

Ar
CH₂
H₂O

688991-1X

расчет
M_n; E_i.

(+2)

ф. 1980

п. 11



11 Д82. Построение модифицированных виртуальных орбиталей (МВО), которые улучшают сходимость в расчетах методом конфигурационного взаимодействия. The construction of modified virtual orbitals (MVO's) which are suited for configuration interaction calculations. Bauschlicher Charles W. J. «Chem. Phys.», 1980, 72, № 2, 880—885 (англ.)

Предложено в расчетах молекул и атомов методом конфигурац. взаимодействия (КВ) использовать модифицированные виртуальные орбитали (МВО). МВО получаются в подпространстве канонических виртуальных орбиталей диагонализацией самосогласованного фокиана, в котором выкинуты члены, отвечающие валентным электронам. В ряде тестовых расчетов, проведенных методом КВ для атома Ar и молекул CH₂, H₂O, показано, что использование базиса МВО ускоряет сходимость ряда КВ. Для молекулы CH₂(³B₂) рассчитаны также матрицы перекрывания МВО и канонических виртуальных орбиталей с натуральными орбиталями. Полученные величины матричных элементов матриц перекрывания показывают, что МВО в большей степени походят на натуральные орбитали, чем канонич. МО. А. Дементьев

1980

61/9839-1X

Ar ($3P_2$)

Lommick 10729 | 1980.

Diebold B. J.; et al.

спектр, ЭПР,
конденсат.

Chem. Phys., 1980, 52,
453-60

Ar

[ommuck 9989]

1980

Fraga 5.

(Aē)

Can. J. Phys., 1980, 58
544-545.

1980

Ar

Хармпи-
Рокс.
ор-иш,
расчет

Huo W. M., et al.,

J. Chem. Phys., 1980,
72, N4, 2374-2383.

(all - Ne; III)

Ar

1980

Tseng T. Y., et al

KB. M.
pacer

J. Phys. B: Atom. and Mol.
Phys., 1980, 13, N 21, 4101-9.

● (see Ne) III

Ar

omnica 12309 1981.

Arai H., et al.

nomizau,

(30. yzer)

J. Chem. Phys., 1981,

75 (5), 2252 - 57.

A2

Ommuck 13231

1981

topperm.
nomerus,
kl. mex.
pacem

Christiansen P.A., Pitzer K.S.
et al.,

J. Chem. Phys., 1981, 75, N11,
5410-5415.

Ar

Омтук 12941

1987

Электрон.
Литература

Груко Г., Попиелавски Г.,
Phys. Rev., 24A(2), 1129-
-1131. (1987)

1981

Ar

(E, τ)

④

' 95: 105703w Studies of energy levels and lifetimes in neutral and ionized light atoms. Hultdt, S. (Fys. Inst., Lund Univ., Lund, Swed.). Report 1980, INIS-mf-6314, 66 pp. (Eng). Avail. INIS. From *INIS Atomindex* 1981, 12(5), Abstr. No. 582811. The spectrum of singly ionized Ti was analyzed by photog. spectral recordings of the light from a hollow-cathode, the 1240 classified lines in the region 1200-11,000 Å and 202 term values are reported. Lifetimes of the $3p^5 5p$ levels in neutral Ar were measured by the high-frequency-deflection technique considering the trapping of radiation from the excited $3p^5 4s$ level. Energy levels and lifetimes of excited states were studied with the beam-foil method for selected ions in the at. no. range 7-30. Influence of transition probabilities caused by hyperfine interaction for low members of the He isoelectronic sequence is verified. The oscillator strength for the intercombination

transition $1s^2 1S_0-1s3p \ ^3P$ was measured in Be-like N, O, and F. Accurate detns. of lifetimes for some of the lowest excited levels in Si I-Si IV and Zn II are reported. A large fraction of circularly polarized light is seen in the O VI $n = 6-7$ hydrogenic transitions when a 4 MeV beam of O was passed through a tilted C foil.

C.A. 1981, 95, N12

Si (τ)

Ar-плазма

1981

1) 5 Г13. Расчет термодинамических характеристик и коэффициентов переноса двухтемпературной аргонной плазмы. Calculation of thermodynamic and transport properties of a two-temperature argon plasma. Hsu K. C., Pfender E. «ISPC — 5: 5 Int. Symp. Plasma Chem., Edinburgh, 10—14 Aug., 1981. Symp. Proc. Vol. 1». Edinburgh, 1981, 144—152 (англ.)

Для двухтемпературной Ar-плазмы при атмосферном давлении рассчитаны термодинамич. характеристики и коэф. переноса: состав, энтальпия, электропроводность, теплопроводность и вязкость. Результаты представлены в виде графиков. Сопоставление с расчетными данными для однотемпературного (термодинамического равновесного) варианта показывает отличное совпадение, однако при $T_e/T > 1$ отмечено существенное расхождение с имеющимися в литературе данными. Обсуждены возможные причины расхождений.

Резюме

расчет
термодинамич.
характер.

Ф. 1983, 18, № 5.

1981

Ar

22 Б1595. Полосы люминесценции аргона в спектральной области между 1600 и 2900 Å. Klein G., Carvalho M. J. Argon luminescence bands between 1600 and 2900 Å. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 8, 1283—1290 (англ.)

Исследована природа «третьего континуума» в области 1600—2900 Å, наблюдаемого в спектрах испускания газ. Ar при давл. выше атмосферного. Исследовали зависимости времени жизни τ соотв-щего возбужденного состояния от давл. (до 60 атм) и интенсивности спектра испускания от напряженности электр. поля (до 4 кВ/см²) при возбуждении спектров α -частицами ^{210}Po . Величина τ не зависит от давл. до 30 атм. Это означает, что экстраполированное к нулевому давл. значение $\tau_0 = 5,00$ нс представляет собой излучат. время жизни, а безызлучательные переходы при давл. ниже 30 атм не эффективны. Поэтому начальным состоянием перехода не может быть возбужденное молек. состоя-

спектр
люминесцен
ции

X. 1981/422, 1945

ние, лежащее выше низших возбужденных состояний $^1\Sigma_u^+$ и $^3\Sigma_u^+$ нейтр. молекулы Ag_2 , т. к. в этом случае скорости безызлучательных переходов в эти состояния должны сильно зависеть от давл. Полученные данные объяснены в предположении, что третий континуум обусловлен переходом из возбужденного состояния молекул. иона Ag_2^{+*} (связанное состояние с асимптотой ион-атом в состояниях $^2S-^2S_0$) в конечные состояния молек. иона, к-рые диссоциируют с образованием ион-атомной пары $^2P-^1S_0$. С излучательным процессом конкурирует ион-электронная рекомбинация в треке α -частицы, сечение к-рой для Ag_2^{+*} в ~ 5 раз меньше по сравнению с Ag_2^+ в основном состоянии. Эта рекомбинация очень эффективна в жидк. и тв. Ag из-за повышения плотности, что объясняет отсутствие третьего континуума в этих фазах. Наложение электрич. поля, растягивающего заряды, снижает эффективность рекомбинации и повышает интенсивность третьего континуума на несколько процентов.

В. Е. Скурат

1981

Ar

Kemister G., et al.

Грочин

J. Chem. Phys. 1981, 75
(4), 2022-2023.

●
(em. He; III)

Ar

1981

спектр.
линии

95: 178065z Spectrum line profiles of neutral argon in the near infrared spectral range. Musielok, J. (Inst. Phys., Pedagogische Hochsch. Opole, 45-052 Opole, Pol.). *Beitr. Plasmaphys.* 1981, 21(3), 179-87 (Ger). A good agreement was found between theor. calcd. Ar I spectral line profiles at 7506.98 and 8761.69 Å and those obsd. for Ar-H arc plasma at currents of 47 and 106 A. The calcs. were based on the electron concn. and plasma temp. data detd. from the H_β line half width and intensity. The line broadening and asymmetry effects as well as the field-probability of distribution parameters were accounted for.

@. A. 1981, 95, v 20

Ar

1981

8 ДЗЗ. Точность метода переходного состояния многоэлектронных систем, базирующегося на неэмпирической квантостатистической теории. Accuracy of transition states of many-electron systems on the basis of a quantum-statistical ab initio theory. Olszewski S. «Acta phys. Acad. sci. hung.», 1981, 50, № 1, 125—129 (англ.)

Проведено сопоставление концепций переходного состояния Слэтера (ПСС) и Уильямса — Де-Гроота — Коммерса (ПС УГС) (Williams A. R., De Groot R. A., Sommers C. B., «J. Chem. Phys.», 1975, 63, 628) в рамках неэмпирических статистич. моделей Томаса — Ферми — Дирака и Томаса — Ферми — Дирака — Гомбаша. Оба варианта теории переходного состояния применены к расчету потенциалов ионизации (ПИ) атомов Ar,

у
☒
(+2)

Kr, Xe

ф. 1982, 18, № 8.

Кг, Хе. Результаты, полученные методом ПС УГС, всегда ближе к «точным» (в статистич. приближении) значениям, чем результаты расчетов с ПСС. Различие оценок ПИ уменьшается при переходе от Аг к Хе. Предполагается связь этого явления с постепенным приближением зависимости одноэлектронной энергии от числа заполнения к линейной по мере увеличения числа электронов в атоме. А. В. Зайцевский

Ar

1981

2 Д230. Возбуждение электронным ударом четырех низших возбужденных состояний аргона. Electron-impact excitation of the lowest four excited states of argon. Padial N. T., Meneses G. D., Da Paixão F. J., Csanak Gy., Cartwright David C. «Phys. Rev. A: Gen Phys.», 1981, 23, № 5, 2194—2212 (англ.)

расчет

В первом порядке теории многих частиц (приближение хаотич. фаз) рассчитаны диффер. и интегр. сечения возбуждения атома аргона в электронные состояния 4^3P_0 , 4^3P_2 , 4^3P_1 и 4^1P_1 падающими электронами с энергиями 16, 20, 30, 50 и 80,4 эВ. Для диффер. сечений возбуждения уровней с $J=1$ учтена спин-орбитальная связь в волн. ф-циях возбужденных состояний. Детальные расчеты с учетом и без учета этой связи показывают, что эффект спин-орбитального взаимодействия приводит к заметному изменению формы сечений. Результаты хорошо согласуются с сечениями, полученными из экспериментов по измерению энергетич. потерь электронов на аргоне.

В. Г. Левин

ф. 1982, 18, №2.

1981

Ar

Kr

Xe

✓ 94-200364x Resonance ionization spectroscopy schemes for argon, krypton, and xenon. Payne, M. G.; Chen, C. H.; Hurst, G. S.; Kramer, S. D.; Garrett, W. R.; Pindzola, M. (Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, TN 37830 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 79(1), 142-8 (Eng). Laser schemes are suggested for the efficient ionization of Ar, Kr and Xe and the related 2 photon transition rates are given. Ionization yields were calcd. for each gas with reasonable laser parameters.

резонанс,

ионизация,

спектроскопия

(42)

A



C.A. 1981, 24, N24

Ar

[Ommuck 13166]

1981

Proffitt M. H., et al.

Kv. lex.
paenem

Can. J. Phys., 1981, 59,
N10, 1459-1474.

Ar

1981

Энергия
связи

6 ДЭС. Расчеты спин-орбитального расщепления валентных электронов в атомах по методу переходного состояния Слэтера. Slater transition state calculations of valence electron spin-orbit splitting in atoms. Sen K. D. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 12, 5971 (англ.)

Приведены энергии связи валентных электронов для атомов Ag, Kr, Xe, Ba, Hg, Pb. Они рассчитаны по методу переходных состояний Слэтера с использованием релятив. локального потенциала Хединна — Ландхвиста. Результаты согласуются с эксперим. данными.
В. Тутлис

⊠
+5



Ф. 1982, 18, № 6.

Az

1982

Бирюков А. П., Телешев-
ская В. В. и др.

У;

Ростов. ин-т нем. яз.-г.
трансл. Ростов н/Д, 1982,
31 с. Библиогр. 13 назв. (Рук.
дел. в ВУН ЧТУ 9 нояб. 1982;
N 5515-82 деп). (св. Ne; III)

A7

1982

Cacelli Ivo, Moccia

paolini E., Roberto., et al.

et al., J.

Chem. Phys., 1982,

71, N2, 199-209.

(esp. Ne ; III)

Ar

№ 14109

1982

10 Д43. Энергия уровней дважды возбужденных состояний в аргоне. Energy levels of doubly excited states in argon. El-Sherbini Th. M., Allam S. H. «Ann. Phys.» (DDR), 1982, 39, № 2, 107—111 (англ.; рез. нем.)

Представлены численные значения для энергий дважды возбужденных состояний в Ar , Ar^+ , Ar^{2+} и Ar^{3+} . Расчеты проводились по методу самосогласованного поля Хартри—Фока в рамках одноконфигурац. приближения. Для энергетич. уровней конфигураций $KL 3s3p^6nl$ и $KL 3s^22p^4nl n'l'$ в Ar продемонстрировано согласие с экспериментом и расчетами других авторов.

В. Г. Пальчиков

Li;

(+2)

Ar^+

Ar^{2+}, Ar^{3+}

сп. 1982, 18, N10.

Ar.

[05.14109]

1982

21 Б19. Энергетические уровни двукратно возбужденных состояний аргона. El-Sherbini Th. M., Allam S. H. Energy levels of doubly excited states in argon. «Ann. Phys.» (DDR), 1982, 39, № 2, 107—111 (англ.; рез. нем.)

В рамках одноконфигурац. приближения Хартри—Фока рассчитаны энергии состояний, соотв-щих различным двухэлектронным возбуждениям нейтр. атома Ar и ионов Ar⁺, Ar²⁺ и Ar³⁺. Энергии состояний нейтрально-го Ar, отвечающих электронным конфигурациям $KL3s3p^6nl$ и $KL3s^23p^4nl'n'l$, где nl и $n'l'$ -состояния $3d$, $4s$ и $4p$ в различных комбинациях, хорошо согласуются с эксперим. данными, полученными различными методами. И. А. Тополь

Ei

(43) ☒

X. 1982, 19, N 21

Ar

Ommuck 14274

1982

соемод
молекула
орбиталями,
расширя
Gordon M.S., Binkley
J.S., et al.
J. Amer. Chem. Soc.,
1982, 104, N 10,
2797-2803.

Ar

1982

Hernández E., et al.

pacrrier Phys. Rev. A: Gen.

E Phys., 1982, 25, N1, 107-
-112.

( cer. He; III)

Ar

1982

7 Д313. Библиография исследований атомных и внутренних молекулярных возбуждений. Bibliography of atomic and molecular inner-shell excitation studies. Hitchcock A. P. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1982, 25, № 2—3, 245—275 (англ.)

Составлены таблицы эксперим. и теоретич. исследований энергий возбуждений некоторого класса атомов и молекул. Указаны возбуждаемый атомный или внутренних молекулярный уровень, ссылка на работу, в которой исследовалось в-во, область исследованных энергий. В таблицы вошли атомы Ag, Ba, Cd, Ce, Cs, Eu, Xe, а также некоторые молекулярные соединения.
— Л. М. Монастырский

энергии
возбужд.

А
(+6)

ср. 1982, 18, № 7.

ссл. ори

Az

1982

Kerl K.

дисперсия
показателя
прево-
сходства

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1982, 86, n 9,
812-820

(см. He; I)

Ar

[Om. 16154]

1982

98:95977j A pair potential for argon determined from thermodynamic properties of the dense gas. Malijevsky, Anatol; Labik, Stanislav (Dep. Phys. Chem., Inst. Chem. Technol., Prague, Czech.). *Mol. Phys.* 1982, 47(4), 823-31 (Eng). A data inversion technique is proposed for the detn. of pair interat. potentials from the Helmholtz free energies of a dense gas, and a potential for Ar is detd. The reliability of the potential was tested by comparing the theor. and the exptl. results for the 2nd and 3rd virial coeffs., viscosity coeffs., and the thermodyn. properties of the liq. With the exception of the viscosities, the potential predicts these properties as well or better than that of J. Barker et al. (1971).

Виртальный
коэффициент

С. А. 1983, 98, № 12.

Ar

1982

Saad S.M., Youssef A.

неизвестно
ссылка.
номеров.

Egypt. J. Phys. 1981 (Pub
1982) 12(2), 111-116.

Λ -2

(ссылка. Ne; III)

Az

1982

Shaw David A., King
George C., et al.

u. n.,
Si.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1982, 15,
N 11, ● 1785-1793.

(see. N₂; III)

Ar

Ommuck 14272

1982

Shull J. M., Van
Steenberg M.,

Astrophys. J. Suppl.
Ser., 1982, 48, N 1,
● 95-107.

коммерциализ.
равновес.,
расщепл.

A2

1982

10 Д203. Перенос протона от ArH^+ к различным нейтральным молекулам. The proton transfer from ArH^+ to various neutrals. Villinger H., Futrell J. H., Noworka F., Duric N., Lindinger W. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 7, 3529—3534 (англ.)

В дрейфовой трубе с селективной по массе инжекцией ионов исследованы реакции переноса протона при столкновении ArH^+ с молекулами H_2 , D_2 , CH_4 , N_2 , O_2 , CO , CO_2 и реакции переноса дейтрона при столкновении ArD^+ с H_2 и D_2 . Использование в качестве буферных газов He и Ar позволило качественно оценить влияние колебательной энергии на динамику реакции и количественно — аналогичное влияние поступательной энергии. Показано, что скорости всех экзотермич. реакций велики и сравнимы с обратными временами столкновений. Константы скорости всех реакций, за исключением ArH^+ с $\text{H}_2(\text{D}_2)$, в исследованной области энергий

ArH^+

(H)

$\text{H}_2(\text{ArH}^+)$

ор. 1982, 18, N 10

не зависят от поступательной энергии. Из зависимостей Хуфта, в которых в качестве поступательной т-ры фигурировала кинетич. энергия центра масс, оценена разность сродства к протону ($\sim 0,55$ эВ) для ~~Ag и H₂~~. В оценке использовались кинетич. данные для реакции: $\text{AgH}^+ + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_3^+ + \text{Ag}$. А. И. Ш.

Ar

1983

99: 45605m Transition probabilities for lines arising from levels belonging to the $3p^5np$ ($n = 4, 5, 6$) configurations of argon(Ar I). Borge, M. J. G.; Campos, J. (Fac. C. Fis., Univ. Complut. Madrid, Madrid, Spain). *Physica B+C (Amsterdam)* 1983, 119(3), 359-66 (Eng). Lifetimes of 13 levels belonging to the $3p^5np$ ($n = 5, 6$) configurations of Ar I were measured by means of the delayed coincidence method. Relative transition probabilities for 67 $4s-np$ ($n = 4, 5, 6$) lines were found. For 26 intense ($1s-4p$) lines, the exptl. abs. transition probabilities are given. From cascade components of the $5p$ levels, decay lifetime values for $4d$ and $6s$ levels are inferred. Seven of these results are original, as well as the lifetimes of the $6p(1/2)_1$ and the $6p(1/2)_0$ levels. The lifetimes of the last 2 levels are 324 ± 14 and 190 ± 10 ns, resp.

(fmn)

c.A. 1983, 99, N 6

Ar

1983

98: 222139q Formation of highly excited argon and krypton atoms due to asymmetric charge exchange of argon(1+) and krypton(1+) ions on inert gas atoms. Aparina, E. V.; Balakai, A. A.; Markin, M. I.; Tal'roze, V. L. (Otd. Inst. Khim. Fiz., Chernogolovka, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1983, 269(2), 395-9 [Phys. Chem.] (Russ). Translational energy spectra and excitation cross sections in metastable Ar^+ and Kr^+ ($E = 90$ eV)

charge-transfer collisions with Ar, Kr, and Xe atoms were detd. exptl. The effective ionization curve for Ar and Kr as products of charge transfer collisions are presented.

кривая
ионизации

 Kr

C.A. 1983, 98, N26

Ar

[Om. 17960]

1983

/99: 202838j Transition probabilities of $4p\text{-}nd$ ($n = 4, 5, 6, 7$) lines of argon (Ar I). Borge, M. J. G.; Campos, J. (Fac. Cienc. Fis., Ciudad Univ., Madrid, Spain). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1983, 30(5), 433-8 (Eng). Relative transition probabilities for 120 lines belonging to the $4p\text{-}nd$ ($n = 4, 5, 6, 7$) transition arrays of Ar I were detd. from emission-intensity measurements. Lifetime data for the $4d$ levels were used to obtain abs. transition probabilities. Transition probabilities were obtained for $4p\text{-}4d$ lines. Because of the lack of data on $5p\text{-}4d$ transition probabilities, calcs. were performed on jK coupling. The exptl. values were compared with exptl. and theor. data given by other authors.

(fnn)

C.A. 1983, 99, N24

Ar

Om. 16652

1983

(fmn)

98: 152127h Lifetimes of $ns(3/2)_2$ ($n = 6, 7, 8, 9$) levels and transition probabilities of $4p$ - ns lines of argon (Ar I). Borge, M. J. G.; Campos, J. (Fac. Cienc. Fis., Catedra Fis. At. Exp., Madrid, Spain). *Phys. Rev. A* 1983, 27(4), 1910-13 (Eng). Forty-eight transition probabilities for lines belonging to the $4p$ - ns ($n = 6, 7, 8, 9$) transition arrays of Ar I were detd. by means of emission-line-intensity measurements. The single photon delayed-coincidence method was used to obtain the lifetime values of the $ns(3/2)_2$ ($n = 6, 7, 8, 9$) levels. With the taking into account of these lifetimes together with theor. calcn. in jK coupling for the lines beyond the exptl. range, the relative transition probabilities were put on an abs. scale. The lifetime values obtained in the present work are original in the literature excepting the $7s(3/2)_2$ -level lifetime. Four transition probabilities are also the 1st values found in the literature.

C. A. 1983, 98, N 18.

As I

[Um. 16759]

1983

Borge M. J. B., Cam-
pos J.,

Physica, 1983, BC 119,
N 3, 359-366.

Э, рачен;
вероятно-
сти пере-
ходов

Ar

10мчук 159781 1983

Расчет
дипольн.
поляри-
зуемости

Ghosh S.K.,
Theor. Chem. acta
1983, 62, N3, 209-217.

Ar

1983

99: 202595c Lifetime of the 2p levels of argon. Kazantsev, S. A.; Subbotenko, A. V. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1983, 55(4), 767-8 (Russ). The lifetime of the 2p-levels of Ar was detd. by the self-alignment method in a plasma of a high-frequency discharge of low energy with exptl. consideration of the adjustment on radiation capture.

(7)

C.A. 1983, 99, N24

Ar

1983

soln,

/ 99: 129072y Thermodynamics of the dissolution of argon in aqueous solutions of acetone, acetamide and urea. Kononenkova, T. V.; Vinogradov, V. I.; Krestov, G. A. (Inst. Nevodnykh Rastvorov, Ivanovo, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1983, 57(8), 2074-5 (Russ). The soly. of Ar in aq. solns. of acetone, acetamide, and urea was detd. at 273-298 K for electrolyte content of 0-0.1 mol fraction. Thermodyn. function were calcd. at 273.15 K. Factors affecting the soln. process are discussed.

C. A. 1983, 99, N 16

Ar

1983

98: 169665e Lifetimes ratios for argon(Ar I) 4p levels. Musiol, K.; Jones, Douglas W.; Wiese, W. L. (At. Plasma Radiat Div., Natl. Bur. Stand., Washington, DC 20234 USA). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1983, 29(4), 321-7 (Eng). Relative transition probabilities of 13 transitions between the $3p^4s$ and $3p^4p$ configurations in Ar I were measured in emission with a wall-stabilized arc. These data were combined to yield relative lifetimes which are compared with recent direct lifetime measurements. An important consideration in the expt. was to minimize effects of radiation imprisonment since this effect may have played an important role in lifetime measurements by other methods. The results agree well with most previously published lifetime data and emission measurements.

(fmn)

C. A. 1983, 98, N20

Ar

1983

Petrini D., Kaslahn E.

Z. Phys. B: Atom. and
Ei.; Mol. Phys., 1983, 16, N3,
491-498.

(e.g. Ne; III)

A₂

1983

20 Б68. Сопоставление расчетов потенциальных кривых и экспериментальных данных с целью интерпретации и восстановления профилей линий: случай эксимера аргона. Interaction entre calcul quantique des courbes de potentiel et expériences pour l'interprétation et la reconstitution des profils de raies: le cas de l'excimère de l'argon. Spiegelmann F., Caste M. C. «Ann. Phys. (Fr.)», 1983, 8, № 2, 199—224 (фр.; рез. англ.)

теор. расчёт

На примере исследования формы крыльев линии перехода $^1S \rightarrow ^3P_1$ и $^1S \rightarrow ^1P_1$ в аргоне обсуждается возможность современной теории в неэмпирич. расчете потенциальных кривых эксимеров инертных газов и использования этих кривых для интерпретации формы линий в крыльях, далеких от резонансной частоты. И использованные эксперим. результаты получены при поглощении синхротронного излучения в газе Ar различной плотности и т-ры. Распределение интенсивностей в крыльях:

X. 1983, 19, № 20

описывалось статич. теорией уширения в предположении, что основной вклад в спектр дают переходы на молек. термы 0_u и 1_u эксимера Ag_2^* . Проанализированы трудности, возникающие при восстановлении потенциальных кривых по спектрам и связанные с немонотонным ходом как самих адиабатич. потенциалов, так и разности энергий возбужденного и основного состояния, определяющей частоту перехода. Указаны условия, при выполнении к-рых исследование распределения интенсивности в крыльях может дать прямую информацию о природе связанных состояний эксимера. Обсуждена точность различных приближений при вычислении франк-кондоновских факторов, в частности, приближения «отражения» функции невозбужденного состояния на крутом участке адиабатич. возбужденного электронного терма.

Е. Е. Никитин

Ar

1983

6 Б1028 Д. Методика квантовомеханического изучения молекул, содержащих тяжелые атомы. Apports méthodologiques pour le traitement quantique de molécules contenant des atomes lourds. Teichteil Christian. Thèses. Doct. état sci. Univ. Paul Sabatier Toulouse, 1983. Var. pag., ill. (фр.)

Рассмотрено применение метода конфигурац. взаимодействия с итерац. определением конфигурац. пространства по теории возмущений с учетом всех электронов к изучению ряда фотохим. перегруппировок. Для молекул с тяжелыми атомами развита схема расчета, основанная на комбинированном использовании метода конфигурац. взаимодействия и неэмпирич. псевдопотенциала. Предложен метод включения релятивистских эффектов, сохраняющий нерелятивистскую симметрию задачи. Развитый подход применен к расчету атомов Ag и In г. молекул InH и Ag_2^* .

— Б. Б. Павлов-Веревкин

расчет
структ.

1
(43) 17
X. 1986, 19, N 6.

Ar

1983

9 Г23. Экспериментальное изучение ионизации Ar за отраженными ударными волнами. Experimental study on the ionization of argon behind reflected shock waves. Terao Kunio, Hozaka Masato, Kaitoh Hiroaki. «Jap. J. Appl. Phys.», 1983, Pt 1, 22, № 4, 735—741 (англ.)

Методом рассеяний лазерного излучения измерены т-ра и плотность электронов, а также т-ра ионов за фронтом отраженной ударной волны. Спектроскопич. значения т-ры определены по излучению линии AgI. Значения всех трех т-р отличны друг от друга в течение нескольких сотен микросекунд после прохождения фронта отраженной ударной волны. Электронная и ионная т-ры много выше, а спектроскопическая ниже, чем расчетная газодинамич. т-ра. Степень ионизации много выше той, что соответствует равновесному состоянию. Отмечался стохастич. характер эмиссионного излучения

(изучение
ионизации)

ф. 1983, 18, № 9.

линии AgI, что указывает на неоднородность газовой среды. Указанные явления получили следующее объяснение: первоначальная газовая среда неоднородна за ударной волной и ассоциативная ионизация также имеет место только в некоторых точках. Газ становится однородным преимущественно вследствие процессов диффузии.

Резюме



Ar

1984

Borze M. J. G., Campos J.

An. Fiz., Ser. A. 1984,
80(1), 49-57.

(fmr)

● (cur. Ne; III)

Ar

1984

Kestin J., Knierim K.,
et al.,

второй
вариант-
ный
коэффициент.

J. Phys. Chem. Ref. Data
1984, 13 (1), 229-303.

● (см. He; III)

Ar

1984

8 J177. Эмиссионный спектр высокоионизованного аргона в области 100—900 Å. Emission spectrum of highly ionized argon in the 100 to 900 Å range. Lévêque G., Girard S., Robin J. «J. Phys.» (FR.), 1984, 45, № 4, 665—670 (англ.; рез. фр.)

В области 100—900 Å изучен спектр аргона, возбуждаемого в кварцевом капилляре при давлении аргона $4 \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст. электрич. разрядом от конденсатора 0,25 мкФ, заряженного до 9 кВ. Для регистрации спектра использовался вакуумный монохроматор скользящего падения излучения (82°) с решеткой радиусом 3 м, дававший разрешение 0,8 Å. С неопределенностью 0,1 Å измерены длины волн 70 неизвестных линий, которые отнесены к стадиям ионизации от Ar IV до Ar VIII по поведению интенсивностей при вариации разрядных условий. Классификация этих линий по принадлежности к электронным переходам не проводилась.

А. Н. Рябцев

(Si)

ср. 1984, 18, № 8

A7

1984

Olofsson G, Oshodj A. A.,
et al.

$\Delta_{aq} H;$

J. Chem. Thermodyn.,
1984, 16, N11, 1041-1052.

(cor. Me(2); $\bar{I}$)

Ar

1984

Robles Juvenio, Bar-
tolotti Libero J.

Ac, pacific
J, Elektro-
pulsus.

J. Amer. Chem. Soc.
1984, 106, N 13,

● 3723-3727.

(see. Os; III)

Ar

1984

Saethre L. J., Thomas
T. D., Ungier L.

y;

J. Electron Spectrosc.
and Relat. Phenom.,
1984, 33, N4, 384-386.

●
(cer. Ne; III)

Ar

1984

Veenhuizen Hans P.

спектро-
скоп.
высокого
разре-
шения

Acta univ. upsal.
Abstrs. Uppsala Diss.
Fac. Sci., 1984, n 742,
24pp; ill.

(сир. PH3; III)

Ar

(Om. 24133)

1986

Cernusak J., Diercksen
G.H.F.,

et al.,

Chem. Phys. Lett., 1986,

128, N1, 18-24.

мультиметр-
портативный.
портативный-
электрометр

Ar

1986

105: 121227z The argon melting curve to very high pressures. Zha, C. S.; Boehler, R.; Young, D. A.; Ross, M. (Dep. Chem. Biochem., Univ. California, Los Angeles, CA 90024 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(2), 1034-6 (Eng). The melting curve of Ar was measured at ≤ 717 K and ≤ 60 kilobars by using a new interferometric technique in a diamond-anvil cell. Theor. calcs. are in excellent agreement with the measurements.

Кривая
тавления

C. A. 1986, 105, N 14

Ar

1986

5 Л81. Экспериментальные вероятности переходов инфракрасных линий переходов $4p-3d$ ArI. Experimental transition probabilities of infrared lines belonging to the $4p-3d$ transition array of Ar(I). Tanarro I., Campos J. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1986, 36, № 4, 345—348 (англ.)

Из измерений относит. интенсивностей линий излучения оптически тонкой плазмы определены относит. вероятности переходов $4p-3d$ ArI, начинающихся с 6 верхних уровней, в обозначениях jK -связи записываемых как $3d(7/2)_1$, $3d(3/2)_1$, $3d(5/2)_2$, $3d'(5/2)_2$, $3d'(3/2)_2$ и $3d'(3/2)_1$. Источником излучения служила дуга, работающая при постоянном токе 1 А и давл. 1 мм рт. ст. Относит. вероятности переходов приведены к абс. шкале с помощью расчетов радиальных интегралов в кулоновском приближении и правила сумм для сил линий. Полученные результаты согласуются с расчетами в промежуц. схеме связи.

А. Н. Рябцев

(Si)

ф. 1987, 18, № 5

Ar

(OM. 27973)

1987

Glossman D., Donna-
maria C., et al.

(7)

Acta phys. slov., 1987,

muon.

paucim

37, N 5, 298-315.

Ar

1987

107: 205518z Modified Morse potential function for heavy rare gas solids: I-argon. Gupta, N. P. (Phys. Dep., Univ. Jodhpur, Jodhpur, India). *Solid State Commun.* 1987, 63(10), 921-4 (Eng). The well-known Morse potential function is modified to suit the solidified heavy rare gas solids (Ar, Kr and Xe) by changing the numerical coeff. of its attractive exponential term from 2 to 2.25. The dispersion curves for Ar calcd. with the modified potential function in the principal symmetry directions give excellent fit to the inelastic neutron scattering data.

nomex.
p-vel

C.A. 1987, 107, N22

1987

Ar

Sekiya Masahiro,
Tatewaki Hiroshi.

kl. seex. J. Chem. Phys., 1987,
pacrēm 86, N5, 2891-2898.

(cer. Armony om B go Ca ; IV)

Ar

1987

22 Б4037. Тепловые реакции с участием мономера и димера Ar^+ с N_2 , H_2 , Xe и Kr . Thermal energy reactions involving Ar^+ monomer and dimer with N_2 , H_2 , Xe , and Kr . Shul R. J., Passarella R., Upschulte B. L., Keesee R. G., Castleman A. W. «J. Chem. Phys.», 1987, 86, № 8, 4446—4451 (англ.)

Методом выделенного иона в проточной трубе (SIFT) изучены тепловые р-ции ионов Ar^+ и Ar_2^+ с N_2 , H_2 , Xe и Kr . Ионы Ar^+ и Ar_2^+ получали электронным ударом при расширении потока Ar в вакуум. Ионные продукты регистрировали с помощью квадрупольного масс-спектрометра. Измерены константы скорости р-ций $\text{Ar}^+ + \text{Xe} \rightarrow \text{Xe}^+ + \text{Ar}$ ($4,3 \cdot 10^{-13}$ см³/с); $\text{Ar}_2^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{Ar}^+ \cdot \text{N}_2 + \text{Ar}$ ($2,2 \cdot 10^{-10}$ см³/с); $\text{Ar}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{ArH}^+ + \text{H} + \text{Ar}$ (а) ($3,6 \cdot 10^{-10}$ см³/с); $\text{Ar}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{ArH}_2^+ + \text{Ar}$ (б) ($1,1 \cdot 10^{-10}$ см³/с). Наличие $(\text{Ar} \cdot \text{N}_2)^+$ указывает, что энергия связи Ar^+ с N_2 превышает величину 1,27 эВ. По

(Ar)

⑦

X. 1987, 19, N 22

 $\text{H}_2^+ \cdot \text{Ar}_2$

(Do)

соотношению эффективности каналов (а) и (б) р-ции Ag_2^+ с H_2 получены нижние оценки сродства к протону для Ag (3,69 эВ) и энергии диссоциации для $\text{H}_2^+ \cdot \text{Ag}$ (0,97 эВ). Предполагается, что наблюдаемые р-ции могут идти через образование промежут. комплекса.

Н. И. Бутковская

Ar

1987

20 B1011. Оптимизированные гауссовы базисные наборы для возбужденных состояний Ar, Ar⁺ и He. Optimized gaussian basis sets for excited states of Ar, Ar⁺ and He. Stärk Dagmar, Peyerimhoff Sigrid D. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 150, № 3—4, 203—214 (англ.)

В расчетах методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям оптимизированы параметры базисных наборов гауссовых ф-ций для возбужденных состояний Ar, Ar⁺ и He. Рассмотрены состояния Ar и Ar⁺, в к-рых частично заполнены оболочки 3s, 3p, 3d, 4s и 4p. Отмечено, что для описания ридберговых орбиталей Ar и Ar⁺ требуются базисные ф-ции с разными экспоненциальными параметрами; d-ф-ции могут быть сгруппированы без заметной потери точности. Для расчета молекул, содержащих Ar, рекомендован базис сгруппированных гауссовых ф-ций $(14s10p5d)/[8s6p4d]$. Для He получен базис $(10s4p1d)/[8s4p1d]$. Рассчитанные с использованием этих базисов энергии переходов в Ar, Ar⁺ и He хорошо согласуются с эксперим. данными.

Жерми
переходов

(+2) X

X. 1987, 19, N 20

А. А. Сафонов

Ar

1988

11 Л112. Наблюдение многих новых валентных сателлитов аргона вблизи порога. Observation of many new argon valence satellites near threshold. Becker U., Langer B., Kerkhoff H. G., Kupsch M., Szostak D., Wehlitz R., Heimann P. A., Liu S. H., Lindle D. W., Ferrett T. A., Shirley D. A. «Phys. Rev. Lett.», 1988, 60, № 15, 1490—1493 (англ.)

В области энергий фотонов 32—100 эВ, охватывающей интервал от порога главной 3s-линии аргона до минимума Купера, измерены фотоэлектронные спектры, в том числе и с нулевой кинетич. энергией. Для возбуждения спектров использовалось монохроматизированное синхротронное излучение. В области вблизи порога зарегистрировано около 40 фотолиний, идентификация которых проводилась сравнением с оптич. уровнями энергии. У ряда линий «корреляционных сателлитов» наблюдалось значительное возрастание парци-

(Si)

Ф. 1988, № 11

альной интенсивности у порога, что интерпретировано как проявление сильной межканальной связи вблизи порога, делающей доступными ионные состояния с большими угловыми моментами. Обсуждается различие «внутренних» корреляционных эффектов между дискретными состояниями и «динамич.» корреляций, возникающих как результат процесса фотоэмиссии.

Библ. 21.

А. Н. Рябцев

Ar

Изо-
топ-
сдвиги

ф. 1989, № 2

1988

2 Л115. Полевые изотопические сдвиги на переходе $3p^5 4p \rightarrow 3p^5 5d$ 604,3 нм в аргоне I. Field isotope shifts in the $3p^5 4p \rightarrow 3p^5 5d$ 604.3 nm transition in argon I. / Moscatelli F. A., Murnick D. E., Robinson R. B. // J. Phys. B.— 1988.— 21, № 16.— С. L495—L499.— Англ.

Измерены величины изотопич. сдвигов (ИС) между $^{36,38,40}\text{Ar}$ I с помощью метода бездоплеровской оптогальванич. спектроскопии на переходе $4p \rightarrow 5d$ ($\lambda = 604,3$ нм). Атомы Ar с естественным изотопич. составом возбуждались в тлеющем РЧ-разряде, накачка исследуемого перехода осуществлялась двумя встречными пучками излучения одномодового стабилизированного перестраиваемого лазера на красителе, промодулированного на частотах $\omega_1 = 409$ Гц и $\omega_2 = 611$ Гц. Регистрация оптогальванич. сигналов проводилась на суммарной частоте $\omega_1 + \omega_2$. Определенный по спектру сигналов полевой ИС оказался на 60% больше, чем ИС, измеренный на переходе $4s \rightarrow 4p$ в Ar. Отмечается необычность существования столь большого полевого ИС в атомах со сравнительно малым зарядом ядра. Полученные результаты пока не нашли удовлетворительного теоретич. обоснования.

С. Ч.

Ar

(Om. 31152)

1988

Pellarin M., Vialle J.-L.,
et al.,

Рубин.
космол.

J. Phys. B: At. Mol.

Opt. Phys. 1988, 21, 3833-
3849.

Ar

1988

9 Л101. Наведенная фотонами спектроскопия флуоресценции на переходах $\text{Ar}^{2+}(3s^23p^4-3s3p^5)$ и $\text{Ar}^+(3s^23p^5-3s^23p^4nl)$. Photon induced fluorescence spectroscopy of $\text{Ar}^{2+}(3s^23p^4-3s3p^5)$ and $\text{Ar}^+(3s^23p^5-3s^23p^4nl)$ transitions. Scharfner K.-H., Lenz P., Möbus B., Schmoranzner H., Wildberger M. «Phys. Lett.», 1988, A 128, № 6—7, 374—377 (англ.)

В области 65—105 нм зарегистрирован спектр, возникающий при облучении Ar монохроматизованным синхротронным излучением в интервале энергий фотонов 29—120 эВ. Наблюдалось три группы линий: диаграммные линии $3s^23p^5\ ^2P-3s3p^6\ ^2S$, спутничные линии с начальными состояниями $3p^4nl^{2s+1}L$ и спутничные линии вследствие двойной ионизации с начальными состояниями $3s3p^5\ ^{1,3}P$. Измерены сечения образования $\text{Ar}^{2+}(3s3p^5\ ^{1,3}P)$. Исследованы спутничные линии, не наблюдавшиеся ранее методом фотоэлектронной спектроскопии.

А. Н. Рябцев.

(xi)

ф. 1988, 18, № 9

Ar

1989

Guo Yufei, Wünn M.C.
et al.

He,
parvum

Phys. Rev. A 1989, 40
(11), 6685-8.

(see. ● He; III)

Ar

1989

/110: 84562k Atomic transition probabilities for the argon I 4s-5p transition array. Jones, D. W.; Wiese, W. L. (At. Plasma Radiat. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1989, 39(1), 110-14 (Eng). The transition probabilities for 23 lines of the Ar I 4s-5p array were detd. by emission spectroscopy utilizing a wall-stabilized arc. The 7 remaining lines of this transition array were either very weak or overlapped strongly with other lines so that they could not be reliably measured. The relative data were placed on an abs. scale by applying the result of a recent crit. anal. for the prominent 4s-5p line at 430.01 nm.

(fmm)

C.A. 1989, 110, N10

Ar VI

(Dm. 33189)

1989

Pinnington E.H., Ge Z.-G.,
et al.,

Phys. Scr. 1989, 39,
321-325

Energy level and Life-
time measurements for Ar VI.

Ar

[Om. 32945]

1989

Sanchez J.A., Blanco F.,
et al.,

Phys. Scripta, 1989,
39, 243-245

Simultaneous ● Excitation
and ionization of Ar by

Electron Impact.

As (II) [Dm. 32944] 1989

τ Schade W., Stryla Z.W.,
et al.,

Phys. Scripta, 1989,
29, 246 - 250.

As

(OM 34369)

1990

Hohm U., Kerl K.,

Nucl. Phys. 1990, 69,
N 5, 819-831.

Interferometric measurements
of the dipole ● polarizability

I of molecules between
300K and 1100K.

II A new method for mea-
suring the dispersion of
the polarizability and its
application to Ar , He ,
and O_2 .

Ar

1990

Ishikawa Yasuyuki,

переводим. Sekino Hideo, et al.

расчёт

Chem. Phys. Lett.

1990, 165 (2-3), 237-42.

(сер. ● Ne; III)

Ar

(OM 33932)

1990

Rahman N., Rizzo A.,
et al.

Chem. Phys. Lett. 1990,
166, NS-6, 565-571.

Dynamic Dipole Polarizabilities of He, Ne and Ar by

multi configurational linear
response.

Ar I Om. 34106 1990
Styła Z; Robee H., et al.,

τ Phys. Rev. A 1990, 41, N1,
512-515.

Reexamination of the lifetime
of the $3p_s$ level of Ar I.

OM 33588

1990

Ar

Tsurebuchi S., Watanabe K.,
et al.,

clila
ocxumst-
mopa.

J. Phys. Soc. Jap., 1990, 59,
N2, 497-505.

Optical Oscillator strenghts of
the Resonance Lines of Rare
Gases.

1995

F: Ar

P: 3

16B1205. Динамика высоколежащих автоионизированных ридберговских состояний Ar. The dynamics of high autoionizing Rydberg states of Ar / Bixon M., Jortner Joshua [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 11. - С. 4431-4446. - Англ.

РМХ 1997

Ar

Plushkov A.V.

1998

сметривок. et al.,

Van der
Waals.
сучмен

Russ. Phys. Y. 1998
41(3), 223-226

(cell.



Ne⁺; III)

As

1998

Klobukowski, M;

(Ap) Pol. J. Chem. 1998,
72 (7, Suppl.), 1472-1478

(-coll. Re; III)

1998

Ar

Ar
 Rydberg states
 Stark effect

129: 73416g High Rydberg states of argon: Stark effect and field-ionization properties. Merkt, F.; Osterwalder, A.; Seiler, R.; Signorell, R.; Palm, H.; Schmutz, H.; Gunzinger, R. (Laboratorium für Physikalische Chemie, ETH-Zürich, CH-8092 Zürich, Switz.). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1998, 31(8), 1705-1724 (Eng), Institute of Physics Publishing. A review with 42 refs. The Rydberg states with principal quantum no. $n \geq 27$ located below the $^2P_{3/2}$ ground state of the Ar^+ ion were studied by pulsed field ionization following single-photon excitation out of the $(3p)^6 \ ^1S_0$ ground state of Ar. The 0.1 cm^{-1} linewidth of the tunable extreme UV (XUV) laser source used enabled high-resoln. measurement of the Stark effect over a wide range of principal quantum nos. and elec. field strengths. Particular attention was given to the ionization of high Rydberg states induced by d.c. and pulsed elec. fields. The lowering ΔIP (expressed in cm^{-1}) of the ionization threshold by d.c. elec. fields is accurately described by $\Delta IP = ((5.99 \pm 0.13)\sqrt{F})$ when the elec. field strength F is expressed in V cm^{-1} , a result that is in good agreement with predictions of the classical saddle-point model for field ionization. The field-ionization threshold is very sharp: its width decreases from 0.7 to 0.2 cm^{-1} when the d.c. field strength is reduced 580 – 50 V cm^{-1} . Apart from the Stark states located in a very narrow energy range around the saddle-point energy in the $V(r) = -1/r - Fz$ potential which ionize very slowly, all Stark states located below the saddle-point energy have lifetimes exceeding several microseconds,

C.A. 1998,
 129, N6

whereas those located beyond the saddle-point energy ionize within <20 ns. The very slow field ionization that is obsd. in a narrow range of energies around the classical saddle point can be used to obtain high state selectivity in the pulsed field ionization. The pulsed field-ionization behavior obsd. in Ar suggests that the $\Delta IP = 4\sqrt{F}$ rule that is now commonly assumed in the anal. of pulsed-field-ionization (PFI) zero-kinetic-energy (ZEKE) spectra to describe the low-wavenumber onset of a line relative to the position of the corresponding field-free ionization threshold must be used with caution.

F: Ar

P: 3

1998

133:49113 Near threshold electron impact ionization of neon and argon. . Rouvellou,

Bruno; Rioual, Stephane; Pochat, Amedee

Laboratoire des Collisions Electroniques et Atomiques, UFR Sciences et Techniques Brest 2 Fr.

New Dir. At. Phys., [Proc. Int. Conf.], Meeting Date 1998, 185-189. Edited by: Whelan, Colm T. Kluwer Academic/Plenum Publishers: New York, (English)

The authors present coplanar equal energy sharing results on electron- impact ionization of Ne and Ar for excess energies < 8 eV obtained in 2 geometrical settings: coplanar sym. and const. mutual angle geometries. polarization effects were obsd. for Ar. The theor. approach attempted wi success by R.J. Whelan et al., (1993, 1994) to the case of H and He did no to an overall good agreement. The expts. represent a crit. test of theor

C-A. 2000, 133