

Rb_2^+ , Rb_2^-

Rb_2^+
3222

Zee V., Mahan B.H. 1965

I
уцапов

J. Chem. Phys., 1965, 42, p. 2893.

ГА-343

$I(Rb_2^+)$



Rb_2^+
2312

Foster P. J., Leckenby R. E.,
Robbins E. J. 1969

I
Lyapunov

Atom. and Mol. Phys.,
J. Phys. $\sqrt{1969, 92, p. 478.}$

IA-342

$I(Rb_2^+)$

Rb_2^+

Guan-tsch hee,
Bruce H. Mahan

J. Chem. Phys., 42, 2893-6

22204. Photosensitized
ionization of alkali-
metal vapors.

$I(Rb_2^+)$

Rb_2^+

Steele W. S.

1970

Chem. Phys. Lett.,

7, ~ 3, 382-386.

D_0
param

● $(\underline{Csr. Li_2^+}) \overline{III}$

Rb_2^+

1974

M. N.
pactum

Bellomonte L., et al.
J. Chem. Phys., 1974, 61,
N8, 3225-29.

(cu. Li_2^+ ; III)

1976

Rb₂⁺

Boeyens J. C. A., et al.

J. S. Afr. Chem. Inst.
1976, 29 (2-3), 120-31.

(Do
el. alk. p')

(alk. LiM⁺; III)

70314.3646

96965

1976

Ph, Ch, TC, MGU

 Rb_2^+

* 4-17378

Valance A. Pseudo potential calculations for Na_2^+ , K_2^+ , Rb_2^+ and Cs_2^+ . "Phys. Lett.", 1976, A59, N 4, 271-273 (англ.)

(сч. Na_2^+ ; III)

0828 пик

785 791

119

ВИНИТИ

Rb₂⁻

ommuen 5757

1977

Lowe J.P.

Do, Ae
y

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

1978

Rb_2^+

Koike F., et al.

Chem. Phys. Lett. "1978, 53,
N1, 31-34 (англ.)

примеч.
внутренней
гамма-излуч.

см. $Li^+ - III$

Rb_2^+

оригинал 6518

1978

Valance A.

краткие
показания
мерами

J. Chem. Phys., 1978,

69 (1), 355-366.

Rb₂⁺

1979

Немухомов А.В. и др.

"Конференция по
теории атомов и
молекул. Вильнюс,
1979, Мер. год. 2.2"
Вильнюс, 1979, 74.

расчет.
поверх.
кривых

(см. На₂⁺ i^m)

Rb_2^+

оригинал 7329

1979

Кемуркин А. В.

раствор
нормальный
краситель

Степанов Н. Ф.

Chem. Phys. Lett.,
1979, 60 (3), 421-26

(см. Li_2^+ ; III)

Rb₂⁺

1982

Konowalow D. D.,
Rosenkiantz M. E.

Metal Bond. and Interact.

High Temp. Syst. Emphasis

Alkali Metals. Symp. 181 Meet.

Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga,

March 31-Apr. 3, 1981.

Washington, D.C., 1982,

3-17.

(cer. Lix; III)

Рішення
номіну
крив.

Rb_2^+

[Dmuck 14286]

1982

Szentpály L.,

комм.в.
Кривае,
с. н.

Chem. Phys. Lett., 1982,
88, N 3, 321 - 324.

Rb_2^+

DM. 15872

1982

✓ 5 Д76. Расчеты методом псевдопотенциала ионов Rb_2^+ , Cs_2^+ , RbH^+ , CsH^+ и смешанных щелочных димеров. Pseudopotential calculations on Rb_2^+ , Cs_2^+ , RbH^+ , CsH^+ and the mixed alkali dimer ions. Von Szentpály László, Fuentealba Patricio, Preuss Heinz werner, Stoll Hermann. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, № 6, 555—559 (англ.)

Полуэмпирическим методом псевдопотенциала (Fuentealba P. et al. «Chem. Phys., Lett.» 1982, 89, 418) рассчитаны спектроскопич. постоянные основных состояний одноэлектронных молекулярных ионов Rb_2^+ , Cs_2^+ , RbH^+ , CsH^+ и ионов всех смешанных щелочных димеров. Оценены также энергии ионизации нейтральных димеров. Полученные результаты подтверждают эмпирич. вывод о параллельности кривых потенц. энергии состояний $A^1\Sigma_u^+$ димера и $X^2\Sigma_g^+$ его иона.

Рекомендованы спектроскопич. постоянные для A-состояний KRb и $RbCs$
А. П. Зуев

и.п., у,

(45)

оп. 1983, 18, N5

Rb_2^+

Om. 15872

1982

nometers.

p-uc, m.h.

198: 78516r Pseudopotential calculations on dimeric rubidium ion (Rb_2^+), dimeric cesium ion (Cs_2^+), rubidium hydride ion (RbH^+), cesium hydride ion (CsH^+), and the mixed alkali dimer ions. Von Szentpaly, Laszlo; Fuentealba, Patricio; Preuss, Heinzwerner; Stoll, Hermann (Inst. Theor. Chem., Univ. Stuttgart, D-7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 93(6), 555-9 (Eng). Semi-empirical pseudopotentials were used in calcg. the ground-state potential-energy parameters, spectroscopic consts., and dipole moments for single valence-electron mol. ions. Very accurate results were obtained, and a no. of predictions are given. The ionization energies of the neutral alkali metal dimers were evaluated. A spectroscopic rule allowed estn. of the $A^1\Sigma^+$ state of KRb and RbCs .

~~AD~~ Cs_2^+ , RbH^+ , CsH^+ , KRb , RbCs ($A^1\Sigma^+$)
 (+5)

C. A. 1983, 98, N10.

Rb_2^+

Om. 15872

1982

10 Б11. Расчеты методом псевдопотенциала Rb_2^+ , Cs_2^+ , RbH^+ , CsH^+ и ионов смешанных димеров щелочных металлов. Pseudopotential calculations on Rb_2^+ , Cs_2^+ , RbH^+ , CsH^+ and the mixed alkali dimer ions. Von Szentpály László, Fuentealba Patri-
cio, Preuss Heinzwerner, Stoll Hermann.
«Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, № 6, 555—559 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении эмпирич. псевдопотенциала вычислены спектроскопич. постоянные и дипольные моменты ионов X_2^+ и XX'^+ ($X, X' = Li, Na, K, Rb, Cs$) в основном состоянии. С использованием правил переноса спектроскопич. постоянных определены спектроскопич. постоянные смешанных димеров XX' в состоянии $A'\Sigma^+ [KRb: R_e = 4,63 \text{ \AA}, D_e = 0,71 \text{ эВ}, \omega_e = 60 \text{ см}^{-1}, B_e = 0,0292 \text{ см}^{-1}; RbCs: R_e = 5 \text{ \AA}, D_e = 0,60 \text{ эВ}, \omega_e = 35 \text{ см}^{-1}, B_e = 0,0102 \text{ см}^{-1}]$. Для всех молекул X_2 и XX' вычислены адиабатич. потенциалы ионизации (ПИ_а). Анализ полученных результатов по-

м.п., г,
расчет

116.

X. 1983, 19, N 10

зволил установить общее соотношение для $\text{ПИ}_a : \text{ПИ}_a(X_2) = \text{ПИ}(X) - (0,26 \pm 0,03)$ эВ. Показано, что с хорошей степенью точностью значения равновесных межъядерных расстояний R_e в ионах $X'X^+$ представляют собой среднеарифметическое от величин R_e в системах X_2^+ и $X_2'^+$. Кроме того, значения $R_e(X_2^+)$ близки к величинам расстояний между ближайшими соседями в соотв. металлах.

И. А. Тополь



Rb_2^+

1985

Wagner G. S.,
Isernor N. R.

Do; Can. J. Phys., 1985,
63, N 7, 976-982.

(K_2^+ ; III)

Rb_2^+

Om. 24029

1986

105: 139895a Ground and excited states of rubidium ion (Rb_2^+) and cesium ion (Cs_2^+) by means of quasi-relativistic pseudo- π potentials including core polarization. Silberbach, H.; Schwerdtfeger, P.; Stoll, H.; Preuss, H. (Inst. Theor. Chem., Univ. Stuttgart, D-7000 Stuttgart, 80 Fed. Rep. Ger.). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1986, 19(5), 501-10 (Eng). Pseudopotentials for Rb and Cs were generated that represent the effects of core-valence correlation by a polarization potential and that reproduce spin-orbit splitting in the atoms to within 10^{-7} au ($\leq 1\%$). These potentials were used to calc. the potential curves of the $X^2\Sigma_{g1/2}$, $1^2\Sigma_{u,1/2}$, and $1^2\Pi_{u1/2}$ and $1^2\Pi_{u3/2}$ states of Rb_2^+ and Cs_2^+ . In the latter case, exptl. data exist for the spin-orbit splitting of the Π_v states. The calcd. and the measured values agree excellently.

(номеры.
стрелки) $(H) \otimes Cs_2^+$

C.A. 1986, 105, N 16

Rb_2^+

1986

11 Д94. Расчет основных и возбужденных состояний Rb_2^+ и Cs_2^+ при помощи квазирелятивистских псевдопотенциалов с учетом поляризации остовов. Ground and excited states of Rb_2^+ and Cs_2^+ by means of quasi-relativistic pseudo-potentials including core polarisation. Silberbach H., Schwerdtfeger P., Stoll H., Preuss H. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 5, 501—510 (англ.)

Строение молекулярных ионов Rb_2^+ и Cs_2^+ в электронных состояниях $X^2\Sigma_{g1/2}$, $1^2\Sigma_{u1/2}$, $1^2\Pi_{u1/2}$ и $1^2\Pi_{u3/2}$ рассчитано в приближении одного активного электрона с использованием квазирелятивистских остоновых псевдопотенциалов (ПП). Операторы ПП включали поляризационные члены, обеспечивающие учет остоново-валентных корреляционных эффектов. Тестовые расчеты показали, что применяемый вариант ПП позволяет воспроизводить экспериментальные спинорбитальные расщепления энергетических уровней и поляризуемости свободных атомов с

М.Н.



ср. 1986, 18, N 11

точностью до 1%. Характеристики полученных ф-ций потенциальной энергии основных состояний Rb_2^+ и Cs_2^+ , а также энергии возбуждений и спинорбитальные расщепления возбужденных состояний Cs_2^+ согласуются с эксперим. величинами и результатами расчетов с полулокальными ПП (von Szentpály L. et al. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, 555). Установлено существование псевдопересечения потенциальных кривых $^2\Sigma_{u1/2}$ и $^2\Pi_{u1/2} Cs_2^+$ и обсуждается его влияние на спектроскопич. свойства иона. Библ. 30. А. В. Зайцевский



Rb_2^+

1986

19 Б1011. Основное и возбужденные состояния Rb_2^+ и Cs_2^+ , исследованные с помощью квазирелятивистских псевдопотенциалов, включая поляризацию остова. Ground and excited states of Rb_2^+ and Cs_2^+ by means of quasi-relativistic pseudo-potentials including core polarisation. Silberbach H., Schwerdtfeger P., Stoll H., Preuss H. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 5, 501—510 (англ.)

Построены квазирелятивистские псевдопотенциалы (КПП), учитывающие в случае атомов поляризацию остова в результате остова-валентной корреляции, а также в случае молекул полную поляризацию остова. Полученные КПП использованы для расчетов потенциальных кривых и соотв. спектроскопич. постоянных состояний $X^2\Sigma_{g1/2}$, $1^2\Sigma_{u1/2}$, $1^2\Pi_{u3/2}$ и $1^2\Pi_{u1/2}$ молек. ионов Rb_2^+ и Cs_2^+ . Потенциальные кривые основных состояний, рассчитанные в приближении КПП, хорошо согла-

расчет
потенц.
крив.,
и.п.

(4)

X. 1986, 19, N 19

суются с данными соотв. расчетов с зависящими от
углового момента псевдопотенциалами и с эксперимен-
том. Вычисленная величина спин-орбитального расщеп-
ления состояния $^2\Pi_u$ в ионе Cs_2^+ составила $1,4 \cdot 10^{-3}$ ат.
ед. и согласуется с эксперим. значением $1,35 \cdot 10^{-3}$ ат. ед.
И. А. Тополь



Rb_2^+

1987

9 Б1045. Основные и возбужденные состояния Rb_2^+ и Cs_2^+ , рассчитанные с использованием квазирелятивистских псевдопотенциалов, включающих поляризацию остова. Ground and excited states of Rb_2^+ and Cs_2^+ by means of quasi-relativistic pseudo-potentials including core polarisation / Silberbach H., Schwerdtfeger P., Stoll H., Preuss H. // Arbeitsber./Inst. theor. Chem. Univ. Stuttgart.— 1987.— № 26.— С. 71—86.— Англ.

Получены квазирелятивистские остовные псевдопотенциалы для атомов Rb и Cs, учитывающие остовно-валентную корреляцию с помощью поляризац. потенциала и позволяющие воспроизвести спин-орбитальное расщепление в атомах в пределах эксперим. ошибки. Приведены параметры псевдопотенциалов. Полученные псевдопотенциалы использованы для расчета потенциальных кривых состояний $X^2\Sigma_{g1/2}$, $1^2\Sigma_{u1/2}$, $1^2\Pi_{u1/2}$ и $1^2\Pi_{u3/2}$ ионов Rb_2^+ и Cs_2^+ ; базисы включали наборы гауссовых ф-ций ($12s7p2d$). Определены равновесные межъядерные расстояния, колебат. частоты, энергии диссоциации и энергии возбуждения. Результаты согласуются с лит. эксперим. данными для основных состояний Rb_2^+ и Cs_2^+ и возбужденных состояний Cs_2^+ .

А. А. Сафонов

М.П.

х. 1989, № 9

Rb_2^+

1998

Johann Ch; et al.,

(Zu coem) Chem: Phys. Lett.,
1998, 295 (1-2),
158-166

(all. Li_2^+ , III)