, полученной методом поляризованных орбиталей. Найденное время жизни $4,55 \cdot 10^{-4}$ сек хорошо согласуется с эксперим. данными.

расчет

9. 1970.

108

1970

He

1970

11 Д45. Кривые потенциальной энергии для молекулы He_2 . Ginter Marshall L., Battino Rubin. Potential-energy curves for the He_2 molecule. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 9, 4469—4474 (англ.)

В работе приводятся и обсуждаются кривые межатомной потенциальной энергии для ряда известных стабильных возбужденных состояний молекулы He_2 , полученные с использованием данных оптич. спектра. Результаты сравниваются с данными теоретич. расчетов.

З. Б. Рудзикас

кривые
потенц.
энергии

09. 1970. 112

1970

146556k Ionization potentials, experimental and theoretical, of the elements hydrogen to krypton. Kelly, Raymond L.; Harrison, Don E., Jr. (Nav. Postgrad. Sch., Monterey, Calif.). *U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform.*, AD 1970, No. 712454, 32 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rep.* 1970, 70(23), 66. The ionization potential of the isoelectronic sequences He through Zn have been calcd. by the Hartree-Fock method and compared with exptl. results. Tables are presented showing the ionization potentials, as obsd. and extrapolated, for all stages of ionization of the 1st 36 elements. TCVL

TCVL

C.A. 194.44.26

S. D. E. C. H. O, E. H. E.

10 11 12 13 14 15 16

K, Co⁺, Fe, Ni, Cu, Mn

[illegible]

10. 11. 12

He

1970

crepus
venerz.

80673s Total ionization cross sections of helium, molecular nitrogen, molecular hydrogen, and oxygen due to electron impact. Khare, S. P.; Padalia, Bhairaw D. (Inst. Advan. Stud., Meerut Univ., Meerut, India). *J. Phys. B* 1970, 3(8), 1073-S2 (Eng). The total ionization cross sections of He, N₂, H₂, and O₂ due to electron impact have been calcd. by integrating the expressions given by Khare for the ionization cross sections per unit range. The results are in satisfactory agreement with the exptl. data. Comparison has also been made with other theoretical values. RCBS

C.A. 1970. 73. 16

+3

X

He I

XI-2610

1970

(92977c) Improved experimental values for some hydrogen-like levels of He I. Litzen, Ulf (Dep. Phys., Univ. Lund, Lund, Swed.). *Phys. Scr.* 1970, 2(3), 103-5 (Eng). The $3d-nf$ ($n = 4, 5, 6$) and $4f-5g$ transitions in He I, appearing in the extraphotographic ir, have been measured with a waveno. accuracy better than 0.01 cm^{-1} . Improved level values have been derived for

8.
62

HeI 100000

C. H. 1971. 74. 18

He

XI - 2610

1970

$2i$

7 Д272. Уточненные экспериментальные значения некоторых водородоподобных уровней HeI. Litzén Ulf. Improved experimental values for some hydrogenlike levels of He I. «Phys. scr.», 1970, 2, № 3, 103—105 (англ.)

С большой точностью (лучшей чем $0,01 \text{ см}^{-1}$) измерены длины волн переходов $1s \rightarrow 3d$ — $1snf$ ($n=4,5,6$) и $1s \rightarrow 4f$ — $1s \rightarrow 5g$ в атоме He. Приведены уточненные эксперим. значения уровней $1snf^{1,3}F$ и $1s \rightarrow 5g^{1,3}G$. Показано, что эти значения хорошо согласуются с соответствующими величинами, полученными с помощью поляризационной ф-лы Эдлена.

Р. Дагис

09. 1971. 78

He

Yamabe T. et al.

1970

Bull. Chem. Soc. Jap.,
43 (7), 2012.

8.

(Chem. H) III

He I

1971

7 Д293. Контуры линий HeI 4471,5 и 4922 Å в дуге постоянного тока. Birkeland J. W., Bacon M. E., Braun W. G. Profiles of the HeI 4471.5- and 4922-Å lines in a dc arc. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 1, 354—358 (англ.)

Измерены контуры линий HeI 4471,5 и 4922 Å в дуге постоянного тока при плотности электронов $0,4-2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Приведено описание эксперим. установки с указанием ее параметров. В. П. Шебелько

09. 1971. 78

^3He - ^4He

изотоп.
смещение
линии

Ф. 1971. 82

1971

8 Д74. Изотопическое смещение ($2^1S_0 - 2^1P_1$) линии гелия. Burger, James M., Lurio Allen. Isotope shift in the ($2^1S_0 - 2^1P_1$) line of atomic helium. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 1, 76—81 (англ.)

С помощью описанного ранее метода (РЖФиз., 1969, 11Д250) измерено изотопич. смещение $2^1S_0 - 2^1P_1$ линии He. Пучок метастабильных атомов He 2^1S_0 создавался электронным ударом в камере источника, в котором давление газа было $1,7 \cdot 10^{-5}$ мм рт. ст. Возбуждение метастабильных атомов 2^1S_0 в состояние 2^1P_1 происходило в результате поглощения резонансной линии $20582 \text{ \AA}$ в камере, в которой на расстоянии $0,93 \text{ см}$ располагались полюса электромагнита диаметром $7,3 \text{ см}$. Пучки атомов ^4He и ^3He облучались резонансными лампами ^3He и ^4He , соответственно, при этом магн. подуровни $m_j = \pm 1$ состояния 1P_1 испытывали в переменном магн. поле зеемановское смещение. Давление газа в лампах составляло

3—6 мм рт. ст. в случае ${}^4\text{He}$ и 5—7 мм рт. ст. в случае ${}^3\text{He}$. Фотоны с длиной волны 584 Å, появлявшиеся в результате распада 2^1P_1 с переходом в основное состояние 1^1S_0 служили способом контроля ($2^1S_0 \rightarrow 2^1P_1$) возбуждения. Использование пучков ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ позволило оценить и внести поправки к возможным систематич. погрешностям, связанным со смещением частоты резонансных ламп, доплеровским смещением и др. Средние значения максим. поглощения, полученные в результате многократных измерений с пучками ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$, равны 2980 и 3049 гс, а с учетом эксперим. ошибок оно в среднем принималось равным 3015 ± 40 гс. При этом измеренное изотопич. смещение ($2^1S_0 \rightarrow 2^1P_1$) линии $\nu({}^3\text{He}) - \nu({}^4\text{He}) = 0,1408 \text{ см}^{-1} \pm 0,0019 \text{ см}^{-1}$, что близко к величине $0,1419 \text{ см}^{-1}$, предсказываемой теорией.

И. Флакс

He I

Carre M., et al.

1971

June

24

Phys. Rev. Lett., 1971,
n° 21, 1407.

Исследования времени
жизни в He I с помощью
процесса Хавелла не дает
тех результатов, которые
были в газ. смеси

Июль, 1972, 40311

He

1971

спектр

7 Д278. Спектроскопия каскада вакансий: удобный метод для изучения высокоионизованных атомов и молекул. Егман Р., Берри Н. Г. Vacancy cascade spectroscopy: a convenient method of studying highly ionized atoms and molecules. «Phys. Letters», 1971, A34, № 1, 1—2 (англ.)

Описана методика исследования высокоионизированных атомов и молекул. Ионизация внутренних оболочек атомов исследуемых газов производилась с помощью высокоэнергетич. пучка электронов (2—10 кэв). Наблюдение производилось в направлении, нормальном к электронному пучку, с помощью метрового вакуумного спектрофотометра. Когда энергия электронов превышала энергию связи электронов К-оболочки в несколько раз,

оп. 1971

18

+5



поперечное сечение ионизации К-оболочки достигало 10^4 . При этих энергиях происходила ионизация и вышележащих оболочек. При давлении в газе от 10^{-2} до 1 мм рт. ст. наблюдались спектры He, N₂, O₂, CO₂, Cl₂, Ar и Xe в области 500—2500 Å. Идентифицировано большое число ионизованных состояний в газах. Предложенная методика может быть использована для измерения времен жизни атомов и молекул в ионизованном состоянии.

Г. М. Р.

1971

He

15 Б13. Исследование релятивистских обменных приближений для атомов He, Ne, Ar, Kr и Xe. E u w e t a R. N., S t u k e l D. J. Relativistic exchange approximation study for He, Ne, Ar, Kr and Xe. «Int. J. Quant. Chem.», 1971, 5, Symp. № 4, 55—75 (англ.)

Проведено сравнение ряда приближенных методов оценки обменного члена в хартри-фоковском гамильтониане. Выполнены численные расчеты полной энергии и потенциалов ионизации атомов He, Ne, Ar, Kr, Xe. Наибольшей точностью обладает метод градиента плотности (см. F. Herman, J. B. Ortenburgen, J. D. Van Dyke, Int. J. Quant. Chem., 1970, 3S, 827), к-рый дает также самое низкое значение полной энергии. А. Зембеков

расчет

X. 1971.15



функции φ , приводит к вековому уровню с матрицами H и S на базе функций φ_i . Схема интегрирования по точкам соответствует диофантовому методу в форме, предложенной Конроем (см. РЖХим, 1968, 20Б36). В качестве примера выполнены расчеты He и H_2 . Каждая координата (сферич. для He и эллиптич. для H_2) преобразовывалась к новой переменной с областью изменения $[0,1]$, причем преобразование содержало варьируемый параметр, выбираемый из условия минимальности отклонения матрицы H от симм. матрицы. Пробная волновая функция для He включала от одного до девяти слагаемых вида $\varphi_i = P[r_1^l r_2^m r_{12}^n \exp(-\rho_a r_1 - \rho_b r_2)]$, P — симметризатор, ρ_a и ρ_b — параметры. Число точек суммирования 269. Для H_2 использованы пробные функции, предложенные Гудисменом (см. РЖХим, 1967, 10Б4); число точек суммирования 577. Приведены значения энергии при двух способах преобразования координат для He и при одном для H_2 , а также зависимость значений энергии от значений варьируемого параметра. Наилучшее согласие с вариационными значениями энергии на тех же функциях получено для H_2 : различия составляют $\sim 0,0001$ ат. ед. для функций с 8—9 членами.

М. Е. Ерлыкина

He

XI-2640

1941

1 Д27. Атомные волновые функции, "полезные" для молекулярных расчетов: некоторые состояния атома He

Gupta B. K. Atomic wavefunctions useful for molecular calculations: some states of the He atom. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1971, 9, № 4, 261—262 (англ.)

Рассчитаны энергия и волн. ф-ции основного состояния 1^1S и возбужденных состояний 2^3S , 2^1P и 2^3P атома He. Волн. ф-ции построены исходя из орбиталей слэте-ровского типа с образованием ф-ций связи с последующим проектированием на соответствующие состояния и учетом конфигурац. взаимодействия. Производилась

расчет
основных
состояний

9, 1972, 19

оптимизация всех орбитальных экспонент. Полученные ф-ции удобны для использования в молекулярных расчетах методом валентных связей с использованием конфигурац. взаимодействия. Рассчитанные значения энергии сопоставлены с экспериментальными и отмечено, что при одинаковой точности волн. ф-ции возбужденных состояний требуют меньшего числа конфигураций, чем ф-ция основного состояния.

А. Багатурьянц

1971

He

11 Д306. Точное измерение интервала $2^3P_0-2^3P_1$ тонкой структуры гелия. Кроу А., Hughes V. W., Johnson C. E., Lewis S. A., Pitchanick F. M. J. Precise measurement of the $2^3P_0-2^3P_1$ fine-structure interval of helium. «Phys. Rev. Lett.», 1971, 26, № 26, 1613—1616 (англ.)

тонкая
структура

С помощью улучшенного варианта описанной ранее авторами методики (РЖФиз, 1968, 11Д251) проведены точные измерения $2^3P_0-2^3P_1$ -интервала тонкой структуры гелия. Пучок He в основном состоянии возбуждался электронной пушкой в 2^3S_1 -состояние, из которого с помощью неоднородного магн. поля выделялись атомы с $M_J=0$, возбуждаемые затем излучением гелиевой разрядной лампы на зеемановские уровни 2^3P -состояния. Полученное значение $\nu_{01}=29\,616,864 \pm 0,036$ дает возможность вычислить значение константы тонкого расщепления α с точностью $\sim 10^{-6}$. Библ. 20. К. Н. Кошелев

Ф. 1971. 11Д

He

1971

11 Д268. Молекулярные состояния гелия. Mat-
sen F. A. Helium molecular states. «Chem. Dyn.» New
York c. a., 1971, 1—5 (англ.)

Сообщаются результаты расчета молекулярных термов
He₂, коррелирующих с состояниями 1^1S-2^3S , 1^1S-2^1S ,
 1^1S-2^3P , 1^1S-2^1P разъединенных атомов. Использо-

вались базисные ф-ции, построенные на слэйтеровских
и эллиптич. орбитах с оптимизацией орбитальных экспон-
нент. Рассчитанные термы обладают максимумами (за
исключением терма $^3\Pi_g$), величины которых находятся
в качественной согласии с экспериментом. Рассчитаны
также спектроскопич. константы термов, которые сравне-
ны с эксперим. данными. Это сравнение показывает, что
неэмпирич. расчеты простых молекул могут служить для
предсказания параметров спектров. Отмечается, что ис-
пользованный базис может служить для неэмпирич. рас-
чета молекул с 10—20 электронами при условии бо́льшей
затраты машинного времени.

Е. Е. Никитин

Ei, m, n

X. 1971 N 11

He

1971

22 Б9. Молекулярные состояния гелия. Mat-
sen F.A. Helium molecular states. «Chem. Dyn.» New
York e. a., 1971, 1—5 (англ.)

Обзор расчетов низших связанных состояний $1,3\Sigma_{g,u}^+$,
 $1,3\Pi_{g,u}$ молекулы He_2 . Расчеты выполнены в базисе
слеjтеровских и (или) эллиптич. орбиталей с оптимиза-
цией орбитальных экспонент. Для каждой потенциаь-
ной кривой вычислены колебательные и вращательные
уровни. Приведены рассчитанные потенциальные кривые
и нек-рые из спектроскопич. постоянных, а также коле-
бательные термы $\Delta G(v+1/2)$. Точность расчета энергий
диссоциации соответствует точности лучших спектро-
скопич. данных, равновесные расстояния несколько за-
вышены. Библ. 18. М. Е. Ерлыкина



Х. 1973 N22

He

1971.

Атомы
Спектр

5 Д20. Синглет-триплетное смешивание в возбужденных атомах гелия. Mel Parish R., Mires Raymond W. Singlet-triplet mixing in excited helium atoms. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 4, № 6, 2145—2160 (англ.)

С целью выяснения отступлений от рассел-саундеровской связи в возбужденных состояниях He произведена диагонализация гамильтониана в базисе ф-ций конфигураций $1snl$. Учитывались кулоновское взаимодействие электронов, спин-орбитальное и спин-спиновое ди-

Ф.1972.52

польное взаимодействие. Ф-ции указанных конфигураций строились в виде антисимметризованного произведения ф-ции внешнего электрона в поле остова на ф-цию внутреннего электрона. При этом учитывалась угловая корреляция электронов и поляризация электрона остова внешним электроном. Уровни энергии вычислены в терминах радиальных интегралов. Рассмотренное приближение дает плохие результаты для P -состояний. Для L -состояний теория правильно описывает относительное положение уровней, предсказывая справедливость расщепления саундеровской схемы связи. Для F -состояний имеется значительное смешивание синглетов и триплетов, а для G - и высших состояний имеется полное смешивание. Этот результат объясняет механизм возникновения He в состоянии n^3D при столкновениях $He^*(n^1P)$ с $He(1^1S_0)$ вследствие переходов через промежуточное возбужденное состояние nF , в котором происходит эффективное смешивание синглетов и триплетов.

Е. Е. Никитин

He (cuermp)

XI 2629

1971

Sando K. M.,

Mol. Phys., 1971, 21, N3, 439-447 (anal.)

The emission of radiation
near $600 \text{ \AA}^\circ$ by helium.

BeLum., 1972, 3520

10

He

X1-2646

1971

(1 Д296.) Точное измерение длины волны $1s2p^3P^o \rightarrow 2p^2^3P$ перехода в $^4\text{He I}$. Tech Jack L., Ward John F. Accurate wavelength measurement of the $1s2p^3P^o \rightarrow 2p^2^3P$ transition in $^4\text{He I}$. «Phys. Rev. Lett.», 1971, 27, № 7, 367—370 (англ.)

8.
81

Получено точное значение длины волны $1s2s^3P^o \rightarrow 2p^2^3P$ перехода из дважды возбужденного слабоавтоионизационного состояния $^4\text{He I}$ ($\lambda = 320,2926 \pm 0,0007 \text{ \AA}$). Спектр возбуждался в ВЧ-гелиевом разряде ($p \approx 0,2 \text{ мм рт. ст.}$) и регистрировался 10,7-м вакуумным спектрографом по схеме Игля (1200 штрих/мм; $0,78 \text{ \AA/мм}$). В качестве стандартов длин волн использованы линии Ar II , OI , NI , NII , HI и CII . Измерения проводились во втором и третьем дифракционных порядках. Энергия уровня $2p^2^3P$ составляет $481301,5 \pm 1,2 \text{ см}^{-1}$. Тонкая структура перехода не разрешалась. Проведено сравнение эксперим. данных с теоретич. расчетами. К. Н. К.

92, 1972, 1D

He

A-2214

1971

(Y) 70331p Empirical formulas for calculating ionization potentials. Tverdokhlebov, G. N.; Tolok, Ya. N.; Smirnov, I. A. (USSR). *Tr. Buryat. Inst. Estestv. Nauk, Buryat. Filial, Sib. Old., Akad. Nauk SSSR* 1971, No. 10, 221-7 (Russ). Empirical formulas were found for calcg. the ionization potentials of He-, Li-, Be-, and B-like ions. The calcd. ionization potentials were compared with exptl. data. Luba Jirovcova

ногори.
ночи

Li, Be, B, •

C.A.

1973

79 N12

(+3)



He

(2^1S_0 -сст)

7

[f m n]

РЖФ, 1972, 4057

1971
Van Dyck R. S., et al

Phys. Rev. A: Gen. Phys,
1971, 4, ~ 4, 1324

Радиационное время
жизни метастабильного
состояния 2^1S_0

He I

XI - 3139

1972

(Ei)

68188n Energies and lifetimes of doubly excited states in helium[He I]. Berry, H. G.; Desesquelles, J.; Dufay, M. (Lab. Phys. Atmos., Univ. Lyon 1, Villeurbanne, Fr.). *Phys. Rev. A* 1972, 6(2), 600-6 (Eng). By using the beam-foil technique radiative transitions were obsd. between doubly excited states of He I. From previous calcs., it was possible to classify many of these transitions. Some of the lifetimes of the upper states were obtained from decay-time measurements. There is good agreement between theory and expt. for both wavelengths and radiative lifetimes. A transition between doubly excited states in Li II was also obsd., and expt. and theory are compared for higher members of the He I isoelectronic sequence.

CA. 1972. 77. 10

He²⁺

1972

uouu61

(E)

168995s Ground states of the dipositive or tripositive ions of ionized atoms. Casanova, Gaston (Paris, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. B* 1972, 275(2), 53-5. (Fr). Satisfactory agreement with expt. was obtained for the ground-state energies (E) of He²⁺, Li²⁺, Be²⁺, B²⁺, C²⁺, N²⁺, O²⁺, Li³⁺, Be³⁺, B³⁺, C³⁺, N³⁺, O³⁺, F³⁺, and Na³⁺ that were calcd. by using the relations for E defined in terms of characteristic theoretical orbitals with radii proportional to $n^2/(Z - k)$, where n is the principal quantum no., $(Z - k)$ is essentially the effective at. no. of the atom, and k is detd. by geometrically minimizing the interelectronic repulsive forces in the ground state. The agreement between the calcd. and exptl. E values increased with increasing Z .

C. A. 1972.77. V26

He

1972

9 Д138. О потенциальной кривой метастабильной молекулы гелия. Gupta B. K. On the potential curve of the metastable helium molecule. «Mol. Phys.», 1972, 23, № 1, 75—79 (англ.)

Методом валентной связи с учетом конфигурационного взаимодействия рассчитана кривая метастабильного

$2s\sigma^3\Sigma_u^+$ -состояния молекулы гелия. Расчет проведен в области межъядерных расстояний $R=1-10$ ат. ед. с использованием 7-членной волн. ф-ции, построенной в смешанном базисе слэтеровских и эллиптич. орбиталей. Полученная кривая лежит при $R \leq 3,0$ ат. ед. ниже кривой, рассчитанной с использованием 12-членной ф-ции, и при $R \leq 2,0$ ат. ед. ниже кривой, рассчитанной при помощи 21-членной ф-ции. Рассчитанное равновесное расстояние $R_e=2,026$ ат. ед. при эксперим. $R_e=1,975$ ат. ед. Достигнуто хорошее согласие с экспериментом и для ряда других спектроскопич. постоянных. Расчет указывает на существование барьера высотой в 0,14 эв при $R=4,66$ ат. ед.

А. Резников

(м.н.)

Ф. 1972. 99.

He

VIII - 5563

1972

25079k Empirical formulas for ionization potentials of elements. Lewin, G. F. (Phys. Dep., Brunel Univ., Uxbridge, Engl.). *Phys. Lett. A* 1972, 39(2), 121-2 (Eng). An equation is given for calcg. the ionization potential (I) (to within $\pm 5\%$ of the exptl. I value) for various isoelectronic series, that is a function of the I of at. H, the principal quantum no., the at. no., the no. of electrons, and 2 consts. A and B , where A and B are const. along any 1 series, but are different for different series. Values of A and B are given for He, Li, Be, B, C, N, O, F, He, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, Sc III, Cu, Ag, and Au.

(N)



C.A. 1972. 77.4

⁴He⁻

1972.

107405c Fine structure of the helium negative ion. Mader, D. L.; Novick, R. (Columbia Astrophys. Lab., Columbia Univ., New York, N.Y.). *Phys. Rev. Lett.* 1972, 29(4), 199-202 (Eng). Fine-structure transitions were obsd. in the metastable (1s2s2p)⁴P_J state of ⁴He⁻ using a radio frequency resonance technique. Preliminary detns. were made of the energy sepns.: $|E_{5/2} - E_{3/2}| = 825.23 \pm 0.82$ MHz and $|E_{5/2} - E_{1/2}| = 8663 \pm 56$ MHz. The $J = 3/2$ level lies between the $5/2$ and $1/2$ levels. These results are to be compared with the current theoretical ests. of $E_{5/2} - E_{3/2} = -2030$ MHz and $E_{3/2} - E_{1/2} = -9410$ MHz.

C.A. 1972. N 16. 77

^3He

^4He

1972

103515m Magnetic resonance mass spectrometer for studying the isotopic composition of helium. Mamyrin, B. A.; Shustrov, B. N.; Anufriev, G. S.; Boltenev, B. S.; Zagulin, V. A.; Kamenskii, I. L.; Tolstikhin, I. N.; Khabarin, L. V. (Fiz.-Tekh. Inst., Leningrad, USSR). *Prib. Tekh. Eksp.* 1972, (6), 148-50 (Russ). The parameters of a mass-spectrometric system for measuring the abs. and relative contents of ^3He and ^4He isotopes in solid and gaseous specimens of varying origin down to $^3\text{He}/^4\text{He} = 10^{-10}$ are given. The max. sensitivity of a mass analyzer with respect to $^3\text{He} = 5 \times 10^5$ atoms. B. Krawiec

Mass -
comp.

C. A. 1973. 78 N16

He

1972

15 Б23. Электронная корреляция в атомах. Musher J. I. Electron correlation in atoms. «Theor. Chem.» London e. a., 1972, 1—40 (англ.)

Обзор. Дано краткое общее рассмотрение проблемы электронной корреляции в атомах и анализ развития работ в этой области. Рассмотрены методы теории возмущений и выбор гамильтониана нулевого приближения. Обсуждаются различные вычислительные процедуры: аналитич. метод, вариационный метод, метод численного интегрирования, диаграммная техника многочастичной теории, эмпирич. и полуэмпирич. методы, метод кластерных разложений, метод конфигурац. взаимодействия и другие. Приведена сводка результатов расчета энергии атомов He и Li, СТС для Li и N, электрич. поляризуемости Be и константы спин-спинового взаимодействия молекулы HD.

А. Багатурьянц

рассчет
энергии
атома

Х. 1974 № 15

⊗ (+3) Li, HD, обзор.

He

IX - 4214

1972

(g)

Safronova U.I.

Opt. Spectrosc.

1972, 33(5), 813-16.

(cm. H; III)

4 He (номеру. кривая,
кв. метр. расчёт) X13458 1972

Snook I. K., Watts R.O.,

Aust. J. Phys., 1972, 25, N6, 735-41
(англ.)

Ab initio calculations for helium-4 of thermodynamic and transport properties of the gas and the ground state energy of the liquid.

CA, 1973, 78, N8, 479/3a

^3He

1972

9 Д316. Структура оптического перехода $2^3P-2^3S_1$, ^3He ; изучение методом эмиссионной и абсорбционной спектроскопии. Timsit R. S., May A. D. Structure of the $2^3P-2^3S_1$ optical transition of ^3He : a study by emission and absorption spectroscopy. «Can. J. Phys.», 1972, 50, № 2, 67—72 (англ.; рез. франц.)

(Vi)

Методом абсорбционной и эмиссионной спектроскопии изучена сверхтонкая структура перехода $2^3P-2^3S_1$, ^3He (1,083 мк). Обнаружено расхождение эксперим. отношений интенсивностей $[(2^3P_2 \rightarrow 2^3S_1) : (2^3P_1 \rightarrow 2^3S_1) : (2^3P_0 \rightarrow 2^3S_1)] = 1,0 : 0,66 : 0,26$ и теоретических (1,0 : 0,6 : 0,20). Частотные положения линий, экспериментально и теоретически полученные, согласуются хорошо.

ф. 1972. 92.

1973

He

6 Г44. Исследование частотной зависимости многофотонной ионизации метастабильных атомов гелия. Bakos J., Nagajeva M. L., Ovchinnikov V. G., Rubin G. Investigation of the frequency dependence of the multiphoton ionization of the metastable helium atoms. «11th Int. Conf. Phenomena Ionized Gases, Prague, 1973». Prague, s. a., 19 (англ.)

иониз.

в плазме

Экспериментально исследовалась трехфотонная ионизация метастабильных атомов гелия в плазме послесвечения разряда постоянного тока в длинной стеклянной трубке при давлении ~ 1 мм рт. ст. и токе ~ 5 ма. Плазма с конц-ией метастабильных атомов $\sim 10^{12}$ см $^{-3}$ освещалась лучом рубинового лазера, включаемого спустя заданный промежуток времени после выключения тока разряда. Частота излучения лазера составляла 14 407,1 см $^{-1}$ и 14 418,6 см $^{-1}$. Плотность ионов, образовавшихся при облучении, измерялась ленгмюровским

Ф. 1974 № 6 г.

зондом. Зависимость этой плотности от времени включения лазера характеризует время жизни метастабильного состояния атома гелия. Установлено, что излучение с частотой $\nu = 14\,407,1 \text{ см}^{-1}$ вызывает ионизацию триплетного состояния 2^3S , в то время как при $\nu = 14\,418,6 \text{ см}^{-1}$ ионизируется синглетное состояние 2^1S . Излучение с $\nu = 14\,412,3 \text{ см}^{-1}$ приводит к фотоионизации обоих состояний. Определенная по эксперим. данным скорость ионизации состояния 2^3S ($\alpha = 10^{73 \pm 2} \text{ см}^6 \cdot \text{сек}^2$) существенно отличается от величины, вычисленной с помощью теории возмущений. К. Б. Карташев

30927.4543

emitter 1225

Ph, TE, AR, MGU

28841

1973

He

Bahr John L.

Photoelectron spectroscopy

"Contemp. Phys.", 1973, 14,

N 4, 329-355

(англ.)

946 952

0970-8416
ВИНИТИ

He

ВФ-3391-XI

1973

9 Д159. Исследование временной зависимости излучения атомов He в вакуумной УФ-области. Bagtelli D. M., Hurst G. S., Wagner E. B. Time-dependent studies of vacuum-ultraviolet emissions from helium. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1973, 7, № 3, 1068—1078 (англ.)

Исследована временная зависимость излучения атомов He в вакуумной УФ-области (ВУФ) (резонансная линия 584 Å и континуум 600—950 Å) при столкновениях с быстрыми протонами ($E=1-4$ Мэв). Приведена схема и описание эксперим. установки. По скорости затухания интенсивности определено, что уровень 2^1P разрушается гораздо быстрее столкновениями с протонами, чем излучением с метастабильного уровня 2^1S . Распад континуума имеет две временные компоненты — быструю и медленную. Рассчитано число ионов и заселение 10 нижних

схема
молек.
теплов

Р. 1973 N 9

см. на обороте

уровней He при условии, что протоны теряют часть кинетич. энергии, а вторичные электроны — всю энергию. Показано, что около 30% кинетич. энергии протонов идет на возбуждение атомов He, причем половина из них возбуждается в 2^1P -состояние. Предполагалось, что ВУФ-излучение возникает в результате распада D и B молекулярных состояний He_2 . Сечения возбуждения атомов He оценивались в борновском приближении. Приведены графики временной зависимости скорости затухания при различных давлениях атомов He. Приведена схема молекулярных термов He_2 , построенная на основании эксперим. и теоретич. результатов. Обсуждаются различные модели механизмов, приводящих к ВУФ-излучению. Библ. 42.

В. П. Шевелько

He I

Bep-4892-X

1973

Berry H.G; et al.

(Ci)

"Nucl. Instr. and Meth."

1973, 110, 43-49.

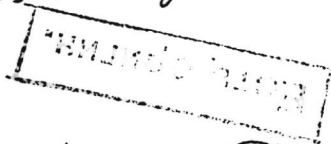
(cur. Li; III)

He (ϵ_i)
Li (ϵ_i)

$\bar{x}$ 7892

1973

Berry M.G., Desesquelles J., Dufay M.,
Nucl. Instrum. and Meth, 1973, 110,
43-49. Discuss, 49-50 (corr).
Doubly-excited states in light atoms.



Pue Guy, 1973, 12 & 413

10

(9)

He

XI-3754

1973

2 Д5. Виртуальные орбитали, энергии возбуждения и силы осцилляторов. Björn Noralv. Virtual orbitals, excitation energies, and oscillator strengths. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1973, 6, № 8, 1412—1417 (англ.)

(E1)

Обсуждается схема расчета виртуальных орбиталей в методе ССП, предложенная Хузинагой и Арнау (см. РЖФиз, 1971, 1Д11, 8Д148) и основанная на модификации хартри-фоковского оператора. Показано, что метод Хузинаги и Арнау эквивалентен ограниченному учету конфигурац. взаимодействия в немодифицированной схеме ССП. Указанная схема испытана на примере расчета энергий возбуждения и сил осцилляторов переходов атома He. Результаты расчета свидетельствуют о хорошей применимости метода. А. Б.

ф 1974 №2

He

1973

Д) 6 Д30. Энергии и коэффициенты Z-разложения для D-состояний изоэлектронного ряда гелия. Blanchard Paul, Drake G. W. F. Energies and Z-expansion coefficients for the D states in the helium sequence. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1973, 6, № 12, 2495—2503 (англ.)

В нерелятив. приближении выполнен вариац. расчет энергий состояний $1s3d(^1,^3D)$ двухэлектронных атомных систем с зарядом ядра Z от 2 до 10. Пробная волн. ф-ция определялась в виде разложения по 50 коррелированным базисным ф-циям, представляющим собой симметризованные комбинации членов типа $-\alpha r_1 - \beta r_2, r_1^m r_2^n r_{12}^k$ ($\alpha = Z$). Т. обр. найдены наиболее точные из известных значений энергии $1,^3D$ -состояний. Для HeI: $E(3^1D) = -2,055620115$ ат. ед., $E(3^3D) = -2,055635968$ ат. ед. Полученные результаты использованы далее для определения по методу конечных

Ф. 1974 № 6.

значностей первых шести коэф. E_k разложения E по степеням Z^{-1} . Установлено хорошее согласие найденных значений E_k с результатами прямого расчета этих величин по теории возмущений. Сумма 11 членов разложения по Z^{-1} , полученных по теории возмущений, с высокой степенью точности воспроизводит результаты вариац. расчета энергии при всех $Z=2 \div 10$. Аналогичный вариац. расчет для конфигурации $1s4d$ HeI дает: $E(4^1D) = -2,0312772$ ат. ед. и $E(4^3D) = -2,0312873$ ат. ед.

А. И. Шерстюк

^4He ;

1973

12 Д208. Расчет и определение энергии основного состояния тримеров гелия. Bruch L. W., McGee Ian J. Calculations and estimates of the ground state energy of helium trimers. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 1, 409—413 (англ.)

(E)

Проведены вариационные расчеты энергии основного состояния тримеров ^4He . В расчетах предполагалось, что потенциальная энергия трехчастичной системы является суммой не зависящих от спинов сферически-симметричных парных потенциалов. Расчеты проводились с использованием разного типа полуэмпирических парных потенциалов, при этом в зависимости от типа потенциала вычисленная энергия основного состояния находилась в области от $-0,05 \text{ см}^{-1}$ до $-0,2 \text{ см}^{-1}$ (верхняя граница). Р. Дагис

ф. 1973 № 12

He

1973

5 Д8. Правила Гунда и интерпретация обычно неправильно интерпретируемых разностей энергий термов. Colpra J. P., Brown R. E. Hund's rules and the interpretation and common misinterpretation of energy differences. «Mol. Phys.», 1973, 26, № 6, 1453—1463 (англ.)

правило
Гунда

Отмечается, что правило Гунда о порядке расположения атомных термов, возникающих из одной конфигурации, не согласуется с теорией возмущений, использующей в качестве параметра $1/Z$. Эта теория возмущений, удовлетворяющая в каждом порядке теореме вириала, предсказывает, что расщепление термов обязано одинаковым вкладам изменения электрон-ядерного и электрон-электронного взаимодействий при переходе от одного терма к другому. Обычная интерпретация расщепления как следствие различного электростатич. вза-

Ф. 1974 № 5

взаимодействия электронов в состояниях различной мультиплетности и различного углового момента противоречит теореме вириала. С привлечением полученных ранее (РЖФиз, 1973, 9Д5) разложений для разности электрон-ядерной, электрон-электронной и кинетич. энергий по степеням $1/Z$ показано, что при больших Z вклады двух первых взаимодействий в расщепление термов одинаковы по абс. величине, т. е. терму с наибольшей энергией отвечает наименьшая (а не наибольшая) энергия отталкивания электронов. Предсказываемая теорией зависимость расщеплений термов $^1P - ^3P$ серии $\text{He}(1s2p)$, 3P , 1D , 1S серии $\text{C}(2p^2)$, 4S , 2D и 2P серии $\text{N}(2p^3)$ от $1/Z$ сравнена с эксперим. данными. Проведено аналогичное сравнение для термов $^1\Pi_u$ и $^3\Pi_u$ молекулы H_2 .

Е. Никитин

1973

10 Б13. Явный учет электронной корреляции в молекулярных расчетах. Коррелированная однодетерминантная (КОД) волновая функция. Conroy Harold, Koller Robert D. Explicit electronic correlation in molecular calculations. The correlated single determinant (CSD) wavefunction. «Comput. Chem. Res. and Educ. Proc. Int. Conf., Ljubljana—Zagreb, 1973. Vol. 2». Amsterdam e. a., 1973, 4/177—4/202 (англ.)

Предложен метод проведения молек. расчетов с использованием коррелированной однодетерминантной (КОД) волновой функции, к-рая представляется в виде произведения двух сомножителей, один из к-рых является антисимм. произведением одноэлектронных функций, а другой полюсимм. произведением выражений, зависящих от всех межъядерных расстояний. В расчетах использовано простейшее выражение $C = \prod_{i < j} (1 + \tau_{ij}/2)$. Оптимизация параметров пробных волновых функций проведена с помощью предложенно-

(+3)

A

He

He₂

LiH

H₂

расчет

основн.

составу.

2. 1975 10

го авторами метода поправок по главным направлениям, к-рый представляет собой модификацию метода Ньютона — Рафсона: вместо обращения Гессiana используется диагонализация с последующим движением вдоль главных направлений, отвечающих положительным собственным значениям Гессiana. Метод применен к численному расчету нек-рых систем с 2 и 4 электронами. Рассчитаны основные состояния атома He, молекул He_2 , LiH , H_2 (последнее в широком интервале межъядерных расстояний). Показано, что простейшая форма КОД функции позволяет учесть 75—95% энергии корреляции.

Б. И. Жилинский



He

1973

6 Д26. Расчет некоторых автоионизационных состояний гелия методом стабилизации. Eliezer Isaac, Moualem Avner. Some helium autoionization states and the stabilization method. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1973, Part 2, 69, № 12, 1835—1838 (англ.)

(ϵ_i) Для расчета автоионизационных состояний атома гелия использован метод стабилизации корней секулярного ур-ния, возникающего при применении метода наложения конфигураций для определения уровней энергии атома. Корни этого ур-ния, стабилизирующиеся при увеличении числа конфигураций, определяют энергии как стационарных, так и квазистационарных автоионизационных состояний. Расчет производился на базе одноэлектронных орбиталей, построенных вариационным способом в сфероидальных координатах. Определены энергии трех низших $1P_0$ автоионизационных состояний. Результаты хорошо согласуются с экспериментом.

Л. Н. Лабзовский

ф. 1974 № 6

He

1973

6 Д24. Шестипараметрический расчет 1^1S -состояния гелия. Esquivel J. L., De Téramond G. F. A six parameter calculation of the 1^1S state of helium. «Phys. Lett.», 1973, A46, № 4, 297—298 (англ.)

E_i , расчет

Вариационным методом с волн. ф-цией, содержащей 6 параметров и множитель вида $\exp(-\alpha r_{12})$, вычислена энергия основного состояния гелия, равная $-2,90346$ ат. ед. Полученное значение энергии лучше значений, найденных ранее с ф-циями такого же типа.
И. В. Чиплиц

Ф.1974N6

31031,4511

TE, Ph, Ch

He

40892

1973

1274

Gehanken Aharon, Raz Baruch,

Jortner Joshua.

Emission spectra of homonuclear diatomic rare gas molecules in solid neon.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 4, 1630-1633
(англ.)

0493 клк

973

975

986

ВНИИТИ

He

Смесь IX-4383

(4 Д4.) Прямой расчет энергий ионизации. Переходный оператор для метода $\Delta E_{\text{ССП}}$. Goscinski O., Pickup B. T., Purvis G. Direct calculation of ionization energies. Transition operator for the $\Delta E_{\text{ССП}}$ method. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 22, № 1, 167—171 (англ.)

Рассмотрена задача прямого расчета энергий ионизации многоэлектронных систем в рамках метода ССП с учетом поправок к теореме Купманса, позволяющего достаточно точно воспроизвести величины, полученные как разность энергий ССП основного и ионизованного состояний (метод $\Delta E_{\text{ССП}}$). Показано, что использование «переходного» оператора Хартри — Фока, который представляет собой оператор для «переходного» состояния в терминологии Слэтера (т. е. состояния, в котором данная орбиталь заполнена наполовину), позволяет получить результат, совпадающий с точностью до 2 порядка теории возмущений с результатом метода $\Delta E_{\text{ССП}}$. В качестве примера проведены расчеты энергий ионизации атомов He, Li, Be, Ne и Ar, и найдено, что метод переходного оператора и $\Delta E_{\text{ССП}}$ дают согласующиеся с экспериментом близкие результаты.

А. Багатурьянц

1973

IX-4383

IX-4383

(41) м.р

(41) м.л.в.

IX

Ф. 1974
N 4

He

1973

10 Д119. Приближенный метод локализованных орбиталей. К у н з А. В а р г у. Approximation to the method of local orbitals. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1973, 6, № 4, L47—L50 (англ.)

Рассматривается первое приближение по интегралам неортогональности к решению уравнения Адамса—Гильберта (РЖФиз, 1970, 4Е919). Показано, что это приближение имеет весьма широкую область применимости и дает хорошее приближение к оптимальным локализованным орбиталям. Метод проиллюстрирован на примере расчета системы He_2 при межъядерных расстояниях от 2 до 10 ат. ед. Энергии системы, рассчитанные по ограниченному методу самосогласованного поля и по методу локализованных орбиталей в первом приближении по перекрытию, совпадают с 4 значащими цифрами, исключая наименьшее из рассмотренных расстояний, для которого метод ССП дает результат на 0,2% более точный.

Т. К. Ребане

ϵ_i, m, n

Ф. 1973, № 10

He^{2+}

1973

Elaguno, Claro T., et al;

Int. J. Quantum Chem.,

1973, 7(4), 819-34.

u. n.

papers

(em. H_2^+ ; III)

40222.755I

TE, Ph. MGU

He

42529

1973

1789

Leonard L., Browne J. C., Olson R. E.

Theoretical low-energy inelastic-scattering cross sections for $\text{He}(2^3\text{S}) + \text{He}(1^1\text{S}) \rightarrow \text{He}(2^1\text{P}) + \text{He}(1^1\text{S})$: curve cross-

см. прод. 1

0047-4111

037 037

40

ВИНИТИ

551

прод. 1

sing between the $c^3\Sigma_g^+$ and $b^3\Pi_{u\text{g}}$ sta-
tes of He_2 . "Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1973,
8, N5, 2380-2386

(англ.)

0047 ммк

037 037 40

ВИНИТИ

He

1973

B. Liu,
A.D. McLean.

"J. Chem. Phys"

1973, 59, 4557.

Accurate calculation of
attractive interaction...

He

Оттиска 12699

1973

возбуждение
авиоинженера
советской

Липовский В.С.
Сергеевский В.С.

Доктор.
участи

Оттиска и стенограмм.
1973, 34, вып. 6, 1046-
-1052

He⁻

1973

A-2710

MAKITA T., et al.

Mass spectros., 1973, 21,
N 4, 293-301.

He⁻

j

He I

XI-3818

1973

(Ei)

→ 130761r Energy levels of neutral helium (He I). Martin, W. C. (Inst. Basic Stand., Natl. Bur. Stand, Washington, D.C.). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1973, 2(2), 257-65 (Eng). A review with 47 refs. The compilation of all identified levels is based on the most accurate available observations, and includes 48 levels above the He II 1^2S limit (2-electron excitation).

CA1973

79, 22

40305.6649

He

1973

Ph, Ch, TE

96201

X 45-3919

McCullough B.A., Jr. Seminumerical
SCF calculations on small diatomic
molecules. "Chem. Phys. Lett.", 1974,
24, N 1, 55-58 (англ.)

0058 ММК

041 042 П. 5

ВИНИТИ

1973

He

7 Д21. Вариационные расчеты связанных состояний позитрона и гелия. Moussa A. H., Radi H. M. A. Variational calculation of the positron-helium bound state. «Physica», 1973, 69, № 2, 587—597 (англ.)

Вариационные расчеты Рэлея—Ритца для исследования возможности существования связанных состояний позитрона и гелия выполнены с помощью 9 различных пробных ф-ций, содержащих от 4 до 18 параметров. Найдено, что позитрон не образует связанного состояния с атомом He, что согласуется с адиабатич. приближением для условий существования связанных состояний и противоречит подобным расчетам, использующим 4 параметрич. ф-ции.

расч. 71

QD1974 N7

40411.1801

Ph, TE, MGU

научн. сообщением 1973

34469
Атомов He

02
* 4446

Nageshwar Prasad, Quantum mechanical
interpretation & analysis of the interaction
of two neutral helium atoms.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1973,
11, N 8, 541-544

(англ.)

0083 ББК

069 070

076

ВИНИТИ

He

1973

6 Д94. Неупругое рассеяние $\text{He}(2^3\text{S})$ на $\text{He}(1^1\text{S})$ при малых энергиях. Olson R. E., Morgenstern R., Lorents D. C., Browne J. C., Lenamon L. Low — energy inelastic scattering of $\text{He}(2^3\text{S})$ on $\text{He}(1^1\text{S})$. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1973, 8, № 5, 2387—2389 (англ.)

Неупруг.
рассеяние

Времяпролетный метод применен для измерения энергетич. потерь метастабильных атомов $\text{He}(2^3\text{S})$ при рассеянии на атомах $\text{He}(1^1\text{S})$. Нейтральный пучок, содержащий атомы He в основном и метастабильном состояниях, получен при перезарядке ионов He^+ в парах Cs. Рассеянные метастабилы детектировались с помощью поворотного каналового умножителя. Другой каналовый умножитель, установленный при фиксированном угле рассеяния, служил монитором интенсивности пучка. Времяпролетные спектры метастабилей измерены при энергии $E=8,65$ эв (Ц-система) и углах рассеяния $\theta=1^\circ$, 3° и $5,5^\circ$. Установлено, что при $\theta=1^\circ$ рассеяние является в основном упругим, а при больших углах θ в

ф. 1974. №6

⊗ ⊕ He₂

спектре появляется второй пик, соответствующий энергетич. потерям 1,15 эв и связанный с возбуждением $\text{He}(2^3P)$ -состояния. Расчет диффер. сечений упругого и неупругого рассеяния произведен по методу сильной связи с использованием потенц. кривых и матричных элементов. Наблюдаемое согласие между теорией и экспериментом как в отношении величин сечений, так и их структуры указывает на то, что механизм возбуждения обусловлен вращательной связью между $c^3\Sigma_g^+$ - и $b^3\Pi_g$ -состояниями He_2 .

И. Флакс



40214.8861
TE, Ph, MGU

4
He

23025

1973

* 5-3228

Parliński K.

Moments of the density-density correlation function of liquid He⁴.

"Acta phys. pol.", 1973, A 44, N 6,
813-827

(англ.)

0044 ММК

025 029

ВИНИТИ

He (checkup)

1973

101987j The 600-Å bands of helium. Peatman, William B.; Wu, Dan T. C. (Chem. Dep., Vanderbilt Univ., Nashville, Tenn.). *Chem. Phys.* 1973, 2(3), 335-41 (Eng). Time resolved spectroscopy indicates that the states which give rise to the 600-Å bands of He are populated via He(1^1S), He(2^1S) collisions in the hot arc (initial) period of the discharge. Pronounced differences are obsd. in the emission curves of the mol. He continuum at 623, 670, and 800 Å which are briefly related to the kinetics involved in the resp. excitation processes.

C.A. 1974. 80. N18

He

Pochat Amédée

1973

Thèse doct., sci phys. Univ
Bretagne occidentale, 1973,
170p, ill (фр)

(см O₂; III)

возбужд.
состояния
и переход

He (2^3S) with

1973

$N_2, O_2, CO, HBr,$
 HCl, Cl_2

W.C. Richardson,
D.W. Setser

J. Chem. Phys., 1973,
58(5), 1809-25

"Penning ionization optical
spectroscopy: metastable helium
(He 2^3S) atoms with ..."

He

1973

11 Д26. Влияние тонкой структуры линий гелия на измерения концентрации метастабильных атомов методом оптического поглощения. Rajotte Raymond. Influence de la structure fine des raies de l'hélium sur les mesures de concentration d'atomes métastables par absorption optique. «Can. J. Phys.», 1973, 51, № 9, 1024—1025 (англ.; рез. франц.)

Получена ф-ла для коэф. пропускания $T(k_0L)$ с учетом тонкой структуры линий (на примере перехода

измер.

Концентр

• $3^3P \rightarrow 2^3$ в He) в случае произвольного поглощения. Расчет $T(k_0L)$ с учетом структуры и в пренебрежении ею (по Митчелу и Земанскому) показывает, что при большом поглощении ошибка в определении k_0L и, соответственно, плотности метастабильных атомов может достигать 100%.

А. Резников

ж. 1973 № 11

диссертация

1973

He

Ne

Ar

определение
относительных
сечений
иониз.

8 Д80 Д Определение относительных сечений ионизации возбужденных долгоживущих атомов He, Ne, Ar электронным ударом. Shearer Walter. Détermination des sections efficaces relatives d'ionisation des atomes excités de longue durée de vie de l'hélium, du neon et de l'argon par bombardement électronique. Thèse doct. sci. Univ. Paris-Sud, 1973, 128 p., ill. (франц.)

Описан метод изучения возбужденных долгоживущих атомов, основанный на использовании атомарного пучка, пересекаемого двумя пучками электронов. Получены величины относит. сечений ионизации возбужденных атомов He, Ne, Ar электронами с энергией на 2—3 эВ ниже потенциала ионизации соответствующего атома в основном электронном состоянии. В процесс ионизации вносят вклад как метастабильные атомы, так и атомы в высоковозбужденных ридберговских состояниях. Основные разделы диссертации: Гл. 1. Свойства возбужденных атомов He, Ne, Ar с большим временем жизни. Гл. 2. Эксперим. методы. Гл. 3. Аппаратура. Гл. 4. Эксперим. методика. Гл. 5. Точность измерений. Гл. 6. Эксперим. данные. Гл. 7. Обсуждение результатов. Библи. 136.

(42)

(41)

lit.

18

ф. 4975 № 8

Г. К.

30625.8891
Ph, TE, IM MGU

He

42529

4831

Sol C., Boulmer J., Delpech J.-F.

Elastic electron-neutral-atom interaction measurements in helium at ultralow energies.

"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1973, 7, N 3,
1023-1028

(англ.)

0902

883 886

895

ВИНИТИ

30924.6049

Ph, TE, MGU

He

308097GR

Омичев

1148

Steichen J.C., Franklin J.L.

Discharge emission identification by
photoelectron spectroscopy.

"Appl. Opt.", 1973, 12, N 8, 1971-1975

(англ.)

0367 ББК

952 954 960

ВИНИТИ

31031.4522

Ph, Ch, TE, MGU

He

40892

1973

1807

Wang P.S.C., Benston Margaret Lowe,
Chong D.P.

Constrained variation method for excited-
state energies of atoms and molecules.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 4,

1721-1725 (англ.) 0993 БМК

973

975

386

ВИНИТИ

1973

He
Ne

(Ei)

Д 3 Д32. Высоковозбужденные состояния гелия и неона. Wing W. H., Lea K. R., Lamb W. E., Jr. Highly excited states of helium and neon. «Atom. Phys. 3. Proc. 3rd Int. Conf., Boulder, Colo, 1972». New York-London, 1973, 119—141 (англ.)

Для изучения микроволн, расщеплений высоковозбужденных состояний применяется смешанная (экспериментальная и теоретическая) методика, основанная на модели квантового дефекта. В эксперим. технике используется метод микроволн. оптич. резонанса. Основное внимание уделено состояниям с $n=7$, $l \geq 2$ He, хотя некоторые оптич. линии измерены и идентифицированы для $n=9, 10, 11$ и 20. При интерпретации аналогичных данных для неона возник ряд затруднений,

ф. 1975 №3

71

X

обусловленных близким взаимным расположением некоторых уровней энергии (разность между ними составляет $1-2 \text{ см}^{-1}$). Библ. 21.

З. Б. Рудзикас

50116.7201
Ph, TC, MDU

He

42529 02

1974

* 4-7998

Anderson M.T., Weinhold F.

Relative accuracy of length and velocity
forms in oscillator-strength calculations.

"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1974, 10, N 5,
1457-1463
(англ.)

0274 РИИ

41119.1857

Ph, TC, Ch

He

29864 02

1974

2767

Archibald Robert M., Armstrong David R.,
Perkins Peter G. Molecular calculations
using spherical gaussian orbitals. Part
1. Optimisation of the atomic parameters
for the first-row atoms.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,
Part 2, 70, N. 9, 1557-1569 (англ.)

216 219 0 2 2 8

0236 ПАВНИТИ

40513.8871
TE, Ph, MGU

He

30053

02

1974

2103

Banyard K.E., Seddon G.J.

The influence of electron correlation on
generalized oscillator strengths for He.
"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1974,
7, N 4, 429-439

(англ.)

0108 мик

088 090

0 1 0 0

ВНИИТИ

41014.8731
Ch, Ph, TC, MGU

40892 02

1974

He

*4-6829

Bromberg J. Philip.

Absolute differential cross sections of
electrons elastically scattered by the
rare gases. I. Small angle scattering
between 200 and 700 eV.

"J.Chem. Phys.", 1974, 61, N 3, 963-969

(англ.) 0211 пик

181 181

203

ВИНИТИ

41008.8833
Ch, Ph, TC, MGU

He

30063

02. 1974

(сметр)

* 4-6605

Cvejanovic S., Read F.H.

A new technique for threshold excitation spectroscopy.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1974, 7, N10,
1180-1193

(англ.)

0208 пик

ВИНИТИ

170 175

He (I)

1974

11 Д296 Д. Анализ профилей и измерения относительных вероятностей переходов некоторых синглетных линий гелия. Damaschini Roland. Le grade de docteur es-sciences. Analyse de profils et mesures de probabilités de transition relatives de quelques raies de Singulet de l'hélium. Thèse doct. sci. phys. Univ. Paris—Sud, 1974. 102 p., ill. (франц.)

Диссертация состоит из трех глав, введения, заключения и четырех приложений. Гл. 1 посвящена изучению спектральных линий синглетов HeI. Оценен вклад автоионизации, племени излучения, дан общий анализ изучения профилей спектральных линий. С помощью интерферометра Фабри—Перо измерены профили линий 5047 Å (2^1P-4^1S) и 4292 Å (2^1P-4^1D), которые сравниваются с теоретич. расчетами. В гл. 2 методом полного поглощения описаны результаты измерений относит. вероятностей переходов 8 синглетных линий уровней HeI. Дано подробное описание установки и метода измерения т-ры. В гл. 3 обсуждается полученное отличие между профилями линий излучения и поглощения HeI и возможные причины, которые приводят к этому отличию. Основные результаты диссертации резюмированы в заключении. В. П. Шевелько

диссертация

физ.

ф. 1976
N 11

40711.6163

Ph, TC

42531

02

1974

He

2196

Dunning F.B., Stebbings R.F.Absolute cross sections for the photoionization of He ($n^{1,3}P$) atoms."Phys.Rev.Lett.", 1974, 32, N23, 1286-1289

(англ.)

0148

ВИНИТИ

122

126

140

40513.8856
TE, Ph, MGU

He

30063 02

1974

2107

Froese Fischer Charlotte.

Correlation effects important for accurate oscillator strengths.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1974,
7, N 4, L91-L96

(англ.)

0108 экз

ВНИИТИ

He

1974

9 Д307. Штарковские профили линий излучения He при больших плотностях. Greig J. R., Jones L. A., Lee R. W. High-density Stark profiles of two neutral Helium lines and their forbidden components. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1974, 9, № 1, 44—51 (англ.)

Измерены профили линий 4471 Å (4^3D-2^3P), 4470 Å (4^3F-2^3P) и их компонент в He при плотностях электронов $N_e = (1,6-4,4) \cdot 10^{17}$ см⁻³ и т-ре $T_e \sim 25\,000^\circ$ К. Расчеты профилей проводились методом случайной фазы для электронов и в квазиклассич. приближении для ионов. Вычисленные и измеренные профили линий находятся в хорошем согласии. Библ. 32.
В. П. Шевелько

профили
линий

сп. 1974. 149

1974

He

 H_2^+ расчет
энергии
осн. сост.

3 Д163. Теория возмущений Бриллюэна — Вигнера и обобщенное уравнение на собственные значения. Laughlin C., Woodward M. R., Amos A. T. Brillouin-Wigner perturbation theory and the generalized eigenvalue equation. «Int. J. Quant. Chem.», 1974, 8, № 4, 491—498 (англ.)

Предложена методика решения обобщенной задачи на собств. значения в рамках теории возмущений Бриллюэна — Вигнера. Рассмотрены случаи, когда возмущенный и невозмущенный операторы имеют как одинаковую, так и различную симметрию. Развита методика применена к расчету энергии основного состояния атома He и молекулярного иона H_2^+ . Собств. значения, как обычно, определялись итерационным методом. Найдено, что в рассмотренных задачах теория возмущений Бриллюэна — Вигнера в общем дает более удовлетворительные результаты, чем теория Рэлея — Шрёдингера.

А. И. Шерстюк

Ф. 1975 № 3



1974

He

CO₂(расчет
E_i; см.
осцил.)Ф. 1975
N3

3 Д328. Метод уравнений движения: неупругое рассеяние электронов в гелии и CO₂ в борновском приближении. McCurdy Clyde W., Jr., McKoy Vincent. Equations of motion method: inelastic electron scattering for helium and CO₂ in the Born approximation. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 7, 2820—2826 (англ.)

С помощью метода ур-ний движения рассчитаны энергии возбуждения и обобщенные силы осцилляторов для гелия и CO₂. Показано, что этот метод позволяет получить энергии возбуждения системы без расчета волн. ф-ций основного и возбужденных состояний и что он очень хорошо подходит для расчета матричных элементов оператора, используемого в борновском приближении. Результаты для гелия хорошо согласуются с расчетами других авторов. Для молекулы CO₂ рассчитанные энергии возбужденных состояний ¹P_g, ¹Δ_u, ¹Σ_u⁺ и ¹Π_u отличаются от эксперим. значений, полученных из спектра энергетич. потерь, не более чем на 10%. Более подробная информация об электронном спектре CO₂ получается при сравнении теоретич. и эксперим. значений обобщенных сил осцилляторов. В. Г. Левин

41

X

He

X-86-31

1974

6 Д137. Получисленные самосогласованные расчеты для малых двухатомных молекул. McCullough E. A., Jr. Seminumerical SCF calculations on small diatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 24, № 1, 55—58 (англ.)

расчет
молекул

Предложен метод численного решения уравнений Хартри—Фока для двухатомных молекул, состоящий в численном интегрировании по эллиптич. координате $\xi = (r_A + r_B)/R$ и аналитич. интегрировании по координатам $\eta = (r_A - r_B)/R$ и ϕ . Полученные этим методом численные решения для He, He₂ и LiH оказались существенно точнее известных аналитич. решений ядер молекулы; энергии же улучшились только на несколько единиц в пятом—шестом знаке. И. В. Чиплис

Ф. 1974 № 6

42

He

12 B15. Получисленные расчеты малых двухатомных молекул методом ССП. McCullough E. A., Jr. Seminumerical SCF calculations on small diatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 24, № 1, 55—58 (англ.)

1974

Предложен метод частичного численного интегрирования ур-ний Хартри—Фока для двухатомных молекул (случай замкнутых оболочек). Орбитали Хартри—Фока записываются в эллипсоидальных координатах: $\psi_n(\xi, \eta, \varphi) = \chi_{nm}(\xi, \eta) \exp(im\varphi)$, причем функции χ_{nm} представляются частными суммами ряда $\chi_{nm} =$

расчет
молекулы

$$= \sum_{l=|m|}^{\infty} f_{nml}(\xi) P_l^m(\eta), \text{ где } P_l^m \text{ —присоединенный поли-}$$

ном Лагерра, а f_{nml} —подлежащая определению функция переменной ξ . После подстановки ψ_n в ур-ния

1898 + 8634

X

Л. 1974 № 12

+2

He₂, LiH;



Хартри—Фока и интегрирования по ϕ и η получается система интегродифференциальных уравнений для функций f_{nml} . Эти уравнения интегрируются численно, в силу чего метод и назван «получисленным». Преимущество метода заключается в возможности получить равномерное приближение для точных орбиталей во всех областях пространства — как вблизи, так и вдали от ядер. Приведены результаты расчета данным методом атома He (атом формально принят за молекулу с межъядерным расстоянием 2 ат. ед. и с нулевым зарядом одного из ядер), молекул He_2 (4 функции f_{nml}) и LiH (12 функций f_{nml}). По полной и орбитальной энергиям метод дает практически те же результаты, что и обычный матричный вариант метода Хартри—Фока, однако при расчете величин максимумов функций на ядрах результаты получаются точнее.

М. Е. Ерлыкина

1974

He

квазипере-
сечения
сингл.-трипл.
уровней

11 Д16. Наблюдение синглет-триплетных квазипересечений в He. Miller Terry A., Freund Robert S., Tsai Foch, Cook Thomas J., Zegar-ski Bernard R. Observation of singlet-triplet anti-crossings in He. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1974, 9, № 6, 2474—2484 (англ.)

Изучалось квазипересечение синглетных и триплетных уровней атома гелия — уровней 7^1D и 7^3D и уровней 8^1D и 8^3D , которые имеют место, соответственно при напряженностях магн. поля 9710 ± 20 и 6750 ± 25 гс. В окрестности точки квазипересечения происходит (взаимно компенсирующее друг друга) изменение интенсивностей излучения с синглетного и триплетного уровней. Из анализа формы сигнала квазипересечения определены по-

ф. 1974. N 11

вые, уточненные значения синглет-триплетных расщеплений (13642 ± 28 Мгц для $7d$ -состояния и 9483 ± 35 Мгц для $8d$ -состояния). Эти результаты показывают, что ошибки наилучших оптич. измерений синглет-триплетного расщепления составляют несколько гигагерц. Определены также недиагональные матричные элементы спин-орбитального взаимодействия между синглетным и триплетным состояниями; они в несколько раз больше соответствующих диагональных матричных элементов. Отмечается перспективность метода квазипересечений для изучения характеристик ридберговских состояний атомов и молекул, точное измерение которых оптич. методами затруднительно.

Т. К. Ребане

50422.7621

Ph, MGU, TC

42529

He

July 7. 1974
(Eg)

1974

*4-8798

Mueller R.O., Rau A.R.P., Spruch Larry.
 Lowest energy levels of H^- , He, and Li^+
 in intense magnetic fields. "Phys. Rev.
 A: Gen. Phys.", 1974, 11, N 3, 789-795

(см H^- ; III)
 (англ.)

0349 P.14K

322 327

0349

ВИНИТИ

He⁻

XI - 4093

1974

10 Д47. Возбужденные состояния отрицательных ионов и определение их энергии связи методом отрыва электрона электрическим полем. Опарин В. А., Ильин Р. Н., Серенков И. Т., Соловьев Е. С. «Ж. эксперим. и теор. физ.», 1974, 66, № 6, 2008—2019 (рез. англ.)

(Ae)

Исследовался отрыв электрона от отрицат. ионов под действием внешнего электр. поля с напряженностью $E \leq 450$ кв/см. Показано, что возбужденные метастабильные состояния с энергией связи $\epsilon < 0,2$ эв имеются у следующих ионов: He⁻(⁴P), C⁻(²D), Si⁻(²P), Al⁻(¹D). По скорости распада этих состояний в поле E определена величина их энергии связи, которая¹ составляет: $\{0,075 \pm 0,005\}$ эв для He⁻ (¹s²s²p⁴P), $\{0,037 \pm 0,003\}$ эв для C⁻(²D), $\{0,035 \pm 0,004\}$ эв для Si⁻(²P), $\{0,095\}$ эв для Al⁻(¹D). Получена оценка энергии связи основного состояния Al⁻(³P) (сродства к электрону) ($\geq 0,2$) эв. Автореферат

ф. 1974 N10

(+3)



Зурвигу

He
№2

(м.п.)

⊕

⊗

XI-4225

11 Д131. Атомные и молекулярные электронные спектры и другие свойства, рассчитанные с помощью электронного пропагатора. Purvis George D., Öhrn Yngve. Atomic and molecular electronic spectra and properties from the electron propagator. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 10, 4063—4069 (англ.)

Метод электронного пропагатора (ф-ции Грина) применен к расчету линейчатых фотоэлектронных спектров, полных энергий основных состояний и электронных свойств атомов и молекул. Численные результаты приведены для атома гелия и молекулы азота. Наилучший результат для электронной энергии основного состояния He равен —2,9004 ат. ед., а для основного состояния молекулы азота —54,671 ат. ед. Вычислен также линейчатый спектр фотоэлектронов молекулы азота в интервале энергий от 50 до 10 эв (что соответствует энергиям связи валентных электронов). По мере уточнения приближения положения и интенсивности пиков все лучше согласуются с эксперим. спектром фотоэлектронов и передают даже наличие сателлитов в спектре. Подчеркивается зависимость результатов, получаемых по методу электронной ф-ции Грина при использовании конечной системы базисных ф-ций, от выбора базиса.

Т, К. Ребане

1974
hzbv

ф. 1974. № 11

He

BQ-4786-IX

1974

(parent)

Santos, M. L., Santos,
E., J. Chem. Phys.,
1974, 61, NG, 2471

(Eo)
(Ei)

1974

He

Li

8 Д22. Релятивистские Z-разложения для возбужденных состояний He и Li. Snyder R. Relativistic Z-expansions for excited states of He and Li. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1974, 7, № 3, 335—341

Для возбужденных конфигураций изоэлектронных рядов He и Li, содержащих 3 *p*- и 4 *p*-электроны получены коэф. E_1 и E_2 разложения релятив. энергии E

по обратным степеням заряда ядра: $E = \sum_{j=0}^{\infty} E_j Z^{4-j}$. Вели-

чина E_1 определена обычным способом посредством вычисления матричных элементов электростатического и брейтовского взаимодействий. Найдено, что при вычис-

релятивист.

Z-разложением.

Ф. 1974. № 8

⊕

⊗

лении средней по jj -конфигурации энергии двух не-эквив. электронов брейтовская часть взаимодействия дает вклад только через посредство обменных членов. Коэф. E_2 возбужденных двухэлектронных состояний получен с помощью экстраполяции результатов вариац. расчета (РЖФиз, 1972, 2Д47). Найденные разложения использованы для расчета дублетного расщепления уровней термина $1s^2np^2P$ ($n=2, 3, 4$). Результаты сравнены с имеющимися теоретич. и эксперим. данными.

А. И. Шерстюк

40523.842

TE, Ph

He 22024

нагрім продукта
к промону

02

1974

Xy 5030

Tamásy-Lentei I., Szaniszló J.Calculation of the proton affinity of
several small molecules by the FSGO
method."Acta phys. Acad. sci. hung.", 1974, 35, N1-4,
201-211

(англ.)

0 111 5030

092 097

ВИНИТИ

He

1974

(Phys. Rev. A)

7808w Higher Rydberg states of helium using the polarized orbital method. Comments. Temkin, A.; Silver, A. (Goddard Space Flight Cent., NASA, Greenbelt, Md.). *Phys. Rev. A* 1974, 10(4), 1439-41 (Eng). Rydberg states of He of the configuration $(1s nl)1.3D, 1.3F$ for $n = 3-7$ were calculated using polarized-orbital and related approximations, notably the extended-polarization approximation. The singlet states are superior in the full polarized-orbital approximation whereas the triplet cases are better in the extended-polarization approximation. Reasons for this behavior are given. Comparison is also made with recent diagrammatic calculations of Chang and Poe. A comment on some recent polarized-orbital calculations of photoionization is included.

C.A. 1975 82 N2

He

Tsui Francis S. M. 1974

Freed Karl F.

расчет
атомн
ноет.

"Chem Phys" 1974, 5, N 3,
337-349 (англ)

(см Be; III)

1764-XI

г. 1975. N 7.

40920.6718

A, TC

He

49088

(номер. естественн.
атомн. числ.
симв. элемента)

1974

4-6425

Tully J.A., Serrão J.M.P. Electron
impact excitation of metastable helium-
like ions. "Astron. and Astrophys.",
1974, 33, N 2, 187-189

(англ.) 0196

157 162

186

ВИНИТИ

Ar, Kr, Ne, Xe, He (Ei). XI 4155-1974:

Yakozawa M., Matsuzaki H.,
Kamegaya T., Nakajima M.,

J. Opt. Soc. Amer., 1974, 64 (3),
396-7.

Grottrian charts for atoms and
ions of rare gases.

C.A. 1974. BO. N24.138736e.

10 (⊕)

8

He^-
 He^{2-}

авторреферат

1975

Абраменков А. В.

(I)
равен

Полуклассический
расчет энергетических
свойств атомов и
2х ат. молекул...

50403.9010

Ch, TC, MGU

49587

He

1975

3137

Ahlrichs Reinhardt, Driessler Frank.

Direct determination of pair natural orbitals. A new method ☐ to solve

the multi-configuration Hartree-

Fock problem for two-electron wave functions. "Theor.chim.acta", 1975, 36, N4, 275-287 (англ.)

304 305

032.9

0337

пик

ВИНИТИ

He

возбужденные
состояния
кв. экв.
расчет

X 1976 N3

3 Д13. Возбужденные состояния He: поведение функции межэлектронного углового распределения. В а -
nyard К. Е., Ellis D. J. Excited states of He: the
behaviour of interelectronic angular distribution func-
tions. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1975, 8, № 14,
2311—2319 (англ.)

Введенная авторами ранее (см. РЖФиз, 1973, 5Д27) ф-ция межэлектронного углового распределения (ФМУР) вычисляется для возбужденных состояний атома гелия. ФМУР определяется как интеграл от двухэлектронной матрицы плотности по координатам электронов, за исключением координаты межэлектронного угла θ_{12} , и пропорциональна, т. обр., плотности вероятности последнего. Для расчетов использовались точные хартри-фоковские волн. ф-ции и ф-ции, учитывающие межэлектронную корреляцию. Разность ФМУР, рассчитанных с корреляционными и хартри-фоковскими ф-циями, определяется как «угловая дырка» (УД). Найдено, что для всех возбужденных синглетных и триплетных состояний при $\theta_{12}=0$ существует УД, однако глубина ее меньше, чем в основном состоянии. Несмотря на то, что ФМУР для различных состояний имеет различную форму, ширина и форма УД для них почти совпадает, а глубина убывает в ряду: $^3S > ^3P > ^1P$. Дана новая формулировка правила Гунда в терминах углового распределения электронов.

Е. П. Смирнов

1975

He -

1975

с. (8 Д106.) Образование отрицательных ионов гелия путем захвата электронов из атомов гелия в основном состоянии. Baragiola R. A., Salvatelli E. R. Formation of negative helium ions by electron capture from ground-state helium atoms. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1975, 8, № 3, 382—387 (англ.)

Образование
отрицат. ионов

Измерены сечения захвата электронов σ_{01} - атомами He в основном состоянии при столкновениях с атомами Mg и Pb в диапазоне энергий 20—40 кэВ. Атомы He получались в результате перезарядки анализируемого по массе моноэнергетич. пучка ионов He^+ . Пучок атомов He затем проходил через камеру, содержащую пары исследуемого металла. Появляющиеся при этом заряженные компоненты анализировались в магн. поле и детектировались подвижным детектором. Сечения σ_{01} -

(41) л. е

Ф 1975 N 8

определялись из наклона кривой зависимости относит. величины тока отрицат. ионов He^- от толщины мишени. В случае столкновений атомов He с атомами Pb ионы $\text{He}^-(^4\text{P})$ могут образоваться путем перехода двух внешних электронов от Pb к He и одного из электронов от He к Pb : $\text{He}(^1\text{S}) + \text{Pb}(^3\text{P}) \rightarrow \text{He}^-(^4\text{P}) + \text{Pb}^+(^2\text{P})$. В системе $\text{He}(^1\text{S}) + \text{Mg}(^1\text{S})$ подобный процесс образования ионов $\text{He}^-(^4\text{P})$ маловероятен из-за нарушения правила сохранения спина Вигнера и наблюдение ионов He^- может служить подтверждением представления о существовании связанного дублетного состояния He^- .

И. Флакс

1975

He

3 Д287. Измерение интервалов $n^1D \rightarrow n^3D$ в He для n от 8 до 11. Beyer H. J., Kollath K. J. Measurement of the $n^1D - n^3D$ intervals in He, $n=8$ to 11. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1975, 8, № 14, L326—L330 (англ.)

сверх-
тонкая
структ

Измерены интервалы сверхтонкой структуры гелия для $n=8$ (перепроверка ранее полученных значений) и для $n=9, 10, 11$ (впервые) с использованием метода антипересечения синглет-триплетных сигналов. Установка включала в себя запаянную стеклянную ампулу с гелием при давл. $1 \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст., которая помещена в зазор электромагнита. Параллельно силовым линиям

X 1976 №3

магн. поля направлен пучок электронов с энергией 100 эв. Свет, излученный перпендикулярно магн. полю, проходит через линейный поляризатор. Спектральные линии $n^{1(3)}D \rightarrow 2^{1(3)}P$ выделяются монохроматором. Интенсивность света регистрировалась как ф-ция напряженности наложенного магн. поля. Получены следующие значения: 9326 ± 35 ($n=8$), 6644 ± 35 ($n=9$), 4889 ± 30 ($n=10$), 3696 ± 30 ($n=11$) МГц.

Л. С. Гуляева

1975

He

(T₀)

7 Г310. Температура атомов в основном состоянии в гелиевом послесвечении. Bouvier Annie, Bouvier Albert, Monteil André, Samba Charles. Evaluation de la température des atomes à l'état fondamental dans postluminescence d'hélium. «C. r. Acad. sci.», 1975, 281, № 23, B587—B590 (франц.; рез. англ.)

Вычислена т-ра атомов в основном состоянии в течение 12 мксек после окончания импульсного микроволнового разряда. Для расчетов использовались эксперим. данные об энергетич. балансе и электронной т-ре в послесвечении He при давл. 4 мм рт. ст. Полученное таким образом значение т-ры составляет $T_0 = 700 \pm 100^\circ \text{K}$. Резюме

Ф. 1976 № 7

60108.1206

Ph, Ch, TC, MGU

30088

He

1975

3655

Datta D.K., Ghoshal S.K., Sengupta S.
Hartree-Fock wave functions and oscil-
lator strengths for the helium isoelect-
ronic sequence.

"J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer",
1976, 16, N1, 49-52.

(англ.) 0538 6410

ВИНИТИ

507 510

60328 TC, MGU, Ch, Ph

He

1975
4-11860

Daudel R., Mezey P.G., Goddard J.D.,
Csizmadia I.G. A relationship between
the sizes and ^energies of atomic orbitals.
"Can. J. Chem.", 1975, 53, N 24, 3739-3746
(англ., рез. франц.)

0587

562 567 5.79

ВИНИТИ

³He

1975

nonemul.
not - emul

15945z Nonadditive potential in the triatomic helium system. Gonzalez, T. L. (Esc. Super. Fis. Mat., Inst. Politec. Nac., Mexico City, Mex.). Report 1973, INIS-mf-1270, 63 pp. (Span). Avail. INIS Sect., Int. At. Energy Agency, Vienna, Austria. From Nucl. Sci. Abstr. 1975, 31(6), Abstr. No. 14995. The nonadditive energies of 3 bodies were calcd. for different geometric configurations in one of the simplest systems, that formed by 3 He atoms. The basis was the Roothaan selfconsistent field method with linear combinations of at. orbitals for interat. distances permitting overlapping. The POLYATOM program was used for the calcn. The calcs. were 1st made for linear configurations in general. The nonadditive potential was also calcd. for isosceles triangular configuration and for scalene triangles in general. The nonadditive effect is most important for short interat. distances where the electron overlapping is large. The effect is attractive for equilateral triangles and becomes repulsive to the extent that the triangular configuration becomes linear.

C.A. 1975. 83 N2

He

as of

1975

Kalitejevski N.J. et al

Astroph. Phys. Proc. 4th

Int. Conf. Heidelberg, 1975

New York - London, 1975, 19-45

(examined
by author)

100 Kb, III)

He

1975

постоян.
тонкой
структ.

2 ДЗ. Новое значение постоянной тонкой структуры, полученное из измерений тонкой структуры гелия. Lewis Michael L. A new value of the fine structure constant from helium fine structure. «Atom. Phys. 4». Proc. 4th Int. Conf., Heidelberg, 1974. New York—London, 1975, 105—118 (англ.)

Выражение для энергии уровней 2^3P_0 , 2^3P_1 , 2^3P_2 He, определяющее величину тонкого расщепления триплет-



Р 1977 №2.

ных P -состояний $\nu_{01} = E(2^3P_0) - E(2^3P_1)$, $\nu_{12} = E(2^3P_1) - E(2^3P_2)$ представлено в виде ряда по степеням константы тонкой структуры α . Во втором порядке теории возмущений рассчитаны коэф. этого разложения порядка α^4 и $\alpha^2(m/M)$. Суммы по промежуточным состояниям ограничены членами 3P -, 1P -, 3D -, 1D -, 3F -симметрий. Их волн. ф-ции вычислялись вариационным методом в базисе из 286 ф-ций. Предполагается, что учтенные члены дают основной вклад в разложение для энергии. Для α^{-1} тогда получается величина 137,03548 (2,0 млн. долей). Приводится сравнение с величинами, вычисленными с помощью других экспериментов.

Ю. Дмитриев

He

11 Д242. Эмиссионные спектры гелия. I. Исследование при средних давлениях. Lott Dempsey E., III, Glick R. E., Llewellyn J. A. Helium emission spectra. I. Intermediate pressure studies. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1975, 15, № 6, 513—526 (англ.)

1975

поперечные
сечения
возбуждения
уровней

Измерены поперечные сечения возбуждения уровней гелия $n^1P (n=3,4,5,6)$ и $\tilde{n}^{1,3}D (n=4,5,6,7)$ в диапазоне давлений $(5 \div 200) \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. при возбуждении электронным пучком энергией $\sim 1,5$ кэВ. В тех же условиях измерено поперечное сечение уровня 4^1S для выяснения влияния вторичных электронов. Проведен подробный анализ механизмов переноса возбуждения с уровней n^1P с учетом столкновений и радиационных процессов. Для уровней с $n=4$ и $n=5$ проведены расчеты поперечного сечения переноса при столкновениях $n^1P \leftrightarrow nF$, результаты которых согласуются с принципом детального равновесия. Анализ поперечного сечения 6^1P показал, что при переносе энергии с уровней n^1P в результате столкновений процессы вида $n^1P \leftrightarrow nF$ становятся заметными при $n=6$. Оценка поперечных сечений состояний $\tilde{n}^{1,3}D$ показала, что прямое заселение и потери при столкновениях становятся более заметными при увеличении n . Библ. 22. Резюме

ф. 1975
N 11

60408.4264

41125

1975

Ph, Ch, TC

He

* 15-12406

Norrf_R.B., Jr. Pressure broadening
of the $J=1 \leftarrow 0$ transition of hydrogen
cyanide. "J.Mol.Spectrosc.", 1975, 58,
N 3, 479-480 (англ.)

0594 ммк

568 569

5 8 6

ВИНИТИ

He

расчет
электр.
структ.

Ф. 1975
N 10

1975
10 Д150. Метод парциальных волн самосогласованного поля для двухатомных молекул: вычислительный формализм и результаты для малых молекул. McCullough E. A., Jr. The partial-wave self-consistent-field method for diatomic molecules: computational formalism and results for small molecules. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, № 10, 3991—3999 (англ.)

Предложен метод расчета электронной структуры двухатомных молекул, в котором одноэлектронные волн. ф-ции записываются в эллипсоидальных координатах в виде ряда типа $\sum X_{nl}^m(\xi) Y_l^m(\eta\varphi)$, где Y_l^m — шаровые ф-ции (метод парциальных волн). Для нахождения ф-ций $X(\xi)$ получены уравнения, решение которых производится путем численного интегрирования. Для атомов He и Be и молекул Li₂, H₂, He₂, HeH⁺ и LiH произведено сравнение результатов, полученных обычным методом Рутана и методом парциальных волн. Обсуждаются достоинства и недостатки обоих методов с точки зрения затрат машинного времени, погрешностей в расчетах физич. свойств молекул, быстроты «насыщаемости» базиса.

В. И. Барановский

✕

(+6)

61104.7533

Ch, TC

29864

19-6

He ; He⁻ (J; (Aē)

4745

Baughan E.C. Ionization potentials, electron affinities and screening constants. Part 8. Further developments. "J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1976, Part 2, 72, N 7, 1275-1279 (АНГЛ.)

0740 лнк

699 707 732

ВИНИТИ

70218.4218
Ph, Ch, TC

30526GR

1976

X 4-17067

He

Dacre P.D.

Watts C.J. Molecu-

lar MCSCF calculations by direct minimi-
zation. III. Extension of the single
excitation MCSCF method to include some
double excitations. "Mol. Phys.", 1976,
32, N 5, 1437-1449 (англ.)

0315

775 778

8 0 7

ВИНИТИ

He

1976

12 Д13. Расчет энергий возбуждения ридберговских состояний HeI в приближении поляризационной модели. Deutsch C. Rydberg states of HeI using the polarization model. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1976, 13, № 6, 2311—2313 (англ.)

В приближении поляризационной модели (См. РЖФиз, 1971, 9Д23) энергии возбужденных ридберговских состояний $1s nl$ атома He можно разложить в ряд

$$\sum_{k=0}^m C_k \langle nl | R^{-k} | nl \rangle,$$

где $\langle nl | R^{-k} | nl \rangle$ — матричные элементы, вычисленные с водородными ф-циями. С учетом членов до $m=7$ рассчитаны энергии состояний $1s nl$ с $n \leq 9$, $l \leq n-1$.

Л. Н. Иванов.

ф 1976 N 12

He

1976

8 Д69. Автоионизация гелия при электронном ударе. Gelebart F., Tweed R. J., Peresse J. Autoionisation of helium by electron impact. «Comments Atom. and Mol. Phys.», 1976, 5, № 3, 79—87 (англ.)

автоионизация
при электронном ударе.

Описан метод измерения абс. диффер. сечений автоионизации атомов инертных газов при электронном ударе, основанный на измерении энергии электронов, излученных или рассеянных под различными углами к оси монохроматич. возбуждающего электронного луча, пересекающегося под прямым углом с атомным пучком. Приведены и обсуждаются результаты, полученные для абс. диффер. сечений автоионизации гелия. В. Ю. О.

④ 2л. удар.  

ф. 1976 № 8

60513.7594

Ph, TC, MGU

42530

³He (cp)

1976

*4-12805

Halperin W.P., Archie C.N.,

Rasmussen F.B., Alvesalo T.A., Richardson
R.C. Specific heat of normal and superfluid ³He on the melting curve. "Phys.
Rev. B: Solid State", 1976, 13, N 5, 2124-
2131 (англ.)

0613

599 600

ВИНИТИ

Li^+/He (кв. мех. расчёт)

1976

BX-14

Harikaran P.C., Staemmler V.

Chem. Phys., 1976, 15(3), 409-14.

Potential energy curve of $^1\Sigma^+$ lithium(+)/helium.

C.A. 1976, 85, N20, 149303p

10



60823.1252

M. TC. NGU

He

40910

через индекс

1976

U-14203

Hawk I.L. Hardcastle D.L. Finite-difference solution to the Schroedinger equation for the ground state and first-excited state of helium. "J. Comput. Phys.", 1976, 21, N2, 197-207 (англ.)

0686 пик

652

662

6 7 8

ВИНИТИ

Бит тиск 4814

1976

He

Ar

3 Д53. Времяпролетная спектроскопия высокого разрешения для инжектируемых из He и Ar электронов с использованием импульсного электронного пучка. Kennerly R. E., Bonham R. A. High-resolution pulsed electron beam time-of-flight ejected-electron spectroscopy of He and Ar. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 43, № 2, 245—249 (англ.)

энергет.
спектр

Измерен энергетич. спектр вторичных электронов, инжектируемых атомами He и Ar под углом 90° к потоку первичных ионизирующих электронов с энергией 2 кэв. Для определения указанного спектра использованы времяпролетная методика (с временным разрешением $\sim 4 \cdot 10^{-10}$ сек) и импульсный пучок ионизирующих электронов (с длительностью импульса $\sim 1,5 \cdot 10^{-9}$ сек). Полученные спектры хорошо согласуются с данными других измерений и обнаруживают тонкую структуру.
Б. Ф. Гордиец

ф. 1977 № 3

(71) 

He

1976

5 Д2. Точное решение задачи на связанные состояния одномерной системы из трех тел с δ -образным взаимодействием. Kiang D., Niégawa A. Exact bound-state solution of a one-dimensional three-body system with a δ -interaction. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1976, 14, № 3, 911—914 (англ.)

расчет

Рассмотрена задача образования связанного состояния трех частиц произвольной массы за счет парного δ -образного взаимодействия в одномерном пространстве. Исследуются ограничения на массы частиц и интенсивности их взаимодействий, обеспечивающие существование простых решений. Полученные результаты применяются к одномерному атому гелия.

А. Ф. Шестаков

ф. 1977 N 5

He (I)

1976

5 Д334. Фотоэлектронная спектроскопия с использованием поляризованного HeI излучения. Karlsson L., Mattson L., Jadrny R., Siegbahn K., Thimm K. Valence electron spectroscopy using polarized HeI radiation. «Phys. Lett.», 1976, A58, № 6, 381—384 (англ.)

фотоэлектронная спектроскопия

Для получения поляризованного HeI (584 Å) излучения применен поляризатор отражающего типа. В качестве отражающих элементов использованы 4 стеклянных зеркала, покрытых золотом. Степень поляризации HeI излучения после прохождения поляризатора составила 97%. Исследовано угловое распределение фотоэлектронов, выбитых поляризованным HeI излучением из валентных орбиталей Kг и бензола. Получены параметры анизотропии углового распределения фотоэлектронов β (в скобках даны соответствующие потенциалы ионизации в эв): Kг $\beta = +1,30 \pm 0,05$ (14,0), $+1,23 \pm 0,05$ (14,665), C₆H₆ $+1,11$ (9,24), $-0,02$ (11,49), $+0,20$ (12,3), $+0,33$ (13,9), $-0,11$ (14,75), $+0,45$ (15,46), $+0,57$ (16,84).

Ю. В. Чижов

ф. 1974. N5

He²⁺

1976

Leclerc J. C.

J. Chem. Soc. Faraday Trans.,
(paper monkey) 1976, Part 2, 72, N4, 759-64.



(cell H₂) III

He

1976

2 Д4. Постоянная тонкой структуры, полученная из измерений тонкой структуры гелия. Lewis M. L., Serafino P. H., Hughes V. W. The fine structure constant from helium fine structure. «Phys. Lett.», 1976, A58, № 2, 125—126 (англ.)

Рассчитан вклад второго порядка теории возмущений по взаимодействию Брейта. Неоднородное уравнение для поправки первого порядка состояния атома решалось вариационным способом. Использована базисная система ф-ций Хиллерааса из 455 членов для 3P промежуточных состояний и из 286 членов для 1P -, 3D -, 1D - и 3F -состояний. Вклад вычисленных членов уточняет разложение по константе тонкой структуры α энергий 2^3P_0 , 2^3P_1 , 2^3P_2 состояний He, а соответствующее разложение для $\nu_{01} = E(2^3P_0) - E(2^3P_1)$ приравнивается эксперим. значению. В результате относит. ошибка получаемого значения для α будет $\sim 0,94$ млн. долей, а $\alpha^{-1} = 137,03609$ (13).

Ю. Дмитриев

тонкая
структ

ф. 1977. №2

61104.7501

Ch, Ph, TC

29864

1976

He (не мет
пакет)

* 4-14875

Pakiari Ali H., Linnett John W.
Applications of a simple molecular
wavefunction. Part 12. Open-shell float-
ing spherical Gaussian orbital calcula-
tions for some atoms and ions. "J. Chem.
Soc. Faraday Trans.", 1976, Part 2, 72,
N 8, 1281-1287 (англ.)

07.40 лнк

701 707

732

ВИНИТИ

He⁻

1976

7 Д14. Метастабильные автоионизационные состояния отрицательного иона гелия. Safronova U. I., Senashenko V. S. Metastable autoionizing states of the negative helium ion. «Phys. Lett.», 1976, A55, № 7, 401—402 (англ.)

автоионизация

На основе теории возмущений по межэлектронному взаимодействию вычислены времена жизни и энергии возбуждения автоионизационных состояний отрицательного иона гелия и нейтрального атома лития в конфигурациях $(1s2s^2)$, $(1s2s2p)$ и $(1s2p^2)$. Полученные результаты сравнительно хорошо соответствуют имеющимся эксперим. данным. Библ. 19. З. Б. Рудзикас

р 1976 №4

He

Ne

Ar

1976

11 Д39. Двойная ионизация инертных газов. II. Образование ионов при фотонном ударе. Schmidt V., Sandner N., Kuntzemüller H., Dhez P., Willeumier F., Källne E. Double ionization of rare gases. II. Ion formation by photon impact. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1976, 13, № 5, 1748—1755 (англ.)

В диапазоне энергий фотонов ионизирующего излучения $E = 70 \div 200$ эВ измерены отношения ионных

конц-ий $\frac{\text{He}^{2+}}{\text{He}^{+}}, \frac{\text{Ne}^{2+}}{\text{Ne}^{+}}, \frac{\text{Ar}^{2+}}{\text{Ar}^{+}}$, при фотоионизации атомов He, Ne, Ar. В эксперименте использовалось синхротронное излучение и двухрешетчатый монохроматор.

фотоионизация

(+2) 

ф. 1976 №11

Найдено, что с ростом E от 73 до 200 эв отношение $\frac{Ag^{2+}}{Ag^{+}}$ меняется мало и лежит в пределах $(1,81 \div 2,12) \cdot 10^{-2}$, а отношение $\frac{Ne^{2+}}{Ne^{+}}$ увеличивается от $1,5 \cdot 10^{-2}$ до 0,115. Величина $\frac{He^{++}}{He^{+}}$ от $2,4 \cdot 10^{-2}$ при $E = 100$ эв растет до $4,1 \cdot 10^{-2}$ при $E = 150$ эв. Результаты хорошо согласуются с расчетами. Ч. 1 см. реф. 11Д59. Б. Ф. Горднец