

G27

C_{82}^+

1951

Marrison J D.

"J. Chem. Phys"

1951, 19 N 10

1305-8

(9)

Bep-3365-I

1965

32⁺

Yuas-tsch Lee,
Breese H. Mahan,

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

22204. Photosensitized ionization
of alkali-metal vapors.

I (Pb₂⁺)

$\text{Cs}_2^+; \text{CO}_2^+(\text{e}, \text{I})$ X 7948 1968

Eland J.H.D., Danby C.J.,
Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.,
1968, 1, N2, 111-119 (anul.)

Photoelectron spectra and ionic
structure of carbon dioxide,
carbon disulfide and sulfur
dioxide.

Pub. Chem. 1974, 15141 10 2276 p.k. (Φ)

1968

 Cs_2^+

11 Г96. Применение метода времени пролета к рассеянию ионов цезия в цезии. Popescu Iovitzu, Niculescu N., Popescu A. Time-of-flight analysis of cesium ions in cesium. «Rev. roumaine phys.», 1968, 13, № 1, 51—57 (англ.; рез. франц.)

Выполнены измерения диффузионных характеристик цезиевых ионов в парах цезия путем использования импульсного ионного источника и детектора с горячей проволокой. Это позволило непосредственно оценить нормализованную подвижность ионов Cs_2^+ при нулевом поле, которая оказалась равной $0,28 \text{ см}^2/\text{всек}$ в диапазоне т-р 500—590° К.

Резюме

подвижность
ионов

ф. 1968. 11Г

Cs_2^+
2312

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

I
урапов

J. Phys., 1969, B2, p. 478.

ГА-342

I (Cs_2^+)

As_2^+

Bp-5294-X

Stevens W. S.

1970

Chem. Phys. Lett.

1970, 4, ~ 3, 382

D_0 ,

v_e

$(\text{Cu. Li}_2^+)_{III}$

CS_2^+

Schneider, Bruce Stanley:

1971.

(proofs)

"From Diss. Abst. Int", B,
1972, 32, (12), (Pt 1) 4235.

(all HBr^+ ; III)

1972

Cs_2^{+}

(Bo)

Cs_2

(3)

2 Д64. Ионизация паров цезия методом усиления пространственного заряда. Marr G. V., Wherrett S. R. The ionization of caesium vapour by the method of space charge amplification. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1972, 5, № 9, 1735—1743 (англ.)

Экспериментально исследована фотоионизация паров Cs с образованием ионов Cs^{+} и Cs_2^{+} . Стекланный прибор содержал нагреваемую до $T \approx 1100^{\circ} K$ W-нить и расположенный на расстоянии 2 мм коллектор. Температура внутри трубки изменялась в пределах $400 \div 500^{\circ} K$. Пространство между электродами освещалось прерываемым с частотой 16,6 гц монохроматич. светом ртутной лампы высокого давления. Ток пространственного заряда регистрировался резонансным усилителем и самописцем как функция энергии фотонов. Наблюдаемый дискретный

Рис. 73-2

спектр при $n \geq 0$ обусловлен ионами, образованными в процессах ассоциативной ионизации $\text{Cs} + \eta\nu \rightarrow \text{Cs}^*$; $\text{Cs}^* + \text{Cs} \rightarrow \text{Cs}_2^* \rightarrow \text{Cs}_2^+ + e$ или $\text{Cs}_2^* \rightarrow \text{Cs}^+ + \text{Cs}^-$. Выше границы серии ионы Cs^+ образуются в результате прямой ионизации $\text{Cs}(6^2S_{1/2}) + h\nu \rightarrow \text{Cs}^+(6'S_0) + e$. Ток, соответствующий Cs_2^+ , наблюдался при длине волны $3341\text{\AA}$, при которой имеет место усиление интенсивности потока фотонов. Фактор усиления R составляет $10^5 - 10^6$, что согласуется с представлением о захвате положит. ионов потенц. ямой, создаваемой объемным зарядом электронов у катода. Фактор R связан с временем пребывания ионов в потенц. яме. Анализ полученных данных дает для потенциала ионизации Cs_2 величину $3,60 - 3,71$ эв, а для энергии диссоциации ионов Cs_2^+ $0,66 \pm 0,07$ эв.

И. Флакс

Cs_2^+

Marr, G. V.;
et al.

1972

(70).

"J. Phys" B

1972, 5 (9), 1735-43.

● (cf. Cs_2 ; III)

1974

Cs_2^+

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

M. N.
paccus

(Li_2^+ ; III)

41112.7904
Ph, MGU, TC

42529 CS_2 02 1974
 $CS_2 +$ * 7249.

Collins C.B., Johnson B.W., Mirza M.Y.,
Popescu D., Popescu Iovitzu.

Multiphoton ionization of cesium through
resonant dissociative states of CS_2 .

"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1974, 10,
N 3, 813-821
(англ.)

215 217 - 2 23

0231 пик ВИНТИ

G₂⁺

1976

Boeyell's J. C. A., et al.

J. S. Afr. Chem. Inst.

1976, 29, (2-3), 120-31.

(^{Do}
166. max. p.)

(all. LiM⁺; III)

70314.3646

Ph, Ch, TC, MGU

96965

 Cs_2^+

1976

X 9-17378

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

(см. Na_2^+ ; III)

0828 ммк

785 791

19

ВИНИТИ

Cs_2^+

1977

S9: 65422w Energy threshold of associative ionization in cesium vapor and dissociation energy for diatomic cesium(+) ion. Korchevoi, Yu. P.; Khil'ko, I. N. (Inst. Electrodyn., Kiev, USSR). *Proc. Int. Conf. Phenom. Ioniz. Gases, 13th* 1977, 1, 9-10 (Eng). Edited by Bachmann, P.; Kastelewicz, H. Buchexport: Leipzig, E. Ger. Values of the threshold energy of associative ionization E_m and the dissocn. energy of the mol. ion, D_m^+ were examd. With $E_m = 2.71$ eV, the magnitude of D_m^+ for $Cs_2^+ \geq 1.18$ eV.

(Do)

C.A. 1978, 29, N8

5922⁺

Кудин Л.С., Гусаров А.В. 1977
Горохов Л.Н., Краснов К.С.

I
Гусаров

Теплофизика высоких
температур, 1977, 15,
с. 505.

ГА-339

I (Cs₂⁺)



Cs_2^+

ommua 5494.

1977

Cs_2

Mathur B. P. Rothe E. W.
Reck G. P.

Krubee
Komeret.
Hepruce

J. Chem. Phys., 1977,
67, 377-381

Cs_2^+

1978

Koike F. et al.

romensk. vuzruch. "Chem. Phys. Lett."
byannoy. 1978, 53, N1, 31-34 (rus.)

Cs_2^+

omnick 6518

1978

Valance A

агуагау.
номенс.
круксе

J. Chem. Phys.

1978, 69 (1), 355-66

Cs_2^+ | ommuch 8623 | 1979

Honda F., et al.

$\text{Cs}-\text{Cs}$.
nomeris.
взаимог. J. Chem. Phys., 1979,
70 (11), 4834-36

Cs_2^+

Ormuca 7329

1979.

Nemukhin A. V.
Stepanov N. F.

пакет
ромбичес.
кристалл

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

(see Li_2^+ ; III)

CS_2^+

1979
Нелушкин А.В. и др.

расчет
попереч.
кривых

«Контрперенос по мере
атомов и молекул.
Вибриное, 1979. Мех.
жидк. и т.д.»
Вибриное, 1979, 74

(сид. Na_2^+ и III)

Cs_2^{2+}

М. П.

18 Б26. Низколежащие состояния Cs_2^{2+} . Das G., Raffennetti R. C. Low-lying states of Cs_2^{2+} . «Chem. Phys. Lett», 1980, 71, № 2, 198—201 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с использованием орбиталей, полученных многоконфигурац. методом самосогласованного поля, рассчитаны потенциальные кривые основного $x^1\Sigma_g^+$ и возбужденных состояний типа $^1\Sigma_g^+$, $^1\Pi_g$ и $^1\Delta_g$ молек. иона Cs_2^{2+} при межъядерных расстояниях от 4 до 20 ат. ед. Использовано приближение замороженного остова. Базисный набор орбиталей слейтеровского типа состоял из миним. набора для остовных электронов (орбитали с главным квантовым числом n от 1 до 4) и двухэкспонентных и поляризац. функций для валентных электронов (орбитали с $n=5$ и 6). Все полученные кривые соответствуют отталкивательным состояниям. На многих кривых возбужденных состояний имеются горбы, связанные с псевдопересечениями. Из отсутствия «пересечения» (в диабатич. смысле) кривой основного состояния с какой-либо кривой возбужденного состояния сделан вывод о малой величине сечения р-ции переноса заряда $Cs^{++} + Cs^+ \rightarrow Cs^0 + Cs^{2+}$ ($< 10^{-15}$ см²). А. Сафонов

1980

М 36667

№ 1980 N 18

Cs_2^{2+}

Am 36 667

1980

$E_i; m.n.$

✓ 10 Д112. Низколежащие состояния Cs_2^{2+} . Low-lying states of Cs_2^{2+} . Das G., Raffenetti R. C. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, № 2, 198—201 (англ.)

Методом МК ССП (многоконфигурац. приближение ССП) и КВ рассчитаны волн. ф-ции и потенц. кривые основного и низколежащих возбужденных состояний иона Cs_2^{2+} (одиннадцати симметрии $^1\Sigma_g^+$, двенадцати — $^1\Pi_g$ и шести — $^1\Delta_g$). Расчеты проводились в миним. базисе для АО остова и в двойном экспоненц. базисе плюс поляризующие ф-ции для валентной оболочки. МК расчеты выполнены в трехконфигурац. приближении. Все потенц. кривые носят отталкивательный характер.

В. И. Барановский

фр 1980 №10

Cs_2^{2+}

DM 36 667

1980

93: 32078t Low-lying states of diatomic cesium($2+$). Das, G.; Raffanetti, R. C. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 71(2), 198-201 (Eng). By using an MC-SCP method, wave functions were calcd. for the ground state $1\Sigma_g^+$ and the excited states with the symmetries $1\Sigma_g^+$, $1\Pi_g$, and $1\Delta_g$ of the Cs_2^{2+} ion. The potential curves for 11 $1\Sigma_g^+$, 12 $1\Pi_g$, and 6 $1\Delta_g$ states were calcd. The results suggest a small charge-transfer cross section for the reaction $\text{Cs}^+ + \text{Cs}^+ \rightarrow \text{Cs} + \text{Cs}^{2+}$.

nomerul.
gp-yuz,

кв. мех.
факет

CA 1980 93 ~ 4

Cs_2^{2+}

расчет
молекул

10 Д111. Исследование точности формализма псевдопотенциала. A study of the accuracy of the pseudo-potential formalism. Das G. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, № 2, 202—206 (англ.)

Рассмотрены некоторые следствия основных допущений метода псевдопотенциала (в модификации Филлипса—Клайнмана). В частности, из правильного с точностью до членов второго порядка выражения для полной энергии следует, что валентные АО и орбитали оператора Фока $\hat{F}_{OA}$ для атома А. В случае, если система диссоциирует на ионы или нейтральные атомы и ионы, в $\hat{F}_{OA}$ появляется ошибка, равная приблизительно $-\Delta Z_B/R$ (ΔZ_B — заряд на ионе В). Эта ошибка должна быть особенно заметна при небольших значениях R . Расчеты, выполненные для пяти $1\Sigma_g^+$ и пяти $1\Pi_g$ состояний иона Cs_2^{2+} методом псевдопотенциала и с учетом всех электронов (см. Das G. et al. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, 198), подтверждают этот вывод.

В. И. Барановский

1980

Ф 1980 №10

Cs_2^+

Оттиск 12066 / 1981

11 Д145. Взаимодействие Cs^+ с Cs^+ . Interactions of Cs^+ with Cs^+ . Olson R. E., Liu B. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 8, L279—L283 (англ.)

дизмолек.
вращен.

Методом самосогласованного поля рассчитаны энергии взаимодействия для $X^1\Sigma_g^+$ основного состояния системы $Cs^+ + Cs^+$ и для $1^1\Sigma_g^+$ дважды возбужденного состояния системы $Cs^{2+} + Cs^+$. Рассчитанные энергии молекулярных орбиталей использованы для интерпретации механизмов перезарядки, происходящей при столкновениях ионов цезия друг с другом. Показано, что при низких энергиях доминирующим механизмом в процессе перезарядки является образование $Cs^+ + Cs^{2+} + e^-$. Энергетич. порог этой реакции очень низок (≈ 160 эВ) и сечение может достигать значений $\approx 6 \cdot 10^{-16}$ см².

И. Ю. С.

Ф. 1981, 18, № 11.

Cs_2^+

1982

Fuentealba P., Szentrály
L. V., et al.

Рачев
и др., *J. Mol. Struct.*, 1983, 93, Suppl.
Do; "Theochem.", 10: Theor. Chem.,
1982, Proc. 13 Congr. Theor.
Chem. Lat. Expression, Alghero
(Sassari), 5-8 Oct., 1982,
213-219. (see LiH; III)

Cs_2^+

(Dm. 15633)

1982

Jeung G. H., Malrieu J. P.
et al.

расчет.
спектр.
полей.

J. Chem. Phys. 1982,
vol. 77, No. 7, 3571-3577.

(Cs_2Na_2 ; III)

Cs_2^+

Konowalow A. D.,
Rosenkrantz M. E.

1982

расчет
номеру
крив.

Metal Bond. and Interact.
High Temp. Syst. Emphasis
Alkali Metals. Symp. 181
Meet. Amer. Chem. Soc., Atlan-
ta, Ga, March 31-Apr. 3, 1981.
Washington, D. C., 1982,
3-17.
(see Li_2 ; III)

Ca²⁺

[DMMUC 15872]

1982

Szentpaly L., Fuentealba P.,
et al.,

Синтез
и свойства
гидрофоб-
ных мембран

Chem. Phys. Lett., 1982,
93, N 6, 555-559.

Cs_2^+

[Omniuck 14286]

1982

Szentpály L.,

romanus.
Krubace,
M. H.

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

Cs_2^+

1982

Von Szentpály László,
Fuentealba Patricio, et al.

M.N.,
J;

Chem. Phys. Lett., 1982,
93, N6, 555-559.

(cm. Rb_2^+ ; III)

Cs_2^+

Om. 16981

1983

21 Б142. Спектроскопия переходов между связанными и свободными состояниями Cs_2^+ : Bound-free spectroscopy of Cs_2^+ . Helm Hanspeter, Möller Rolf. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1983, 27, № 5, 2493—2502 (англ.)

Г, М.П., Я ;

С помощью спектрометра для регистрации фотофрагментов в быстрых пучках ионов исследованы каналы фотодиссоциации ионов Cs_2 по схеме $\text{Cs}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$ (4067—9500 Å) $\rightarrow \text{Cs}_2^{+*} \rightarrow \text{Cs}^+(^1S_0) + \text{Cs}(nl) + E_{\text{кинетич}}$. Ре-

х. 1983, 19, N21

гистрировались ионы Cs^+ (появление и распределение по энергии). Показано, что имеются три канала фотодиссоциации с образованием $\text{Cs}(6s)$ ($\lambda > \sim 5300 \text{ \AA}$), $\text{Cs}(6p)$ ($5309-4545 \text{ \AA}$), $\text{Cs}(6p) + \text{Cs}(5d)$ ($\lambda > 4579$), причем канал с образованием $\text{Cs}(5d)$ преобладает при $\lambda \sim 4100 \text{ \AA}$. При идентификации возбужденных электронных состояний учитывалось угловое распределение фотофрагментов. Получены относит. сечения фотодиссоциации Cs_2^+ при различных λ . При $\lambda = 7992,2 \text{ \AA}$ абс. сечение фотодиссоциации равно $2 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$. Оценены нижний предел энергии связи $\text{Cs}_2(X^2\Sigma_g^+)$ (впервые) — $0,59 \pm 0,06 \text{ эВ}$ и верхний предел потенциала ионизации $\text{Cs}_2(X^2\Sigma_g^+)$ — $8,76 \pm 0,06 \text{ эВ}$.

В. М. Ковба

Cs_2^+

Om. 16981

1983

11 Д634. Спектроскопия связанно-свободных переходов иона Cs_2^+ . Bound-free spectroscopy of Cs_2^+ . Helm Hanspeter, Möller Rolf. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1983, 27, № 5, 2493—2502 (англ.)

Методом лазерной фотофрагментной спектроскопии быстрых пучков ионов изучены связанно-свободные переходы иона Cs_2^+ в спектральной области 4067—9500 Å. Установлено, что продуктами фотолиза Cs_2^+ являются атомы Cs в состояниях $6s$, $6p$ и $5d$. Определены угловые распределения фотофрагментов и измерены относит. сечения фотодиссоциации Cs_2^+ в исследованной спектральной области. В точке $\lambda = 7999,2$ Å определено абс. сечение фотодиссоциации: $\sigma = 2 \cdot 10^{-16}$ см². Оценена нижняя граница энергии диссоциации $\text{Cs}_2^+(^2\Sigma_g^+)$ ($0,59 \pm 0,06$ эВ) и определен верхний предел потенциала ионизации $\text{Cs}_2(^1\Sigma_g^+)$ ($3,76 \pm 0,06$ эВ). Библи. 30.

В. А. Е.

М.П., Д.;

(1) 

ф. 1983, 18, № 11



$\text{Cs}_2(^1\Sigma_g^+)$

Cs_2^+

От. 17018 1983

12 Д490. Наблюдение системы $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ иона Cs_2^+ . Observation of the $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ system in Cs_2^+ . Helm H., Cosby P. C., Huestis D. L. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6451—6454 (англ.)

Методом лазерной фотофрагментной спектроскопии ионных пучков исследована преддиссоциация колебательных уровней состояния $1^2\Pi_u$ иона Cs_2^+ . Получены преддиссоциационные спектры системы $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ с разрешением 4 см^{-1} в области $7700\text{—}8100\text{ Å}$. В спектрах зарегистрировано спин-орбитальное расщепление состояния $1^2\Pi_u$ ($280 \pm 20\text{ см}^{-1}$). Установлено, что преддиссоциация состояния $1^2\Pi_u$ обусловлена взаимодействием с отталкивательным состоянием $1^2\Sigma_g^+$. На основании данных по кинетич. энергии фотофрагментов Cs^+ и Cs оценена величина нижнего предела энергии связи состояния $1^2\Pi_u$. Измерено угловое распределение фотофрагментов, которое имеет изотропный характер.

В. А. Елохин

М.А.

ср. 1983, 18, № 12

Cs_2^+

[Om. 17018]

1983

99: 61630w Observation of the $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ system in diatomic cesium ion. Helm, H.; Cosby, P. C.; Huestis, D. L. (Mol. Phys. Lab., SRI Int., Menlo Park, CA 94025 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(11), 6451~4 (Eng). Predissocn. of vibrational levels in the $1^2\Pi_u$ state of Cs_2^+ was obsd. by monitoring the Cs^+ photofragments resulting from absorption of laser radiation by the $X^2\Sigma_g^+$ ground state. Predissocn. of the $1^2\Pi_u$ state is induced by interaction with the repulsive $1^2\Sigma_g^+$ state and leads to the prodn. of photofragments $\text{Cs}^+ + \text{Cs}$ in their ground electronic state with center-of-mass sep'n. energies around 1 eV. The dominant features of the $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ band system are confined to the wavelength range between 7700 and 8100 Å. A lower limit for the bond energy of the $1^2\Pi_u$ state, measured relative to its dissocn. limit $\text{Cs}^+(^1S_0) + \text{Cs}(^2P_{1/2})$ is 0.39 ± 0.1 eV. The spin-orbit splitting in the $1^2\Pi_u$ state is 280 cm^{-1} .

 $(1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+)$
De

C.A. 1983, 99, N 8

Cs_2^+

Om. 17018

1983

22 Б1062. Наблюдение системы $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ в Cs_2^+ . Observation of the $1^2\Pi_u \leftarrow X^2\Sigma_g^+$ system in Cs_2^+ . Helm H., Cosby P. C., Huestis D. L. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6451—6454 (англ.)

Преддиссоциация колебательных уровней состояния $1^2\Pi_u$ иона Cs_2^+ исследована методом масс-спектральной регистрации фотофрагментов Cs^+ , образующихся в результате поглощения лазерного излучения ионами Cs_2^+ в основном состоянии $X^2\Sigma_g^+$. Ионы молек. цезия генерировали методом полевой ионизации на капле жидк. Cs, подвешенной на вольфрамовой игле. Заряженные фотофрагменты Cs^+ , образующиеся при пересечении пучка Cs_2^+ лучом лазера на красителе отделяли от перв. пучка с помощью квадрупольного масс-анализатора, после чего определяли кинетич. энергию фотофрагментов в электростатич. анализаторе. Обнаружено, что преддиссоциация состояния $1^2\Pi_u$ индуцируется взаимодействием с отталкивательным состоянием $1^2\Sigma_g^+$ и приводит к образованию $\text{Cs}^+ + \text{Cs}$ в основных

спектр,
М. П., До;

X. 1983, 19, № 22.

электронных состояниях с разницей энергий ≈ 1 эВ в системе центра масс. Основной особенностью системы в диапазоне длин волн 7700—8100 Å является сложная колебательная структура полосы $1^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$. Низкий уровень разрешения (≈ 4 см $^{-1}$) не позволил разрешить вращательную структуру. Нижний предел энергии связи состояния $1^2\Pi_u$, измеренный по отношению к его диссоциационному пределу $Cs^+(^1S_0) + Cs(^2P_{1/2})$, равен $0,39 \pm 0,1$ эВ. Показано, что равновесные межъядерные расстояния в состояниях $1^2\Pi_u$ и $X^2\Sigma_g^+$ одинаковы. Измерено спин-орбитальное расщепление в состоянии $1^2\Pi_u$, равное 280 см $^{-1}$.

Л. Б. Сорока

С₂⁺

[ом. 17068]

1983

Кудим Л.С., Богребной А.М.,
и др.

Кр, У

Изв. вузов. химия и
техн. мехмол., 1983,
26, № 6, 685-688.

III кат.

Cs_2^+

1985

Wagner G.S., Isernor. N.R.

Can. J. Phys. 1985, 63(7),
976-82.

Do;

(cu. ● K_2^+ ; III)

Cs_2^+

1986

Moulet I.,
Andreoni W.

Helv. phys. acta,
1986, 59, № 6-7, 984.

хелл.
свйзв
(теор.
изучение)

(сер.  Cs_2 ; III).

Cs_2^+ [Am. 24029] 1986

Silberbach H.,

Schwerdtfeger P., et al.

parim
nomies.

J. Phys. B: Atom. and

Krellb.,

Mol. Phys., 1986, 19,

et. 17.

NS, 501 - 570.

(cer. Rb_2^+ ; III)

Cs_2^+

1987

Silberbach M., Schwerdt
leger P., et al.

Arbeitsber./Inst. theor.

u. n. Chem. Univ. Stuttgart.

1987. N26. C. 71-86.

(, Rb_2^+ ; iii)

Cs_2^+ , Cs_2

Om 32808

1989

111: 219521q Ground state properties of cesium dimers from ab initio pseudopotential approaches. Moullet, I.; Andreoni, Wanda; Giannozzi, P. (Inst. Phys. Exp., Ec. Polytech. Fed. Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(12), 7306-12 (Eng). We present the results of several calcs. of the ground state of Cs_2 and Cs_2^+ performed in the local-spin-d. approxn. of d. functional theory, and using different approxns. for the core electrons in the derivation of ab initio norm-conserving pseudopotentials. We investigate the influence of both core polarization and relativistic effects on the mol. bonding, which turns out to be of minor importance for the detn. of the equil. characteristics. We find that in order to guarantee an accurate description within the one-electron scheme, one must avoid the usual "linear" approxn. of the exchange-correlation functional in the derivation of the pseudopotentials. This introduces significant errors for Cs and most probably for all one-electron systems.

расчет
ошибках
составлен

C.A. 1989, 111, N 24

Cs_2^+

1993

118: 89993b Determination of adiabatic ionization potentials of Cs_2 and Cs_3 in a very cold molecular beam using time-of-flight mass spectrometry. Kim, Bongsoo; Yoshihara, Keitaro (Inst. Mol. Sci., Myodaiji, Okazaki, Japan 444). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 202(5), 437-41 (Eng). The adiabatic ionization potentials of Cs_2 and Cs_3 are measured in a pulsed supersonic jet using 1-photon ionization and time-of-flight mass spectrometry. The ionization energies are detd. to be $\text{IP}(\text{Cs}_2) = 29,205.5 \pm 1.0 \text{ cm}^{-1}$ and $\text{IP}(\text{Cs}_3) = 24,690 \pm 30 \text{ cm}^{-1}$. The dissocn. energy of the Cs_2^+ ion is detd. as $D_e(\text{Cs}_2^+) = 5845.7 \pm 2.0 \text{ cm}^{-1}$. The detd. ionization energy of Cs_2 and the dissocn. energy of Cs_2^+ ion show good agreement with theor. predictions.

(Y)

⑦2 X7

 $\text{Cs}_3(\text{Y})$,C.A. 1993, 118, N 10 $\text{Cs}_2^+(\text{Do})$

Li_2^+

1998

Johann Ch; et al.,

(2500 cm) Chem. Phys. Lett;
1998, 295 (1-2),
158-166

(all. Li_2^+ ,  III)