

50624.4512

30088

1975

TC, Ph, MGU

CuI

*4-9219

Bielski A. A critical survey of atomic transition probabilities for CuI.

"J. Quant. Spectrosc. and Radiat. ~~Trans-~~fer", 1975, 15, N6, 463-472

(англ.)

0392 пик

367 368

0884

ВИНИТИ

50710.9112

Ph. TC. MGU

Cu

86960

Класс. стандарт
(ссыл. пост)

1975

84-9450

Closs H., Shukla M.M.

The lattice dynamics of noble metals.

"Physica", 1975, BC 79, N 1, 26-34

(англ.)

0401 г.м.

370 373 393

ВИНИТИ

Cu

[A-3105]

1975

Fraga S., et al.

Can. J. Phys., 1975, 53,

N 21, 2415-20.

(J).



(see Li; IV)

Li

Gáspár R.

1975

boinov.
p-um
paerum

" Acta phys Acad sci
hung " 1975, 39, N4, 261-273
(amm)

(see Li; III)

Cu (III)

#4-10424

1975

57869a Third spectrum of copper(Cu III). Shenstone, A. G. (Dep. Phys., Princeton Univ., Princeton, N. J.). *J. Res. Natl. Bur. Stand., Sect. A* 1975, 79A(3), 497-521 (Eng). An anal. of Cu III based on observations from 500 to 6900 Å is presented. The low structures $3d^3$ and $3d^34s$ are complete, including the rarely, if ever before, found $3d^3(1S)4s^2S$. The $3d^34s^2$ includes $4F$, $2F$, $2G$, and $2H$ but the $4P$, $2P$, a^2D , b^2D have eluded all attempts to find them. The ionization potential calcd. from $4s$, $5s$, $6s^4F_{9/2}$ is $296, 980 \text{ cm}^{-1}$ but by a comparison with Ni II which has a longer series an approximate value of $297, 140$ can be estd. The $3d^34d$ group is complete, except for one level, as is $5d$ based on $3F$ and $1G$, the other $5d$ groups being incomplete. $3d^3(3F)4f$ is complete and 26 levels based on $1D$, $3P$, $1G$ are known. $3d^3(3F)5g$ is incomplete and a few levels based on $1D$ and $1G$ were found. A discussion of the validity of the anal. of Cu IV by J.F. Schroeder and Th.A.M. Van Kleef is given (1970).

(Ei: 7)

C.A. 1975. 83 v10

Cu (III)

*4-10424

1975

2 Д342. Спектр Cu III. Shenstone A. G. The third spectrum of copper (Cu III). «J. Res. Nat. Bur. Stand.», 1975, A79, № 3, 497—521 (англ.)

(ϵ_i, γ)
Исследован спектр Cu III в области 500—6900 Å. Представлены обширные таблицы линий Cu III с указанием длин волн, интенсивностей и переходов. Нижние уровни $3d^9$ и $3d^8 4s$ (включая $3d^8(^1S)4s^2S$) исследованы полностью. Конфигурация $3d^7 4s^2$ включает термы 4F , 2F , 2G , 2H , но термы 4P , 2P , a^2D , b^2D в ней не были обнаружены. Определены ионизационные пределы серий $ns^4F_{41/2}$, $ns'^2D_{21/2}$, $ns''P_{21/2}$, $ns'''^2G_{41/2}$. Исследованы серии уровней $3d^8(^3F)4f$, $3d^8 4d$. Даны замечания по спектрам Cu IV и Cu II в сравнении с аналогичными данными в изоэлектронном ряду. Библ. 9.

В. П. Шевелько

р 1976 N2

* 13-8635

1975

Cu (V, VI)

(Ei)

18/15q Low lying multiplets in the spectra of copper (Cu V) and (Cu VI). VanKleeef, Th. A. M.; Joshi, Y. N.; Benschop, H. (St. Francis Xavier Univ., Antigonish, Nova Scotia). *Can. J. Phys.* 1975, 53(3), 230-5 (Eng). The spectrum of Cu was obsd. on 10.7 m normal incidence and 10.7 m grazing incidence spectrographs by using a sliding spark source. In Cu v the ground state multiplet $3d^7 \ ^4F$ and the low lying multiplets $3d^6(^5D) \ 4p \ ^6P^0$, $^4F^0$, and $^4D^0$ were detd. In Cu vi the ground state multiplet $3d^6 \ ^5D$ and the low lying multiplets $3d^5(^6S) \ 4p \ ^5P^0$, $3d^5(^4P) \ 4p \ ^5P^0$, and $3d^5(^4D) \ 4p \ ^5D^0$ were detd. Twenty-three lines were classified in Cu v and 29 lines were classified in Cu vi. Predictions for the intervals in the ground state multiplets $3d^7 \ ^4F$ in the spectra of Zn vi and Ga vii and $3d^6 \ ^5D$ in the spectra of Zn vii and Ga viii are given.

C.A. 1975. 83 N2

51226.1314

Ch, Ph, TC

31604

Cu

1975

3542

Wagenaar H.C., De Galan L.

The influence of line profiles upon
analytical curves for copper and silver
in atomic absorption spectroscopy.

"Spectrochim. acta", 1975, B30, N10-11, 361-381

(АНГА.)

0518 гин

502 502 510

ВИНИТИ

Се

Алмицкий В. В. и др. ⁽¹⁹⁷⁶⁾
(Ряз. ин-т АН УССР,
препринт №9), М. 1976

(спектр,
длины волн)

(см. Ti) III

60609.1352

Ph, TC, MGU

41158

СМ (XXI - XXIII)

1976

* 4-13908

Behring W.E., Cohen Leonard,
Dorschek G.A., Feldman U. Transitions
of Zn XXII, Zn XXIII, Zn XXIV, Ge XXIV,
Ge XXV observed in laser-produced plasmas.
"J. Opt. Soc. Amer.", 1976, 66, N4, 376-378
(англ.)

0632 лнк

614 618

624

ВИНИТИ

60326.9357

Ph, Ch, TC

40892

Cu (part)

1976

3956

Bonifacic V., Huzinaga S. Atomic
and molecular calculations with the
model potential method. IV. "J. Chem.
Phys.", 1976, 64, N 3, 956-960 (англ.)

0588

564 565

580

ВИНИТИ

60401.3732

Ph, TC, MGU

61102

Cu (смерть
1000-6000 Å)

1976

Х-15-12091

Curtis L. J., Engman B., Martinson I.
Lifetime measurements in Cu I and Cu II.
"Phys. scr.", 1976, 13, N 2, 109-110
(АНГЛ.)

0584 ЗАК

568 570

576

ВИНИТИ

61021.4412

22024

1976

TC, Ph, MGU

Cu (E)

4724

Gáspár R., Szabó J., Szaniszló J.
Variational calculation in the universal
potential field with even-tempe-
red functions. "Acta phys. Acad. sci.
hung.", 1975, 39, N 4, 261-273
(англ.)

0730 нмк

691 695

122

ВИНИТИ

60812.1984

TC, AR, MGU, Ph

Су (II)
96912

1976

4446

k p. N 60812.1801

McNeil J.R., Johnson W.L., Collins
G.J., Persson K.B., Franzen D.L. Laser
action in sputtered metal vapors.

"Opt. Commun", 1976, 18, N. 1, 162-163

(англ.)

067.7 пнк

655 665

0 5 9

ВИНИТИ

60324.8481

Ph, TC, MGU

38706 (Ei)
Cu II (спектр
при излучении 3936
виставка)

1976

McNeill J.R., Collins G.J., Persson
K.B., Franzen D.L. Ultraviolet laser acti-
on from Cu II in the 2500-Å region. "Appl.
Phys. Lett.", 1976, 28, N 4, 207-209 (англ.)

0587 ТММ

559 563 579

ВИНИТИ

1976

Cu (IV)

(Ei)

85: 184281b Revised analysis of the copper (Cu IV) spectrum. Meinders, E. (Zeeman Lab., Univ. Amsterdam, Amsterdam, Neth.). *Physica B + C (Amsterdam)* 1976, 84 B+C(1), 117-32 (Eng). An extensive revision of the anal. of the Cu IV spectrum is presented together with results of parametrical energy level calcs.; configurations considered are $3d^9, 3d^7 4s$ and $3d^7 4p$. The importance of calcd. line strengths is demonstrated. Comparison with earlier published material learns that only 48 out of the 163 old level values hold; 107 new values are given, but levels of $3d^7 5s$ could not be found, so that the old value of the ionization potential must be considered as dubious. Unresolved Zeeman patterns have been obtained at 6.7 tesla; obsd. splittings between σ^+ and σ^- components are compared with calcs.

C.A. 1976. 85 N24

Cu (II)

44 - 17804

1976

(ϵ_i)

85: 168983b. Calculations of configurations of doubly ionized copper (Cu II). Sugar, J.; Martin, W. C. (Inst. Basic Stand., Natl. Bur. Stand., Washington, D. C.). *J. Res. Natl. Bur. Stand., Sect. A* 1976, 80A(3), 465-76 (Eng). The energy levels belonging to the configurations $3d^4s^2$ and $3d^4nl$ ($nl = 4s, 5s, 4p, 5p, 4d, 5d, 4f$, and $5g$) were calcd. The radial energy integrals were treated as parameters and adjusted to give a least-squares fit to the obsd. levels. Two- and three-body effective electrostatic interactions for equiv. electrons were included, as well as 2-body effective interactions for inequiv. electrons. Strong configuration interaction between $3d^4s^2$ and $3d^44d$ was taken into account. Values of the parameters are given for all the above configurations and the calcd. levels are given for all except $3d^44s$ and $3d^44p$ (for which essentially equiv. results have been published). Leading eigenvector percentages are given in appropriate coupling schemes.

C.A. 1976, 85, N22

Cu (V)

* 5 - 16515

1976

6 Д330. Пятый спектр меди: CuV. Van Kleef Th. A. M., Raassen A. J., Joshi Y. M. Fifth spectrum of copper: Cu V. «Physica», 1976, BC84, № 3, 401—416 (англ.)

С помощью 6,6 и 10-м спектрографов скользящего падения и 10-м спектрографа норм. падения изучен спектр иона CuV. Для возбуждения спектра использованы скользящая ($I=1500-4000$ а) и вакуумная искра с электр. поджигом ($C=15$ мкф; $U=9-12$ кв). Измерены длины волн и проведено отождествление 665 линий переходов между конфигурациями $3d^7-3d^64p$ (268—413 Å) и 500 линий перехода $3d^64s-3d^64p$ (1097—1330 Å). На основании измерений вычислены энергии всех 18 уровней $3d^7$ -конфигурации, 53 уровней (из 63) $3d^64s$ -конфигурации и 175 уровней (из 180) $3d^64p$ -конфигурации. Приводятся величины атомных параметров исследованных конфигураций, полученные с помощью полуэмпирич. расчета, а также коэф. разложения волн. ф-ций состояний в LS-базисе. Библ. 15.
К. Н. К.

у; εi

ф. 1977
н 6

Cu (V)

* 16515

1976

(E_i)

. 86: 81164g Fifth spectrum of copper: copper(Cu v). Van Kleef, T. A. M.; Raassen, A. J. J.; Joshi, V. N. (Zeeman-Lab., Univ. Amsterdam, Amsterdam, Neth.). *Physica B + C (Amsterdam)* 1976, 84 B+C(3), 401-16 (Eng). The anal. of the Cu v spectrum is considerably extended on the basis of new observations on the 6.650 m normal and the 6.600 m grazing incidence spectrographs at the Zeeman-Laboratorium in Amsterdam and on the 10.7 m normal and grazing incidence spectrographs at the National Bureau of Stds. Laboratory in Washington D.C. The sources used were a sliding spark and a triggered spark. All levels of the $3d^7$ configuration are located; 53 out of 63 levels of the $3d^64s$ configuration are detd. and 175 out of 180 levels of the $3d^64p$ configuration are established. Parametric calens. of the energy level values agree very well with the exptl. values. Tables of the 1165 classified lines, the energy levels and the values of the parameters of the configurations mentioned above are given.

C.A. 1977 86 N12

61111.2438

Ph, Ch, TC

43929 / 1976
лет. 1976

См(I)

4-15245

Zhechev D., Dyulgerova R., Ange-
lova R. Radial inhomogeneities in exci-
tation and profile of copper lines in
hollow cathode discharge. "Spectrosc.
Lett.", 1976, 9, N 7, 401-410 (англ.)

0741 пжк

716 729

1976

ВИНИТИ

1974

Cu - clagep

87: 191825b A copper vapor laser operating at room temperature. Andrews, A. J.; Webb, C. E.; Tobin, R. C.; Denning, R. G. (Clarendon Lab., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Opt. Commun.* 1977, 22(3), 272-4 (Eng). Laser action on the 5106 and 5782 Å lines of neutral Cu was achieved at temps. from 20-140 in the vapor of Cu acetylacetonate, and at temps. between 150-215° in the vapor of Cu nitrate. The peak output powers were compared with those obtained in the vapors of CuCl, CuBr and CuI using the same longitudinal discharge operated in a double-pulse mode in low pressure Ar. The highest peak power from Cu acetylacetonate obtained was 5 kW at 40°. The optimum temp. for the nitrate was 180° at which the peak output power is 20 kW. The halides gave pulses of 50 kW although the temps. required were much higher. For the acetylacetonate and the nitrate it was necessary to purge the gas mixt. of dissocn. products by flowing the Ar through the discharge tube. The resulting redn. in Cu d. was partly responsible for the poorer performance obsd. to date with these vapors. Optimum Ar pressures and delay times between the 2 pulses of discharge current were approx. the same for all the Cu compds. tested.

C.A. 1974, 27, 1211

Cu

Drumstick 5412

1977

Battye, F. L., et al.

grossi.
cucurp

J. Physic, 1977,

B27, 209-214

Cu

omnua 5587

1977

Caroli S., Milazzo G.
Benincasa M.

muscuu
enep

Spectros. Lett., 1977,
2, (10), 655 - 76.

Cu

ommuck 19 bnanke Broida H.
~~1977~~

Eversol J.D., Broida H.P.

critter.
enerip. Phys. Rev., 1977, B15 (4),
1644-1655

Size and shape effects in light
scattering from Ag, Cu, Au particles

1977

Cu

Ag

Au

10 Д436. Анализ влияния матрицы на оптические спектры изолированных атомов благородных металлов. Forstmann F., Kolb D. M., Leutloff D., Schulze W. Analysis of the matrix induced changes in the optical spectra of matrix isolated noble metal atoms. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 7, 2806—2813 (англ.)

Получены спектры поглощения (3,6—5,5 эв) атомов Cu, Ag и Au, изолированных в матрицах из Ar, Kr либо Xe при T -рах 3—60° K. Рассмотрена зависимость сдвигов максимумов переходов $nP \leftarrow nS$ от T -ры; доказана их обратимость при отжиге матрицы. Предложено отнесение оптич. переходов атомов металла в кристаллич. поле матрицы. Использована модель, в которой атомы матрицы рассматриваются как облако отрицат. заряда, создающее потенциал отталкивания, взаимодействующий с внешними электронами захваченного в матричную ячейку металл. атома. Обсуждено влияние матрицы на относит. сдвиги уровней, спин-орбитальное расщепление и расщепление кристаллич. поля. Библ. 30. С. Ф. Б.

спектры
поглощения,
в матрице

ф. 1977 № 10

(+2) D

Cu (4^2s-4^2p)

1977

Kerriou A., et al.

C. r. Acad. Sci., 1977,
284, N 11, B209-12.

(during
workouts.)



(cu. Cu + Ca; III)

Cu⁻

[Omn 5319]

1977

Read F. H.

(ab. mex.
parent.)

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys. 1977, 10, 14,
449-58.

1974

Cu

May 6p

88: 43551q CW copper(Cu II) laser in a hollow anode-cathode discharge. Rozsa, K.; Janossy, M.; Scillag, L.; Bergou, J. (Cent. Res. Inst. Phys., Budapest, Hung.). *Opt. Commun.* 1977, 23(2), 162-4 (Eng). Continuous-wave laser operation on near IR transitions of Cu II was investigated in a high voltage hollow cathode discharge tube of 19 cm active length. The high voltage was obtained by a special anode system placed inside the cathode. Threshold current for the strongest 7808 Å laser line was 0.4 A. At a discharge current of 2.4 A a multiline output power of 30 mW was obtained on 6 transitions between 7404-7896 Å.

C.A., 1978, SL, N 6

Си

1977

8 Д558. Измерение абсолютных заселенностей возбужденных состояний атомов меди в сильноточном разряде с полым катодом. Суханова Г. Б., Семенова О. П. «Изв. высш. учеб. заведений. Физика», 1977, № 2, 35—40

Определены абс. заселенности 22 возбужденных состояний атомов Си в плазме полого катода в широком интервале разрядных токов (0,05—1,2 а) с катодами различной длины (2, 5, 10 см). Подтвержден ранее обнаруженный вывод, что заселенности смещенных состояний меди на 1—2 порядка выше заселенности обычных состояний с приблизительно равными энергиями возбуждения. С ростом тока различие в заселенностях обычных и смещенных состояний меди уменьшается. Заселение смещенных состояний в основном происходит за счет процессов рекомбинации ионов Си в метастабильных состояниях 3D и 1D , образуемых в результате переходов с верхних уровней непосредственно или через промеж. состояния.

заселен.
уровней

ф. 1977
№ 8

Cu

3 Д243. Таблицы спектральных линий Cu, излучаемых полым катодом. Caroli S., Milazzo G., Benincasa M., Alvarez-Herrero C. Hollow-cathode emission spectral tables of Cu. «Opt. pura y apl.», 1978, 11, № 1, 19—28 (англ., рез. исп.)

При тех же эксперим. условиях (см. реф. 3Д242) выполнены исследования спектров Cu.

таблица
спектр. линий

Ф.1979, N3

1978

Cu

таблицы
спектр
испуск.

N 92: 85308d Hollow cathode emission spectral tables of copper. Caroli, S.; Milazzo, G.; Benincasa, M.; Alvarez-Herrero, C. (Spain). *Opt. Pura Apl.* 1978, 11(1), 19-28 (Eng). Hollow-cathode emission spectra of Cu were photographed in the range 200-430 nm to prep. an atlas. An Eagle-mounting spectrograph equipped with a hollow-cathode lamp and a concave grating was employed. The discharge occurred at 100 mA and $V = 250$ V under an atm. of purified He at ~ 12 torr. The concave grating used in the range 200-300 nm had 2400 grooves per mm, whereas from 300 to 430 nm another grating was chosen having 1200 grooves per mm. The final prints show a dispersion varying between 0.724 nm.cm^{-1} at 200 nm, and 0.732 nm.cm^{-1} at 430 nm. Both 3 and 9 h exposure times were chosen, so that the final tables present stripes with less and more intense spectral lines. Times > 9 h were not necessary since no new lines were found. The spectral tables thus arranged will furnish a useful tool for the identification of hollow-cathode emitted spectra.

CA 1980 92 N10

1978

Cu

CuO

Kb. sec.

fact.

(+1)

□

C.A., 1979, 90, N26

90: 0443f A pseudopotential calculation of the bonding of copper in copper dimer and cuprous chloride. Dixon, R. N.; Robertson, I. L. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Mol. Phys.* 1978, 36(4), 1099-112 (Eng). Ab initio pseudopotential calcs. were performed for Cu₂ and CuCl mols. The results are similar to those of all-electron calcs. and of expt. The role played by Cu 3d orbitals in bond formation was detd. Both SCF and CI wave functions were used, enabling the effects of core-core overlap on the core-core interaction to be studied.

Си

1978

10 Д281. Определение методом атомной абсорбционной спектроскопии относительных сил осцилляторов резонансных линий меди. Hannaford P., McDonald D. C. Determination of relative oscillator strengths

of the copper resonance lines by atomic absorption spectroscopy. «J. Phys.», 1978, B11, № 7, 1177—1191 (англ.)

относит.
сила
осцилл.

Путем атомных абсорбционных измерений излучения от лампы с полым Си-катодом исследованы относит. силы осцилляторов одиннадцати резонансных линий Си, возбужденные уровни которых принадлежат конфигурациям $3d^94s4p$, $3d^{10}4p$ и $3d^{10}5p$. Измерения выполнены с учетом различий сверхтонкой структуры линий. Впервые получены надежные значения для линий 202,4 и 236,3 нм. Благодаря исключительно широкому интервалу сил осцилляторов ($f \sim 0,0001—0,4$) Си является потенциально пригодным элементом для использования в качестве внутреннего стандарта в химич. анализах, позволяющего определять конц-ию атомов меди в большом интервале плотностей. Библ. 45.

А. Н. Рябцев

ФР, 1978, N10

Cu

common 6287 1978

anomalous.

~~Greenberg~~

Romano M, et al.

J. Electr. Spectrosc.
and Relat. Phenom;
1978, 13, 229-42

Оттиски 4117

1979

Cu

Ag

Au

спектр.
показатель
в матрице(42) 

ок. 1979, N12

12 B175. Спектры поглощения атомов благородных металлов в молекулярных матрицах. Abe H., Schulze W., Kolb D. M. Absorption spectra of noble metal atoms isolated in molecular matrices. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 60, № 2, 208—211 (англ.)

Измерены электронные спектры поглощения (3,6—5,5 эв) атомов Cu, Ag и Au в тв. молек. матрицах H₂, D₂ и CH₄. Полученные спектры сопоставлены с лит. данными для этих же атомов в тв. матрицах инертных газов. В молек. матрицах по сравнению с матрицами инертных газов обнаружено необычно большое расщепление атомного уровня $nP_{3/2}$ в крист. поле. Показано, что в CH₄-матрице аналогично. Не-матрице атомы занимают два различных места в крист. решетке, а в H₂, D₂ и N₂ матрицах существует только одно стабильное положение. Обсуждены отдельные различия, обнаруженные в спектрах H₂ и D₂ матриц.

О. Г. Гаркуша

Cu

ommuek 8461

1979

Brandas L.

Rev. Coun. Phys.,
1979, 04 24, (6), p. 559-60.

(Y)

1979

Cu

91: 184222g The normal spectral emissivity measurements on liquid copper. Dokko, Won; Bautista, Renato G. (Dep. Chem. Eng., Iowa State Univ., Ames, IA 50011 USA). *Metall. Trans., B* 1979, 10B(3), 459-3 (Eng). The normal spectral emissivity of liq. Cu was detd. as a const. $\epsilon_{\lambda} = 0.112 \pm 0.005$ at $\lambda = 0.615 \mu$ in the temp. range 1376-1687 K. The ϵ_{λ} values of liq. Cu with graphite crucibles (1376-1681 K) and Ta crucibles (1433-1687 K) averaged 0.1108 ± 0.0047 and 0.1123 ± 0.0059 , resp. Several precautions were taken to minimize errors.

neglected.

C.A. 1979, 21, 122



C.A. 1979, 21, 122

Ca (II)

1949

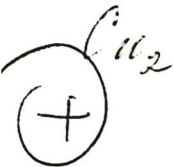
Leis F., et al.

интервью.
опер.
интервью

"Spectrochim. acta" 1949,
B33, N10-12, 727-40

ср. Mr (I) - III

1979



Методом
Клейна

21 Б176. Факторы Франка — Кондона, r -центроиды и истинные потенциальные кривые комбинирующих состояний $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ -перехода молекулы $^{63}\text{Cu}_2$.
Смирнов А. Д., Кузьменко Н. Е., Кузьяков Ю. Я. «Оптика и спектроскопия», 1979, 47, № 2, 261—265

Методом РКР в варианте Клейна — Данхема впервые рассчитаны потенциальные кривые $B^1\Sigma_u^+$ и $X^1\Sigma_g^+$ -состояний, факторы Франка — Кондона и r -центроиды для $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ электронного перехода ($v'=0-10$, $v''=0-17$) молекулы $^{63}\text{Cu}_2$.

Резюме

21.1979.121

lie

1980

Mitchell R. J.

(y)

Phys. scr., 1980, 21, 21,
98-100

see Cr i III

1980

Cu

Ag

Au

✓ 94: 55014d The influence of a rare-gas matrix on the electronic levels of isolated atoms. Forstmann, Frank; Ossicini, Stefano (Inst. Theor. Festkoerperphys., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(12), 5997-6002 (Eng). A pseudopotential model is suggested for the calcn. of the matrix perturbation on the spectra of isolated atoms. The calcd. shifts of the ground state and of the excited state have different signs. The energy of the outer electron of the isolated atom is lowered in the substitutional site. A blue shift for the $P \leftarrow S$ absorption lines of the right magnitude is calcd. for Cu, Ag, and Au atoms on substitutional sites in Ar, Kr, and Xe matrixes.

chemp
b. m. f. u. e.

(42) 

C. A. 1981.94.18

Cu (I)

(γ ; ϵ_i)

Ф. 1980
N 11

11 Д223. Спектр поглощения Cu I между 1570 и 2500 Å. Absorption spectrum of Cu I between 1570 Å and 2500 Å. Longmire M. S., Brown C. M., Ginter M. L. «J. Opt. Soc. Amer.», 1980, 70, № 4, 423—429 (англ.)

Во втором и третьем порядках вакуумного спектрографа нормального падения с решеткой радиусом 6,65 м при обратной линейной дисперсии соответственно 0,62 и 0,41 Å/мм изучен спектр поглощения Cu I в области 1570—2500 Å. С неопределенностью $\pm (0,002—0,004)$ Å для резких одиночных линий измерено и классифицировано около 170 спектральных линий. Идентифицированы линии разрешенных дипольных переходов $3d^{10}4s^2S—3d^{10}np^2P$ ($n=5\div57$), $3d^94s^2^2D—3d^{10}np^2P$ ($n=6\div17$) и $3d^94s^2^2D—3d^{10}nf^2F$ ($n=5,8$), электрических квадрупольных переходов $3d^{10}4s^2S—3d^{10}nd^2D$ ($n=4\div8$), а также запрещенных переходов $3d^{10}4s^2S—3d^{10}ns^2S$ ($n=20\div41$). Найден также ряд переходов с уровнями $3d^{10}4s^2S$ и $3d^94s^2^2D$ на возбужденные термы, обозначенные в прежних измерениях как w , x , y и z . Более точное значение ионизационного потенциала Cu I составляет $62\,317,44 \pm \pm 0,10$ см⁻¹. Библ. 14.

А. Н. Рябцев

1980

1980

Cu

93: 57218b Absorption spectrum of copper(Cu I) between 1570 Å and 2500 Å. Longmire, M. S.; Brown, C. M.; Ginter, M. L. (Dep. Phys. Astron., West. Kentucky Univ., Bowling Green, KY 42101 USA). *J. Opt. Soc. Am.* 1980, 70(4), 423-9 (Eng). The high-dispersion absorption spectrum of Cu I is reported for

(y) the 1570-2500 Å re. ion. Observations include the elec. dipole allowed transitions $3d^9 4s^2 S-3d^{10} np^2 P^o$ ($n = 5-57$), $3d^9 4s^2 D-3d^{10} np^2 P^o$ ($n = 6-17$) and $3d^9 4s^2 D-3d^{10} nf^2 F^o$ ($n = 5, 8$), the elec. quadrupole allowed transitions $3d^{10} 4s^2 S-3d^{10} nd^2 D$ ($n = 4-8$), and the forbidden transitions $3d^{10} 4s^2 S-3d^{10} ns^2 S$ ($n = 20-41$). A no. of transitions from $3d^{10} 4s^2 S$ and $3d^9 4s^2 D$ to levels assoc. with excited terms previously designated w , x , y , and z are also reported. An improved ionization potential for Cu I is $62,317.44 \pm 0.10 \text{ cm}^{-1}$.

CA 1980 93 v6

Cu (IV)

Отм. 15347

1980

12 Д283. Расширенный анализ Cu IV: область длин волн 700—1200 Å. Extended analysis of Cu IV: the wavelength region 700—1200 Å. Meinders E., Uijlings P. «Physica», 1980, BC100, № 3, 389—403 (англ.)

(у)

Оснащение 6,65-м вакуумного спектрографа норм. падения излучения голографич. решеткой с 2400 штрих/мм, обладающей большей эффективностью в коротковолн. области, чем при прежних исследованиях Cu IV («Physica», 1976 84C, 117), позволило расширить анализ этого спектра. Опубликована классификация 974 линий Cu IV в области 750—1275 Å. Ряд линий принадлежит переходам между известными уровнями конфигураций $3d^7 4p$ и $3d^7 4s$. Однако большая часть линий

ф. 1980 № 12

(637) соответствует новой классификации переходов $3d^7 5s \rightarrow 3d^7 4p$ и $(3d^7 4d + 3d^6 4s^2) \rightarrow 3d^7 4p$. В результате найдено 27 уровней конфигурации $3d^7 5s$ и 113 — $(3d^7 4d + 3d^6 4s^2)$. Согласно новым измерениям длин волн прежние значения энергий уровней конфигураций $3d^7 4s$ и $3d^7 4p$ следует уменьшить соответственно на 1,7 и 0,3 см^{-1} . Идентификация выполнена с помощью полуэмпирич. расчетов энергий уровней и интенсивностей линий, полученных в промеж. связи с помощью полуэмпирических волн. ф-ций. Экстраполяцией квантового дефекта вдоль серии $3d^7 ns$ ($n=4 \div 5$) получено следующее значение потенциала ионизации Cu IV : $462\,800 \pm \pm 400 \text{ см}^{-1}$.
А. Н. Рябцев

Li

1980

З Б20 Д. Применение квантовомеханических расчетов к молекулам, содержащим атомы тяжелых элементов. Apports au calcul quantique de molécules contenant des atomes lourds. Pelissier Michel. Thèse doct. etat chim. quantique. Univ. Paul Sabatier Toulouse, 1980. Var. pag., ill. (фр.)

Метод псевдопотенциала с учетом релятивистских поправок и конфигурац. взаимодействия применен к расчету атома и двухатомной молекулы меди в валентном приближении.

Е. Л. Р.

расчет

(H) ^XLi₂

X. 1983, 19, N3

Cu(I). Оммука 117021 1980
Roth C.

Эц. Atom. Data and Nucl.
Таблицы Data Tables, 1980, 25(2),
91-184.

Energy Levels for the configurations $(3d+4s)4p$ in the first spectra of the Group
K(I) - Ga(I).

Cu

1981

, 97: 100877n Study of the mean lifetime of some copper and neon atomic lines. Abd El-Rahman, A. N.; Abdalla, M. H.; El Ghandour, M. A. (Fac. Sci., Zagazig Univ., Zagazig, Egypt). *Egypt. J. Phys.* 1980 (Pub. 1981). 11(2), 79-82, 1 plate (Eng). The mean lifetime (τ) of 2 at. Cu lines and 9 at. Ne lines was detd. using a hollow cathode lamp. The lamp was fed by rectangular pulses of duration 10^{-6} s with repetition 10^4 cps. The measured (τ) was within the range of microseconds. The effects of the supply current on (τ) as a major factor of perturbation was studied. A variety of sources or even a variety of excitation conditions of the same source lead to different values of (τ).

T



Ne

Q.A. 1982, 97, N/2

Cu

1981

4 Д416. Исследование среднего времени жизни некоторых атомных линий меди и неона. Study of the mean life-time of some copper and neon atomic lines. Abdel Rahman A. N., Abdallah M. H., Chandour M. A. El. «Egypt. J. Phys.», 1980 (1981), 11, № 2, 79—82 (англ.; рез. араб.)

Определены средние времена жизни 2 линий Cu и 9 линий Ne с помощью лампы с полым катодом (ЛПК). Медная ЛПК, наполненная Ne, возбуждается электрич. импульсами прямоугольной формы длительностью 10^{-6} с с частотой повторения 10^4 Гц. Излучаемый свет после монохроматора регистрируется фотоумножителем и далее осциллографом. Форма сигнала на его экране фиксируется фотокамерой. Время жизни определено по зависимости интенсивности этого сигнала от времени. Исследовано влияние на время жизни основного фактора — тока разряда. Показано, что смена источника или даже изменение условий возбуждения в том же источнике приводит к различным значениям среднего времени жизни.

Г. И. Беков

2;



Ф. 1983, 18, №4.

Сс

Chickov B. N., et al. ¹⁹⁸¹

Кб. ссх.
рр ссх.
Гмх

Phys. scr., 1981, 23,
N6, 1055 - 1065.

(ср. Li ; III)

Одесская 11709

1981

Ca(XVIII)

Curtis L. J., Ramanujam
P. S.

расши-
ренное
структу-
ры,
(J).

Phys. Scr., 1981, 23,
1043 - 1046.

Cu (II)

Om. 12609

1981

fmn

96: 69070q Coulomb approximation calculations of transition probabilities in the transition array $3d^9 4d-3d^9 4f$ in copper(1+). Goldsmith, S.; Boxman, R. L. (Dep. Phys. Astron., Tel-Aviv Univ., Tel Aviv-Jaffa, Israel). *J. Phys. B* 1981, 14(17), 3031-6 (Eng). The Coulomb approxn. was used to calc. abs. transition probabilities of the spectral lines in the transition array $3d^9 4d-3d^9 4f$ of Cu-II. The line strengths of the relevant spectral transitions were calcd. in an intermediate coupling scheme based on a parametric study of the corresponding electron configurations. Transition probabilities of 43 lines which are greater than 10^7 s^{-1} are given.

C.A. 1982, 96, N 8

Cu

отт. 12997

1981

5 Д442. Видимые и УФ-спектры атомов Cu, изолированных в различных матрицах. The UV-visible spectra of copper atoms isolated in various matrices. Moskovits M., Hulse J. E. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 20, 2904—2912 (англ.)

спектр

В видимой и УФ-областях получены спектры поглощения атомов Cu, изолированных в твердых матрицах (в аргоне, азоте и различных алканах) при т-ре. 12 К. Триплетная структура переходов $^2S \rightarrow ^2P$ отнесена к динамич. эффекту Яна—Теллера в кубооктаэдрич. молекуле типа эксиплекса $CuAg_{12}$ (симметрия O_h). Интенсивное поглощение в области ~ 206 нм приписано переходу в состояние $(3d^{10}5p)^2P$ которое является первым членом ридберговской серии. Соответствующий терм сдвинут в сторону малых значений полной энергии вследствие взаимодействия с зоной проводимости матрицы. Обсуждена относит. эффективность изоляции атомов Cu в различных матрицах. Библ. 38. М. Т.

Ф. 1982, 18, № 5.

Cu

CuAr₁₂

CuAr₁₂
in matrix

(+) Δ

C. A. 1981, 95, N16.

[Omm. 1299Z] 1981

95: 141058y The UV-visible spectra of copper atoms isolated in various matrixes. Moskovits, M.; Hulse, J. E. (Erindale Coll., Univ. Toronto, Toronto, ON Can. M5S 1A1). *J. Phys. Chem.* 1981, 85(20), 2904-12 (Eng). The UV-visible absorption spectra of Cu atoms isolated in solid alkane and N₂ matrixes are presented. The triplet structure of the $2P \leftarrow 2S$ absorption is attributed to a dynamic Jahn-Teller effect in the cubooctahedral (O_h), exciplex-like CuAr₁₂ local mol. This explains the triplet structure as well as its temp. dependence in the rare-gas matrixes. The behavior of this triplet with increasing chain length mimics that obsd. for Cu in Ar with increasing temp. This is attributed to an increase in the Jahn-Teller stabilization energy resulting from a nonspecific interaction between the Cu atom and the alkene carbons which become increasingly more tightly packed about the Cu with increasing alkane chain length. A ground-state static distortion is unlikely as a contributor to the triplet structure. Such a distortion is important, however, in producing the spectrum of Cu isolated in ethane which, after annealing, adopts a noncubic structure.

Cu

1981

fnm;

95:123386z Radiation lifetimes of excited states of copper atoms and ions. Osherovich, A. L.; Plekhotkina, G. L.; Obidin, V. R. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1981, 50(6), 1046-9 (Russ). The radiation lifetimes of excited states of Cu atoms and ions were measured with the use of a multichannel method of delayed coincidence with intersecting at. and electron beams.

C.A. 1981, 95, N 14.

Cu I

1981

Bi, вероятно
переход.

4 Д384. Пучково-пленочная спектроскопия изоэлектронных последовательностей Cu I и Zn I. Beam-foil spectroscopy of the Cu I and Zn I isoelectronic sequences. Pinnington E. H., Bahr J. L., Irwin D. J. G., Kernahan J. A. «Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res.», 1982, 202, № 1—2; Fast Ion Beam Spectrosc. Proc. 6 Int. Conf. Québec, Aug. 17—20, 1981, 67—71 Discuss., 71 (англ.)

Краткий обзор работ по пучково-пленочной спектроскопии, проводимых в Университете штата Альберта (Канада). Обсуждены исследования энергетич. структуры и времени жизни в ионах изоэлектронных последовательностей Cu I и Zn I элементов Ge, As и Se. Найдено 8 новых уровней в ионе As V и 2 — в Se V. Обсуждена надежность идентификации терма 4s4d¹D в ионах изоэлектронной последовательности Zn I, в результате чего дано предварительное отождествление этого уровня в Se V. Приведены времена жизни уров-

ф. 1983, 18, №4.

ней $4p, 4d$ и $5s$ в $\text{Ge IV}—\text{Se VI}$, причем результаты для уровней $4p$ получены с явным учетом эксперим. информации о каскадных переходах $4s—4p$, $4p—5s$ и $4p—4d$. Силы осцилляторов мультиплетов, полученные для перехода $4s—4p$, находятся в хорошем согласии с теоретич. предсказаниями. Приведены также времена жизни для уровней $4s4p^1P^0$, $4p^2^1D_2$, $4s4d^1D_2$ и $4s5s^1S_0$ в ионах $\text{Ge III}—\text{Se V}$ с учетом вклада каскадных переходов в данные для нижнего уровня $4s4p^1P^0$. Согласие с теоретич. значениями удовлетворительно для Ge III и As IV , но для высоких членов серий теоретич. значения сил осцилляторов значительно больше экспериментальных. Обсуждены возможные причины этого рассогласования. Библ. 27. А. Н. Рябцев

Cu

[Ommuck 13007]

1981

Rappe A.K., Smedley T.A.
et al.

Кв. мех.
распредел.

J. Phys. Chem., 1981,
85, N 18, 2607-2611.

1981

Cu

5 Д556. Фотоэмиссионные исследования изолированных в матрице атомов и кластеров меди. Photoemission study of matrix isolated Cu atoms and clusters. Schmeißer D., Jacobi K., Kolb D. M. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 11, 5300—5304 (англ.)

Исследованы He I- и He II-фотоэлектронные спектры атомов и кластеров меди, изолированных в Ag-, Kr- и Xe-матрицах при $T \approx 7$ К. Для атомов Cu во всех матрицах наблюдалась эмиссия с уровней d с максимумом на $\sim 5,1$ эВ ниже E_F , что соответствует релаксационному сдвигу для конечного состояния $3d^{9.4}s^1$ около 1,3 эВ по сравнению с газовой фазой. Положение максимума эмиссионной d -полосы кластеров Cu не зависело от сорта инертного газа и имело значение, промежуточное между энергиями полос одиночных атомов и объемных частиц. Последнее, по мнению авторов, указывает на то,

фото-
электрон.
спектр

(4) $\nearrow$ Cu_n (кластеры)

ф. 1982, 18, 15.

что различие энергий d -полос кластеров и объемных частиц меди сохраняется для кластеров с числом атомов Cu , значительно большим, чем это следует из теоретич. расчетов. Найдено, что np -уровни атомов инертных газов матрицы испытывают заметное влияние со стороны кластеров Cu , что приводит к спектрам, характерным для физических адсорбированных инертных газов.
Библ. 16. С. Литке

Cu

1981

Tatewaki H., et al.

Кв. мех. J. Comput Chem., 1981,
расчёт. 2, N3, 278-286.

(Cu, Cu₂, III)
(см. Метод расчёта ... ; III)

Cu;

1982

(17)

97: 153351t Determination of radiative lifetime of lower resonance states of atoms of the copper subgroup (Cu I, Ag I, Au I). Bezuglov, N. N.; Gorshkov, V. N.; Osherovich, A. L.; Plekhotkina, G. L. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1982, 53(3), 405-10 (Russ). The lifetime of 6 lower resonance levels of Cu I, Ag I and Au I were measured with correction for the effect of capture radiation in the finite vol. of a directed beam. The obtained results were compared with radiative times in the conditions of almost full absences of capture radiation.

(12) ☒ Ag, Au

C.A. 1982, 97, N18

Cu⁻

1982

Golding G., Eisen Y.,
et al.

сверхкрит.
парам.,
связь,
теор.
распредел.

Phys. Rev. A 1982, 26(1),
186-198.

(Cu[•] C₃⁺, O⁻; I)

Cu I

[Dm. 15320]

1982

4 Д418. Некоторые времена жизни и вероятности переходов в Cu I. Some lifetimes and transition probabilities in Cu(I). Kono Akihiro, Hattori Shuzo. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1982, 28, № 5, 383—387 (англ.)

Методом задержанных совпадений при импульсном электронном возбуждении паров Cu по линиям в области 2440—3200 Å измерены времена жизни 7 уровней конфигурации $3d^9 4s 4p$ Cu I. Для определения вероятностей переходов в конфигурации $3d^9 4s^2$ и $3d^{10} 4s$ измерены отношения интенсивностей линий, начинающихся на одном и том же верхнем уровне, за исключением нескольких слабых линий. Определенные вероятности переходов имеют значения, меньше, чем они были найдены в прежних экспериментах. Отличие от прежних значений составляет менее двух раз, за исключением нескольких случаев. Поскольку возбуждение паров Cu осуществлено в Ar как буферном газе, найдены также сечения ударного тушения Ar уровней Cu $4s 4p^2 F_{7/2}$, $^4 D_{3/2}$ и $^4 D_{5/2}$. Библ. 19.

А. Н. Рябцев

τ, вероятн.
переход.

Ф. 1988, 18, № 4

Cu

10m. 15320

1982

97: 226248b Some lifetimes and transition probabilities in copper(Cu I). Kono, Akihiro; Hattori, Shuzo (Dep. Electron., Nagoya Univ., Nagoya, Japan 464). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1982, 28(5), 383-7 (Eng). Radiative lifetimes of 7 levels in the Cu I $3d^9 4s4p$ configuration were measured using a delayed coincidence technique; Cu vapor was excited in an Ar buffer gas and cross sections for collisional destruction of Cu levels by Ar were also obtained. Transition probabilities of the lines originating from these levels were detd. using the measured lifetimes and branching ratios.

film;

C.A. 1982, 97, N 26

Cu II

1982

96: 225780m Lifetimes and transition probabilities in copper(Cu II). Kono, Akihiro; Hattori, Shuzo (Dep. Electron., Nagoya Univ., Nagoya, Japan 464). *J. Opt. Soc. Am.* 1982, 72(5), 601-5 (Eng). Radiative lifetimes of some of the levels in the Cu II $3d^94p$ and $3d^95s$ configurations were measured to accuracies of 10-20% by using a delayed-coincidence technique. Relative line strengths for the $3d^94s-3d^94p$ and $3d^94p-3d^95s$ arrays were detd. both theor. and exptl. The theor. line strengths were based on intermediate-coupling calcs., and the exptl. ones were based on branching-ratio measurements and the *J*-file sum rule. Good agreement between the 2 sets of values was obtained; agreement was more satisfactory for the $4s-4p$ array than for the $4p-5s$ array. The exptl. line strengths were estd. to be accurate to 10% for the $4s-4p$ array and to 30% for the $4p-5s$ array. Transition probabilities were detd. by normalizing the exptl. line strengths to an abs. scale by using the measured lifetimes.

fmn

C. A. 1982, 96, N 26.

Cu II

1982

11 Д409. Времена жизни и вероятности переходов в Cu II. Lifetimes and transition probabilities in Cu II. Kono Akihiro, Hattori Shuzo. «J. Opt. Soc. Amer.», 1982, 72, № 5, 601—605 (англ.)

Методом задержанных совпадений при импульсном электрич. возбуждении паров меди в лампе полого катода с погрешностью 10—20% измерены радиационные времена жизни четырех уровней конфигурации $3d^9 4p$ и одного уровня $3d^9 5s \ ^1D_2$. Как экспериментально, так и теоретически определены относит. силы осцилляторов переходов $3d^9 4s \rightarrow 3d^9 4p$ и $3d^9 4p \rightarrow 3d^9 5s$. Теоретич. силы осцилляторов получены в промеж. связи с волн. ф-циями, найденными полуэмпирич. методом по известным уровням энергии. Эксперим. силы осцилляторов определены с помощью измерений коэф. ветвления излучения и правила сумм для уровней с одним главным квантовым числом J . Получено хорошее согласие расчета и эксперимента, причем лучшее для переходов $4s \rightarrow 4p$, чем для $4p \rightarrow 5s$. Определены также абс. вероятности переходов путем нормализации эксперим. сил линий в абс. шкале с использованием измеренных времен жизни. Библ. 14.

А. Н. Рябцев

вероятн.
переходов,
L

сп. 1982, 18,
11/11

Cu

1982

Messmer R.P., Ca-
ves T.C., Kao C.H.

onpage-
rue

Chem. Phys. Lett.,

7;

1982, 90, N4, 296-300.

( Cu; Ni ; III)

Cu

1982

1 2 Д36. Поляризация остова, релаксация и релятивистские эффекты в первых ионизационных последовательностях Cu, Ag и Au. Core polarization, relaxation, and relativistic effects in the first ionization potentials for some systems in Cu, Ag, and Au isoelectronic sequences. Migdalek J., Baylis W. E. «Can. J. Phys.», 1982, 60, № 9, 1317—1322 (англ.; рез. фр.)

г.

(72) ☒

гг. 1983, 18, № 2

Cu

[Ommuck 14514] 1982

Ossicini S., Forstmann
F.,

спектр
в
матрице

Inorg. Chem., 1982, 21,
N 5, 1755-1757.

Cu

отт. 13824 1982

16 Б142. Спектроскопия флуоресценции и фотопроцессы Cu и Cu₂ в матрицах инертных газов.. Ozin Geoffrey A., Mitchell Steven A., Garcia-Prieto J. Fluorescence spectroscopy and photoprocesses of Cu and Cu₂ in rare gas matrices. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 4, 473—479 (англ.)

Спектр

В УФ- и видимой области исследованы спектры поглощения, возбуждения и флуоресценции атомов и молекул меди изолированных в Ag, Kr и Xe матрицах. В спектре поглощения наблюдались атомные линии в области ~300 нм (переходы $(4p)^2P_{1/2,3/2} \rightarrow (4s)^2S$), ~240 нм и ~215 нм, ряд полос Cu₂ в области 220—420 нм. В спектре испускания атомов при возбуждении в области $^2P \rightarrow ^2S$ перехода наблюдались линии относенные к запрещенному переходу $^2D_{3/2,5/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$ (740 и 870 нм). В спектрах испускания Cu₂ наблюдались две системы полос связанные с A—X и B—X



X. 1982, 19, N 16.

переходами. Обсуждены процессы безызлучательной релаксации и фотоиндуцированной диффузии атомов и их агрегации, приведены схемы процессов образования, возбуждения, диссоциации молекул Cu_2 . В. М. Ковба

Cu

Отт. 13824

1982

8 Д827. Флуоресцентная спектроскопия и фотопроцессы Cu и Cu₂ в матрицах инертных газов. Fluorescence spectroscopy and photoprocesses of Cu and Cu₂ in rare gas matrices. Ozin Geoffrey A., Mitchell Steven A., Garcia-Prieto J. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 4, 473—479 (англ.)

В области 200—900 нм получены спектры поглощения и флуоресценции атомов Cu и молекул Cu₂, внедренных в матрицы Ag, Kr и Xe при 12 К. Дана идентификация отдельных электронных переходов в этих спектрах. Переходы в излучении атомов Cu отнесены к переходам $^2D_{3/2, 5/2} \rightarrow ^2S_{1/2}$. Рассмотрены вопросы фотоиндуцированной диффузии и агрегации атомов Cu в матрицах инертных газов. Основные поглощательные и излучательные свойства молекул Cu₂ обсуждены в предположении наличия у Cu₂ электронных переходов $A \leftrightarrow X$ и $B \leftrightarrow X$.

⊠
(+3)

сп. 1982, 18, № 8.

Cu₂, Ag, Ag₂

м-п;

При возбуждении Cu_2 зарегистрировано свечение атомов Cu (переход $^2D \rightarrow ^2S$). Представлен механизм процесса фотодиссоциации Cu_2 , включающий взаимодействие Cu_2 (в основном и возбужденном состояниях) и матрицы. Полученные эксперим. результаты сравнены с данными предыдущих аналогичных исследований с атомами Ag и молекулами Ag_2 в матрицах инертных газов. Биол. 26. Т. А. Ш.



Cu (I)

1982

(2)

98: 24977y Beam-foil spectroscopy of the copper(Cu I) and zinc(Zn I) isoelectronic sequences. Pinnington, E. H.; Bahr, J. L.; Irwin, D. J. G.; Kernahan, J. A. (Phys. Dep., Univ. Alberta, Edmonton, AB Can. T6G 2J1). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* 1982, 202(1-2), 67-71 (Eng). A summary is presented of recent investigations of the Cu I and Zn I isoelectronic sequences. A discussion is given of the $4s4d\ ^1D$ term, with a provisional energy assignment being made for Se V. Two other Se V terms and 5 As V terms are also assigned. Lifetimes are presented for the $4p$, $4d$ and $5s$ levels of the Ge IV, As V and Se VI members of the Cu I sequence, the $4p$ results being obtained from ANDC analyses using decay curve data for the $4s-4p$, $4p-5s$ and $4p-4d$ transitions. The multiplet f -values derived for the $4s-4p$ transition are in excellent agreement with theor. predictions. Lifetimes are also given for the $4s4p\ ^1P^0$, $4p^2\ ^1D_2$, $4s4d\ ^1D_2$ and $4s5s\ ^1S_0$ levels of the Ge III, As IV and Se V members of the Zn I sequence, the $4s4p\ ^1P^0$ results again coming from ANDC or constrained-fitting analyses. The agreement with theor. values here is good up to As IV, but for higher series members the theor. f -values are significantly higher than the exptl. values. Possible reasons for this discrepancy are discussed.

(4) $\boxtimes$

C.A. 1983, 98, N4.

Zn (I)

Li

1982

Richtemeier S.C., Eades

R. A. et al.

Metal Bond. and Interact

Электро-
маг

High Temp. Syst. Emphasis

Alkali Metals. Symp. 181st.

Симпозиум

Meet. Amer. Chem. Soc., At-
lanta, Ga, March 31-Apr 3,

1981. Washington, D.C.,

1982, 177-205. (Cu. Li; III)

Cu

[Ommuck 13865]

1982

Sakai Y., Huzinaga S.,

Кв. мех. J. Chem. Phys., 1982,
перем. 76, N5, 2537-2551.

Cu

1982

расчет
возбуж.
состоян.

6 Д18. Квантовые числа и универсальный потенциал Гашпара для возбужденных состояний. Петкявичюс И. Ю., Глембоцкий И. И. «Лит. физ. сб.», 1982, 22, № 1, 24—28 (рез. лит., англ.)

Рассматриваются возможности применения модифицированного метода ВКБ, в котором применяется универсальный потенциал Гашпара для исследования возбужденных состояний атома. Расчеты проводятся с четырьмя модификациями универсального потенциала для разных возбужденных состояний внешнего электрона атомов Cu и Ag.

Резюме

Δ
(H) Ag



Ф. 1982, 18, № 6.

Ли

Оттиск 15576

1982

Г

Веролайнен Я.Ф.;
Ялехоткина Г.Л. и др.

Оптика и спектроскопия,
1982, 53, №6, 981-984.

U₂

1982

Zerlingue Kyle, Einampour
Jalal Shakhs., et al.

Metal Bond. and Interact.

чектуп

ногдоушен

High Temp. Syst. Emphasis

Alkali Metals. Symp. 181 Meet.

Amer. Chem. Soc., Atlanta Ga

March 31 - Apr. 3, 1981. Washin

gton, D.C., 1982, 229-238.

(see. Pb ; III)

Cu^+

1983

Mannaford P.,
Lowe R.W.

вероят-
ностный
перехода

Opt. Eng., 1983, 22,
N5, 532-544.

(См. $\mathbb{Z}_2$; III)

Cu(I)

1983

Mannaford P., Lowe R.
M.

(T)

Opt. Eng. 1983, 22(5);
532-544.

(see. Ar(I); III)

Cu

[Om. 16270]

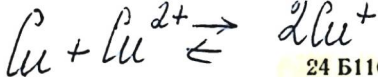
1983

98:62516e The d $\rightarrow$ p spectra of matrix-isolated copper atoms: an MCD and synchrotron radiation absorption study. Hormes, J.; Grinter, R.; Breithaupt, B.; Kolb, D. M. (Physikal. Inst., Univ. Bonn, D 5300 Bonn, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(1), 158-66 (Eng). The electronic absorption spectra of Cu atoms isolated in Ar, Kr, and Xe matrixes were measured at 3.6-8.6 eV by using a synchrotron radiation source. By correlating the results with gas-phase data, and with the help of magnetic CD measurements and calcs. of energies and intensities, a detailed assignment of the 3d $\rightarrow$ 4p region of the spectra is given. A band at 6.357 eV in the Xe matrix is assigned to the Rydberg 4s $\rightarrow$ 5p transition with a fair degree of confidence, and 2 high-energy bands in the Kr matrix are tentatively assigned to Rydberg 3d $\rightarrow$ 5p transitions. The matrix shifts confirm the view that the principal influence of the matrix is upon the upper orbital involved in the transition. Attention is drawn to the fact that matrix perturbations may increase the no. of observable spectral bands, either by lifting degeneracies or by mixing allowed character into previously forbidden transitions.

Cnemp
&

Mampluse

C.A. 1983, 98, N8.



1983

24 Б1160. Самопроизвольные процессы на металлической поверхности, индуцированные ионами этого металла. IV. Spontaneous processes on metal surface induced by its own metal ions. IV. Lóó P., Farkas J., Kiss L. «Acta chim. hung.», 1983, 112, № 4, 433—444 (англ.)

Электрохимическим методом на медном вращающемся (скорость вращения $225-10,5 \text{ с}^{-1}$) дисковом электроде при потенциалах от $-0,052$ до $-0,022 \text{ В}$ изучена кинетика самопроизвольных процессов, протекающих в атм. азота в системе $Cu-Cu^+-Cu^{2+}$ в р-рах $HClO_4$ ($0,3-3,0 \text{ М}$) и т-рах $20-60^\circ \text{С}$, индуцированных ионами Cu_2^{2+} ($10^{-2}-2,5 \cdot 10^{-2} \text{ М}$). Показано, что в системе протекают след. р-ции: $Cu \rightleftharpoons Cu^+ + e$ (1) и $Cu \rightleftharpoons Cu^{2+} + e$ (2). Найдено, что с ростом конц-ии $HClO_4$ скорости р-ций (СР) (1) и (2) в прямом и обр. направлениях увеличиваются. С увеличением т-ры СР (1) — прямой возрастает, а обрат-

X. 1983, 19, № 24

ный падает, тогда как для р-ции (2) наблюдается обр. зависимость. Отмечается, что равновесие в р-ции (2) сильно сдвинуто в сторону образования Cu^{2+} . Величины констант скорости индивидуальных процессов р-ций (1) и (2), отнесенные к нулевому потенциалу электрода при различных эксперим. условиях табулированы. Определены значения констант равновесия для общего процесса: $\text{Cu} + \text{Cu}^{2+} \rightleftharpoons 2\text{Cu}^+$, к-рые равны $3 \cdot 10^{-4}$ и $5 \cdot 10^{-2}$ моль/м³ при $[\text{HClO}_4] = 3$ М и 20 и 60° С соотв. Полученные результаты сравниваются с лит. данными. Сообщ. III см. Farkas J., Dobos L., Kovács P., Kiss L., «Magy. Kém Foly», 1981, 87, 301; «Acta Chim. Acad. Sci. Hung.», 1981, 108, 125.

К. Фролов



Cu

DM-18494

1983

УФ спектр

матрице

(4) ~~1~~

99: 184361s Copper atoms and copper clusters in solid xenon. Special atom and dimer sites and covalently bound clusters with three to five atoms. Ozin, Geoffrey A.; Mitchell, Steven A.; McIntosh, Douglas F.; Mattar, Saba (Lash Miller Chem. Lab., Univ. Toronto, Toronto, ON Can. M5S 1A1). *J. Phys. Chem.* 1983, 87(23), 4651-65 (Eng). UV-visible absorption, fluorescence emission, and excitation spectra of Cu atoms and Cu₂, Cu₃, Cu₄ and Cu₅ mols. were obtained in solid Xe at 12 K. The spectra for Cu atoms are interpreted in terms of 3 major trapping sites, one of which is denoted Cu'', unique to Xe. This special site is probably a Cu atom in a single substitutional vacancy in Xe which is spatially inaccessible in Ar and Kr. Less constrained di- and trisubstitutional vacancy cluster sites, denoted Cu and Cu', resp., could then explain the occurrence and properties of the remaining primary (blue) and secondary (red) copper atom sites common to Ar, Kr, and Xe matrixes. Aggregation of Cu atoms in Xe give rise to 4 distinct copper dimer mols., 3 of which are unique to Xe, the other being common to Ar, Kr, and Xe. Of the 3 special Cu dimers, 2 are comprised of Cu atoms in nearest-neighbor disubstitutional vacancy sites and are denoted Cu₂' and Cu₂''. The 3rd special dimer in Xe, denoted Cu₂'', arises from the trapping and stabilization of

C: A. 1983, 99, v 22 Cu_n (n=2, 3, 4, 5)

next-nearest-neighbor special Cu atom sites Cu". The special dimers Cu₂' and Cu₂" have no counterparts in solid Ar and Kr. The normal dimer denoted Cu₂ probably occupies a trisubstitutional vacancy cluster site and is found in Ar, Kr, and Xe. Novel spectroscopic, thermal, and photolytic properties for the special copper atom Cu" and dimer Cu₂'/Cu₂" sites in Xe are assocd. with the effects of a tight cage. The photoprocesses of $^2P \leftarrow ^2S$ excited Cu atoms in their various trapping sites in solid Xe are interpreted in terms of forbidden $^2D \rightarrow ^2S$ radiative transitions and nonradiative relaxation processes, the latter channels being pertinent to the phenomenon of photoinduced diffusion and aggregation of Cu atoms in rare gas matrixes. Unusual electronic relaxation processes was also obsd. for Xe-isolated Cu₂, Cu₂', Cu₂", Cu₃, and Cu₄ including photofragmentation and photoisomerization. A discussion of these cluster photoprocesses takes into account the effects of guest-host interactions in the ground and excited states. X α transition energies and available data for (s + p) valence electron tetranuclear clusters favor a tetrahedral over a linear geometry for Cu₄ and Ag₄.

Cu

1983

99: 184362t Novel copper-atom pairs in solid xenon. Ozin, Geoffrey A.; Mitchell, Steven A.; McIntosh, Douglas F.; Mattar, Saba M.; Garcia-Prieto, Jamie (Lash Miller Chem. Lab., Univ. Toronto, Toronto, ON Can. M5S 1A1). *J. Phys. Chem.* 1983, 87(23), 4666-74 (Eng). UV-visible absorption, fluorescence emission, and excitation spectra of Cu atoms in Xe matrixes at 12 K in conjunction with quant. Cu atom concn. studies, besides showing the expected coisolation of Cu atoms and dimers, reveal the existence of a novel, weakly coupled Cu-atom pair, referred to as the "quasi-dimer". This loosely bound species is considered to arise from the trapping and stabilization of Cu atoms in next-nearest-neighbor single substitutional vacancy sites and is unique to solid Xe with no observable counterparts in Ar or Kr matrixes. The quasi Cu dimer is denoted $\text{Cu}_2'''|\text{Xe}|_{20}$ and has D_{4h} site symmetry, in contrast to the normal dicopper mol. with Cu atoms located in nearest-neighbor substitutional vacancy sites, denoted $\text{Cu}_2''|\text{Xe}|_{18}$ and having D_{2h} site symmetry. The quasi Cu dimer can be thermally and photochem.

Yop cncmp
t
mampuse

C.A. 1983, 99, N22

converted to the normal dimer with high selectivity. Kinetic studies for both UV and visible $\text{Cu}_2^{III}[\text{Xe}]_{20} + L\nu' \rightarrow \text{Cu}_2^{II}[\text{Xe}]_{18}$ photoconversions are reported. Interesting photoprocesses of the D_{4h} quasi copper dimer include ${}^1A_{2u} \leftarrow {}^1A_{1g}$, 618-nm (red) and ${}^1E_u \leftarrow {}^1A_{1g}$ 474-nm (blue) absorption, relaxation to the ${}^3B_{2u,3u}$ and ${}^1B_{2u,3u}$ states of the D_{2h} normal Cu dimer, followed by anti-Stokes and Stokes fluorescence from the normal dimer as well as dissociative-cage recombination processes involving ${}^2D + {}^2S$ Cu atom fragments. The implications of the discovery of the quasi-Cu dimer in the rigid and highly polarizable lattice of solid Xe to the wider problem of loosely coupled metal aggregates in spectroscopic, chem., and catalytic investigations of metal clusters in both weak and strong supports is discussed.

Cu

1983

Partridge Harry,
Bauschlicker Charles
(am. nocu., W. Jr., et. al.
I, Ae) J. Chem. Phys., 1983,
79, N4, 1866-1873.
● (cu. Na₂; IV)

Cer

1983

Savin A., Schwerdtfeger
P., et al.

J.

Chem. Phys. Lett., 1983,
98, N 3, 226-228.

(Cer. K; III)

Li.

[Am. 18396]

1983

Stoll H., Fuentealba P.,
et al.,

Ac;

J. Chem. Phys., 1983,
79, N 11, 5532 - 5542.

Li

1983

6 Д33. Силы осцилляторов и длины волн для изоэлектронных последовательностей меди и цинка; Z от 29 до 42. Oscillator strengths and wavelengths for the copper and zinc isoelectronic sequences; $Z=29$ to 42. Victor G. A., Taylor W. R. «Atom. Data and Nucl. Data Tables», 1983, 28, № 1, 107—214 (англ.)

Приведены таблицы сил осцилляторов и энергий (длин волн) электронных переходов в ионах изоэлектронных последовательностей Cu (Cu I—Mo XIV) и Zn (Zn I—Mo XIII), рассчитанных в приближении полуэмпирического модельного основного потенциала. При определении параметров модельных потенциалов использованы теоретич. релятив. значения дипольных поляризуемостей остовов и эксперим. спектры некоторых ионов. Для ионов последовательности Zn учитывалось ограниченное конфигурац. взаимодействие. Наименее надежные результаты относятся к ионам с небольшими значениями зарядов ядер, что связано с пре-

ξ_i , вероятн.
переходов,
сил осцил.

9. 1983, 18, № 6 Zn

небрежением значительными для этих ионов эффектами осовно-валентной корреляции. Найдены силы осцилляторов некоторых переходов из связанных состояний в автоионизационные резонансы. Все результаты относятся к центрам тяжести термов.

А. В. Зайцевский



Cu

1983

uzozneemp.
neg(fmm) $\textcircled{H}$ $\textcircled{N}$ ZnC. A. 1983, 98, N 8.

88: 62288g Oscillator strengths and wavelengths for the copper and zinc isoelectronic sequences; $Z = 29$ to 42. Victor, G. A.; Taylor, W. R. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *At. Data Nucl. Data Tables* 1983, 28(1), 107-214 (Eng). Semiempirical model-potential methods were used to calc. energy levels, wavelengths, and oscillator strengths for the Cu and Zn isoelectronic sequences out to Mo XIV and Mo XIII, resp.

Сс

1983

16 Б193. Взаимодействия атом—матрица: исследование спектров МКД атомов меди в аргоне. Atom—matrix interactions: An MCD study of copper atoms in argon. Zeringue Kyle J., Shakhs Emampour Jalal, Rivoal Jean-Claude, Vala Martin. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 5, 2231—2239 (англ.)

Измерены спектры поглощения в области перехода $2P \rightarrow 2S$ и спектры МКД атомов меди, изолированных в матрицах из Ar (13—25 K). Предложен новый метод определения т-ры матрично-изолированных образцов, основанный на т-рной зависимости отношения 1-го момента МКД к нулевому моменту поглощения для парамагнитных систем. Нижний предел т-ры исследуемых матриц оценен в 12,9 K. Определены спектральные моменты полос (вплоть до 3-го) и рассчитаны параметры β_0/D_0 и C_0/D_0 , описывающие спектр МКД. Проведен анализ расщеплений триплетных полос поглощения и знака терма С, полученного из спектров МКД, в рамках модели статич. тригон. искажения окружения и показано, что эта модель не может достаточно хорошо

ат. пост.,
спектр в
матрице,
V_i, м.п.

X. 1983, 19, N 16

воспроизвести эксперим. результаты. Установлено, что в возбужденном состоянии 2P осуществляется одновременно спин-орбитальное взаимодействие и вибронное ян-теллеровское взаимодействие атомов Си в ячейке с некубич. окружением. Наблюдаемые триплеты в поглощении и МКД интерпретированы в рамках адиабатич. подхода Морана («Phys. Rev.», 1965, A137, 1016). На основании сравнения наблюдаемых контуров с рассчитанными методом Монте-Карло («J. Phys. Soc. Jap.», 1968, 23, 1372) с использованием модели Морана сделан вывод, что компоненты спин-орбитального расщепления возбужденного состояния Си взаимодействуют только с обеими модами (e и t_2) решетки вместе, причем с каждой в примерно равной степени. Уменьшение постоянной спин-орбитального взаимодействия в возбужденном состоянии атомов Си на $\sim 25\%$ по сравнению со значением в газовой фазе обусловлено, как предполагается, взаимодействием $4p$ -орбитали Си с $3p$ -орбиталью Аг.

С. Б. Осин

Cu

1983

98: 151944k Atom-matrix interactions: an MCD study of copper atoms in argon. Zeringue, Kyle J.; Shakhsemampour, Jalal; Rivoal, Jean Claude; Vala, Martin (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(5), 2231-9 (Eng). The absorption and magnetic CD (MCD) spectra of the $2P \leftarrow 2S$ transition of Cu atoms isolated in Ar matrixes were measured over the temp. range 13-25 K. Spectral band moments (up to 3rd order in MCD) were detd. and parameters of interest extd. from them. The obsd. triplet bands' sepn. and MCD C term signs are analyzed assuming a static trigonal site distortion. A static site distortion model is incapable of reproducing the exptl. results. Simultaneous spin orbit and noncubic lattice vibrational couplings (Jahn-Teller effect) are active in the Cu excited $2P$ state. The obsd. triplet of bands and its MCD C terms are satisfactorily described by an adiabatic model developed by P. R. Moran (1965). Comparison of the obsd. band shape to ones calcd. by K. Cho (1968) using Monte Carlo methods show that simultaneous spin-orbit and e and t_2 lattice mode interactions are operative. The obsd. redn. of 25% in the excited state spin-orbit coupling const. is attributed to the overlap of Cu 4p orbitals with the Ar 3p orbitals. A new method for the detn. of the temp. of matrix-isolated samples is described. The temp. dependence of the MCD 1st moment and absorption zeroth moment of a matrix-isolated paramagnetic species is detd. one to find the lowest temp. attainable.

Chem
b

Mampour

C.A. 1983, 98, 18

Cu

[Dm. 18368]

1984

Bauschlicher Ch.W., Jr.,
Walch S.P. et al.,

Ae;

Chem. Phys. Lett., 1984,
103, N 4, 291-295.

1984

Cu

10 Б1027. О сродстве к электрону атома Cu. On the electron affinity of Cu atom. Bauschlicher Jr. Charles W., Partridge Harry, Walch Stephen P. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 103, № 4, 291—295 (англ.)

Методом ССП, многоконфигурац. методом ССП (МКССП) и методом конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитано сродство к электрону (СЭ) атома Cu. Расчеты проводились с использованием различных расширенных базисов гауссовых и слейтеровских функций (ГФ и ОСТ, соотв.). В расширенном базисе ОСТ, с к-рым для иона Cu^- почти достигается хартрифовский предел, учитывались 4f- и 5g-ОСТ. Исследована зависимость СЭ от полноты базисной системы. Для сравнения СЭ рассчитано также численным методом Хартри — Фока. В приближении ССП величина СЭ атома Cu получена близкой к нулю. В приближении МКССП теор. значение СЭ составляет $\approx 0,63$ эВ (эксперим.

Ar;

x. 1984, 19, n10

значение $1,226$ эВ). При более полном учете корреляции СЭ увеличивается; наилучшее теор. значение СЭ составило $1,0$ эВ. Релятивистские поправки к СЭ вычислены в рамках многоконфигурац. метода Дирака—Фока; они привели к уменьшению СЭ на $\sim 0,05$ эВ по отношению к соотв-щему нерелятивистскому значению. И. А. Тополь

Cu

1984

6 Д41. О сродстве атома Cu к электрону. On the electron affinity of Cu atom. ~~B~~auschlicher Charles W. Jr., Walch Stephen P., Partridge Harry. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 103, № 4, 291—295 (англ.)

Сродство к электрону (СЭ) атома Cu в основном состоянии рассчитано при помощи различных вариантов метода конфигурационного взаимодействия с использованием слэтеровских и сгруппированных гауссовых базисных наборов больших размерностей. Подробно исследована зависимость теоретич. значения СЭ от раз-

Ag;

ср. 1984, 18, № 6

мерности и принципа построения пространства конфигураций. При учете возбужденных конфигураций только в пределах валентной оболочки величина СЭ оказывается сильно заниженной (0.73 эВ, эксперим. значение 1,226 эВ). Включение $3d-4s$ -корреляции улучшает оценку СЭ (1,01 эВ). Оставшееся различие между теоретическими и эксперим. величинами не устраняется при добавлении в пространство конфигураций важнейших $3p-4s$ - и $3d-3d$ -возбуждений. Оценка релятив. эффектов в многоконфигурац. приближении Дирака—Фока показала, что их учет несколько уменьшает расчетное СЭ. Установлено, что исключение f -компоненты из орбитального базиса изменяет величину СЭ на 0.08 эВ; гармоники более высоких порядков малосущественны.

А. В. Зайцевский

Cu

1984

/ 100: 91716k On the electron affinity of copper atom, Bauschlicher, Charles W., Jr.; Walch, Stephen P.; Partridge, Harry (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 103(4), 291-5 (Eng). The electron affinity (EA) of the Cu atom is computed by using large STO and GTO basis sets at several levels of correlation. The best computed value is 1.00 eV compared with the exptl. value of 1.226 eV. Relativistic effects slightly decrease the EA.

Ar;

C.A. 1984, 100, N 12

Cu

1984

Grant I.P.

Vac. Ultraviolet Radiat. Phys.,
VUV VII. Proc. 7 Int. Conf.,
Jerusalem, Aug. 8-12, 1983.
Vol. 6. Bristol; Jerusalem,
1984, 83-85.

Рачерм
Еи
Аномов

(cur. Cu; III)

Cu

1984

102: 67659q Calculation of the hyperfine structure of the $4^2S_{1/2}$, $4^2P_{1/2}$, $4^2P_{3/2}$ states in the $3d^{10}nl$ configuration of copper. Heully, J. L. (Dep. Phys., Chalmers Univ. Technol., S-41296 Goeteborg, Swed.). Z. Phys. A 1984, 319(3), 253-9 (Eng). The hyperfine structure of the $4^2S_{1/2}$, $4^2P_{1/2}$, and $4^2P_{3/2}$ states in the $3d^{10}nl$ configuration of Cu was evaluated by using many-body perturbation theory. Polarization effects were included in all orders and correlation to third-order. By the use of iteration methods, a large no. of higher order diagrams were also included. The correlation effects between the valence electron and the $3d$ shell were very important. The results of $A(^2S_{1/2})$ and $A(^2P_{1/2})$ are 5827 MHz and 440 MHz, resp., in good agreement with the exptl. results; whereas, the result for $A(^2P_{3/2}) = 83$ MHz is far from the exptl. value. No explanation was found for the discrepancy. The quadrupole moments were found to be -206 millibarns for ^{63}Cu and -185 millibarns for ^{65}Cu .

сверхтонк.
структ.,
кварупольн.
момент

C.A. 1985, 102, 48

Cu

1984

Robles yuvencio, Bartolotti
Libero J.

Ac, pacrem
y, zuckmpo-
omprugam.

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N13, 3723-
-3727.

● (Cu. Os; III)

Си-лазер

1984

9 Л830. Лазер на парах меди с использованием газофазно-комплексной реакции металлической меди и хлорида алюминия. A copper vapor laser by using vapor-complex reaction of metallic copper and alminum chloride. Saito Hiroshi, Taniguchi Hiroshi, Sakurada Takehumi, Ishikawa Toshiaki. «Бунко кэнкю, J. Spectroscop. Soc. Jap.», 1984, 33, № 6, 391—393 (яп.; рез. англ.)

Исследован температурный режим лазеров на парах металлов. Установлено, что реакции хлоридов металлов (BiCl_3 , AlCl_3) с металлич. медью, приводящие к образованию CuCl , позволяют снизить рабочую т-ру лазерной кюветы до $\approx 180^\circ\text{C}$ и $\sim 90^\circ\text{C}$ соответственно. Проведен масс-спектрометрич. анализ состава газовой среды Си-лазера с добавкой AlCl_3 . Резюме

ср. 1985, 18, № 9

Cu

1984

11 J292. Радиационные времена жизни оптически возбужденных атомов Cu и Au в матрицах благородных газов. Radiate lifetimes of optically excited Cu and Au atoms in rare gas matrices. Schrittenlacher W., Kolb D. M. «Ber. Bunsenges. Phys. Chem.», 1984, 88, № 5, 492—497 (англ.)

Исследована временная зависимость затухания флуоресценции оптически возбужденных атомов Cu и Au, находящихся в матрицах благородных газов. Образцы готовились в сверхвысоком вакууме конденсацией термически испаряемых атомов металла наряду с атомами благородных газов на криповерхность из LiF. Возбуждение проводилось механически прерываемым излучением Хе-лампы. Измерения проводились, главным образом по резонансным линиям Cu и Au. Однако в Cu наблюдались запрещенные в дипольном приближении переходы $^2D \rightarrow ^2S$ (1,6 и 1,4 эВ), а для Cu в неоне имела широкая интенсивная полоса с уровня 4p при 3,55 эВ. В атомах Au впервые наблюдался переход

2,



фр. 1984, 18, n 11

между компонентами тонкой структуры термина 2D . Измерены положения линий, ширина и сдвиг в различных матрицах, а также времена жизни. Для метастабильных состояний $^2D_{3/2,5/2}$ этих атомов последние найдены лежащими в миллисекундном интервале. Для флуоресценции из 2D -состояний Си во всех матрицах, не смотря на тщательный отжиг, наблюдалась сложная кривая затухания флуоресценции. Такой распад объясняется расположением атомов металла на слегка различных местах кристаллич. решетки матрицы, не приводящим к заметному сдвигу энергии переходов. Времена жизни таких атомов оказываются более чувствительными к окружающей матрице, чем энергии переходов. Библ. 18.

А. Н. Рябцев

Cu

1984

Stoll H., Fuentealba P.,
et al.

J. Chem. Phys., 1984,
81, N6, 2732-2736.

Ac;

(c.v. Cu₂; III)

Cu

Om. 18978

1984

meop.
pacrim

Walch S.P., Bauschli-
cher Ch. W., Z.,

Chem. Phys. Lett., 1984,
105, N2, 171-174.

Cu

1984

101: 140251m Relative oscillator strengths of copper lines from hook and emission measurements. Zettl, F.; Neger, T.; Jaeger, H. (Inst. Experimentalphys., Tech. Univ. Graz, A-8010 Graz, Austria). *J. Phys. B* 1984, 17(9), 1755-60 (Eng). By combining results of hook and emission measurements, closed loops for 6 transitions of Cu I in the visible and UV regions could be obtained. A numerical procedure suggested by B. L. Cardon et al. (1979) was applied to give improved relative g_f values for these transitions. Nine further g_f values could be linked to these without making any assumptions on the state of the plasma and yielding a set of 15 relative g_f values altogether. Hook measurements were performed using a wall-stabilized arc and intensity measurements using a hollow-cathode discharge.

(fma)

c.A. 1984, 101, N16

Li

1984

10 Л125. Измерение относительных сил осцилляторов линий CuI по эмиссионному спектру и методом крюков. Relative oscillator strengths of CuI lines from hook and emission measurements. Zettl F., Neger T., Jäger H. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1984, 17, № 9, 1755—1760 (англ.)

При комбинированном применении метода крюков и измерений интенсивностей линий эмиссионного спектра определены относит. силы осцилляторов 6 переходов в атомах CuI в области 280—570 нм. Для возбуждения эмиссионного спектра использовался разряд с полым катодом, регистрация производилась монохроматором с решеткой 2000 штр/мм и линейной дисперсией 0,304 нм/мм в области 510 нм, монохроматор калибровался с помощью разрядной W-лампы. При измерениях методом крюков применялась стабилизированная стен-

Вероятность
перехода

ф. 1984, 18, N 10

ками электрич. дуга в атмосфере аргона с хлором, интерферометр Майкельсона на кварцевой оптике и два спектрографа, регистрирующие крюки отдельно в видимой и УФ-областях спектра. Относит. ошибка измерений $\sim 10-15\%$. Отмечается, что примененный метод не требует знания равновесного состояния плазмы источников. Измерены также силы осцилляторов еще для 9 переходов CuI , однако в данном случае переходы не образуют замкнутую систему, и измеренные значения сил осцилляторов зависят от состояния плазмы. С. Ч.

Cu

1985

12 Л108. Спектры водородоподобных Cu, Zn и Ga.
Spectra of H-like Cu, Zn and Ga. Aglitskiy E. V.,
Antsiferov P. S., Dricker M. N., Mandel-
stam S. L., Panin A. M. «Opt. Commun.», 1985, 55,
№ 2, 97—98 (англ.)

В плазме малоиндуктивной вакуумной искры полу-
чены спектры водородоподобных ионов элементов Cu,
Zn и Ga. Электр. параметры установки: $C=16$ мкФ,
 $U=15$ кВ, $I_{\max}=200$ кА. В связи с малой интен-
сивностью линий в случае галлия использовалась методика
подавления шумов для выделения требуемых линий.
Для всех ионов измерены длины волн линий, содержа-
щих спектрально неразрешенные компоненты резонанс-
ного дублета с относящимися к ним сателлитными ли-
ниями.

А. Н. Рябцев

(Si)

(42) Δ 

Zn, Ga

ф. 1985, 18, N 12.

Cu (II)

1985

Becherescu A.,

Goldstein A., et al.

34. crenop Mem. Sect. Stiint, -
6 crenopuse Akad. Repub. Soc. Rom.
1985. 6 (1), 33-50.

(cer. V (II); -III)

Cu

[Am. 22199]

1985

Jankowski K., Polasik M.

Ac, γ;

J. Phys. B: At. Mol. Phys.
1985, 18, 2133-2146.

Cu⁺

[Om. 22, 199]

1985

Żanowski K., Polasik M.,

J; J. Phys. B: At. Mol. Phys.
1985, 18, 2133-2146.

Св

1985

Камнеравичус А. Ю.

Де;

Литт. приз. сб., 1985,
25, № 3, 12-20.

(св. Ли; III)

Cu

[Om. 22123]

1985

Cina

Msezane A.Z.,
Henry J.W.,

Olisuk-
nemopu
guc
43 23-34p 2p0

Chem. Phys. Lett.,
1985, 119, N 1, 81-84.

cf Pélissier M., Dandey J. P. 1985
et al.
Quantum. Chem.: Challenge
Transit. Metals and Coord.
Chem.: Proc. NATO Adv. Res.
Workshop and 40th Int. Meet.
Soc. Chim. Phys., Strasbourg,
Sept. 16-20, 1985. Dordrecht
e. a., 1986, 37-57. (Chem. Sc; III)

Li

[Dm. 23248]

1985

Селінова О.П., Сухачова П.Б.
и др.,

(fmn)

Ув. вузів. Річ., 1985,
28, N 12, ...

Cu

(Am. 31085)

1985

9 Б1013. Теоретическое исследование низколежащих электронных состояний Cu, Zn и их ионов. Theoretical investigation of the low-lying electronic states of Cu, Zn, and their ions. Sunil K. K., Jordan K. D. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 2, 873—880 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО, многоконфигурац. методом ССП и методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны энергии низколежащих возбужденных состояний и энергии ионизации атомов Cu и Zn, а также сродство к электрону атома Cu. Использованы различные базисные наборы сгруппированных *spdf*-гаус-

Y, Ae

(+3) $\downarrow$ (7) Zn, ион Cu, ион Zn (7, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173, 174, 175, 176, 177, 178, 179, 180, 181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 198, 199, 200, 201, 202, 203, 204, 205, 206, 207, 208, 209, 210, 211, 212, 213, 214, 215, 216, 217, 218, 219, 220, 221, 222, 223, 224, 225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232, 233, 234, 235, 236, 237, 238, 239, 240, 241, 242, 243, 244, 245, 246, 247, 248, 249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256, 257, 258, 259, 260, 261, 262, 263, 264, 265, 266, 267, 268, 269, 270, 271, 272, 273, 274, 275, 276, 277, 278, 279, 280, 281, 282, 283, 284, 285, 286, 287, 288, 289, 290, 291, 292, 293, 294, 295, 296, 297, 298, 299, 300, 301, 302, 303, 304, 305, 306, 307, 308, 309, 310, 311, 312, 313, 314, 315, 316, 317, 318, 319, 320, 321, 322, 323, 324, 325, 326, 327, 328, 329, 330, 331, 332, 333, 334, 335, 336, 337, 338, 339, 340, 341, 342, 343, 344, 345, 346, 347, 348, 349, 350, 351, 352, 353, 354, 355, 356, 357, 358, 359, 360, 361, 362, 363, 364, 365, 366, 367, 368, 369, 370, 371, 372, 373, 374, 375, 376, 377, 378, 379, 380, 381, 382, 383, 384, 385, 386, 387, 388, 389, 390, 391, 392, 393, 394, 395, 396, 397, 398, 399, 400, 401, 402, 403, 404, 405, 406, 407, 408, 409, 410, 411, 412, 413, 414, 415, 416, 417, 418, 419, 420, 421, 422, 423, 424, 425, 426, 427, 428, 429, 430, 431, 432, 433, 434, 435, 436, 437, 438, 439, 440, 441, 442, 443, 444, 445, 446, 447, 448, 449, 450, 451, 452, 453, 454, 455, 456, 457, 458, 459, 460, 461, 462, 463, 464, 465, 466, 467, 468, 469, 470, 471, 472, 473, 474, 475, 476, 477, 478, 479, 480, 481, 482, 483, 484, 485, 486, 487, 488, 489, 490, 491, 492, 493, 494, 495, 496, 497, 498, 499, 500, 501, 502, 503, 504, 505, 506, 507, 508, 509, 510, 511, 512, 513, 514, 515, 516, 517, 518, 519, 520, 521, 522, 523, 524, 525, 526, 527, 528, 529, 530, 531, 532, 533, 534, 535, 536, 537, 538, 539, 540, 541, 542, 543, 544, 545, 546, 547, 548, 549, 550, 551, 552, 553, 554, 555, 556, 557, 558, 559, 560, 561, 562, 563, 564, 565, 566, 567, 568, 569, 570, 571, 572, 573, 574, 575, 576, 577, 578, 579, 580, 581, 582, 583, 584, 585, 586, 587, 588, 589, 590, 591, 592, 593, 594, 595, 596, 597, 598, 599, 600, 601, 602, 603, 604, 605, 606, 607, 608, 609, 610, 611, 612, 613, 614, 615, 616, 617, 618, 619, 620, 621, 622, 623, 624, 625, 626, 627, 628, 629, 630, 631, 632, 633, 634, 635, 636, 637, 638, 639, 640, 641, 642, 643, 644, 645, 646, 647, 648, 649, 650, 651, 652, 653, 654, 655, 656, 657, 658, 659, 660, 661, 662, 663, 664, 665, 666, 667, 668, 669, 670, 671, 672, 673, 674, 675, 676, 677, 678, 679, 680, 681, 682, 683, 684, 685, 686, 687, 688, 689, 690, 691, 692, 693, 694, 695, 696, 697, 698, 699, 700, 701, 702, 703, 704, 705, 706, 707, 708, 709, 710, 711, 712, 713, 714, 715, 716, 717, 718, 719, 720, 721, 722, 723, 724, 725, 726, 727, 728, 729, 730, 731, 732, 733, 734, 735, 736, 737, 738, 739, 740, 741, 742, 743, 744, 745, 746, 747, 748, 749, 750, 751, 752, 753, 754, 755, 756, 757, 758, 759, 760, 761, 762, 763, 764, 765, 766, 767, 768, 769, 770, 771, 772, 773, 774, 775, 776, 777, 778, 779, 780, 781, 782, 783, 784, 785, 786, 787, 788, 789, 790, 791, 792, 793, 794, 795, 796, 797, 798, 799, 800, 801, 802, 803, 804, 805, 806, 807, 808, 809, 810, 811, 812, 813, 814, 815, 816, 817, 818, 819, 820, 821, 822, 823, 824, 825, 826, 827, 828, 829, 830, 831, 832, 833, 834, 835, 836, 837, 838, 839, 840, 841, 842, 843, 844, 845, 846, 847, 848, 849, 850, 851, 852, 853, 854, 855, 856, 857, 858, 859, 860, 861, 862, 863, 864, 865, 866, 867, 868, 869, 870, 871, 872, 873, 874, 875, 876, 877, 878, 879, 880, 881, 882, 883, 884, 885, 886, 887, 888, 889, 890, 891, 892, 893, 894, 895, 896, 897, 898, 899, 900, 901, 902, 903, 904, 905, 906, 907, 908, 909, 910, 911, 912, 913, 914, 915, 916, 917, 918, 919, 920, 921, 922, 923, 924, 925, 926, 927, 928, 929, 930, 931, 932, 933, 934, 935, 936, 937, 938, 939, 940, 941, 942, 943, 944, 945, 946, 947, 948, 949, 950, 951, 952, 953, 954, 955, 956, 957, 958, 959, 960, 961, 962, 963, 964, 965, 966, 967, 968, 969, 970, 971, 972, 973, 974, 975, 976, 977, 978, 979, 980, 981, 982, 983, 984, 985, 986, 987, 988, 989, 990, 991, 992, 993, 994, 995, 996, 997, 998, 999, 1000)

X. 1985, 19, N 19

совых функций, причем основное внимание уделено исследованию влияния базисных функций на рассчитываемые величины. Показано, что *spd*-базис является неадекватным для описания потенциалов ионизации. Существенное улучшение результатов достигается при включении в базис диффузных *f*-функций, тогда как учет локализованных *f*-функций слабо влияет на энергии ионизации и возбуждения. Учет диффузных *f*-орбиталей приводит также к уточнению энергий возбужденных состояний как нейтральных атомов Cu и Zn, так и их катионов. Влияние диффузных орбиталей сильнее для энергий ионизации $d^{10}s \rightarrow d^{10}$, чем для ионизации $d^{10}s^2 \rightarrow d^{10}s$. Учет локализованных *f*-функций оказался существенным для описания вкладов двухэлектронных возбуждений типа d^2-f^2 в энергию корреляции отдельных состояний, в то время как диффузные *f*-функции важны для описания дифференциальной корреляции при электронном возбуждении и ионизации. И. А. Тополь

Номм Cu (Om 31085) 1985

Sunil K.K., Jordan K.D.

теор. J. Chem. Phys., 1985,
репринт. 82, 12, 873-880.

●
(Cu. Cu; III)

Li

1985

10 Д46. Теоретический анализ низколежащих электронных состояний Cu, Zn и их ионов. Theoretical investigation of the low-lying electronic states of Cu, Zn, and their ions. Sunil K. K., Jordan K. D. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 2, 873—880 (англ.)

Неэмпирически исследованы основные возбужденные состояния Cu и Zn и их потенциалы ионизации. Рассчитано электронное сродство в Cu. Анализ проводится методом Хартри — Фока с помощью гауссовских орбиталей. Обсуждается вопрос о выборе сокращенного базиса и проводятся проверки возможности замены ряда локализованных орбиталей на одну диффузную. Параметры в последних оптимизируются с помощью двух различных процедур по учету конфигурац. взаимодействия. Приводятся таблицы энергий возбуждения и потенциалов ионизации для большого числа электронных и зарядовых состояний Cu и Zn и анализируются вклады корреляции различных конфигураций в эти характеристики. Сделан вывод о возможности сокращенного учета f-орбиталей с помощью одной диффузной ф-ции и малой роли корреляций для ряда конфигураций.

А. В. Богданов

у, &,"

④ X

Zn

ср. 1985, 18, № 10

Cu

[Om. 22764]

1985

Weisskopf V.F.,

(check &
Koreg. locm)

Amer. J. Phys., 1985,
53, N 10, 940-942

Cu

OM. 23036

1985

7 B1188. Спектроскопия флуоресценции в наносекундном интервале для матрично-изолированных атомов и димеров меди. Fluorescence spectroscopy in the nanosecond range for matrix-isolated Cu atoms and dimers. Wigenhauser H., Kolb D. M., Roter-mund H. H., Schrittenlacher W., Schroeder W. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 1—2, 71—75 (англ.)

С использованием в качестве источника импульсного (длительность импульса 400 пс, частота повторения 280 нс) излучения синхротрона с временным разрешением измерены спектры флуоресценции (Фл) атомов Cu и димеров Cu₂, изолированных в матрицах из Ne при 6К. При возбуждении в обл. перехода 4s—4p в атоме Cu (4,0 эВ) обнаружена полоса Фл 3,5 эВ и определено для нее время затухания 1-го порядка — $6,9 \pm 0,3$ нс. Эта же полоса наблюдалась в спектре Фл после возбуждения перехода 3d—4p (5,8 эВ), однако в этом случае затухание носит неэкспоненциальный характер, а соотв. время составляет 50 нс. С. Б. Осин

Спектр

(H) X

X. 1986, 19, № 7.

Cu₂

Cu

(om. 26546)

1986

Bernardo L. A. G., Sorcio J. A.,

теор.
релатив
стат. сое-
тотности

J. Chem. Phys., 1986,
85, N 3, 1475-83.

Li

Ion. 23779

1986

Klobukowski et al., Mezi-
nago, S.,

meop.

pacrim.

J. Chem. phys., 1986,

84, N1, 323-325.

Li (OM. 26208) 1986

Tatewaki H., Sekiya M.,

волнов.
ор-ци,
ЭГ, кв.
дих.
расчет.

J. Chem. Phys., 1986,
85, N10, 5895-5899.

Cu^{2+}
Li

1986

№5 Б1269. Электронный спектр поглощения ионов Cu^{2+} в монокристаллах сульфата лития и цезия. Electronic absorption spectrum of Cu^{2+} ions doped in lithium caesium sulphate single crystal. Venkata Reddy B. C., Munibhadraiah B. «Mater. Lett.», 1986, 4, № 4, 219—222 (англ.)

При комн. т-ре и т-ре жидк. азота исследованы электронные спектры монокристаллов сульфата лития и цезия, $LiCsSO_4$, легированных медью (I). Монокристаллы I выращены методом медленного выпаривания при комн. т-ре. В кристаллах I толщиной около 1 мм при комн. т-ре обнаружены в спектрах три полосы: две из них в ближней ИК-обл. при 7813 см^{-1} и 9901 см^{-1} и одна — в видимой обл. при 12987 см^{-1} . При низкой т-ре отмечены изменения интенсивности и положения полос. По величине и относит. положению полос проведена интерпретация всех принадлежащих иону Cu^{2+} наблюдаемых полос поглощения в центрах I с тетрагон. симметрией. Определены параметры крист. поля.

Н. Н. Морозов

(Si)

X. 1987, 19, N 5

Li-

1987

108: 156778u Electron affinities of states of scandium and copper. Beck, Donald R.; Cai, Ziyong; Aspromallis, George (Phys. Dep., Michigan Technol. Univ., Houghton, MI 49931 USA). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Chem. Symp.* 1987, 21, 457-68 (Eng). The transition metal electron affinities were studied. A procedure, REDUCE, is introduced for reducing the no. of parental couplings per configuration present in the first order wave function from as many as 100 to only a few. Progress toward a comprehensive relativistic-correlation theory is discussed. Several states in Sc- were examd. but none were found to be bound. Two new bound states were obtained for Cu-: $3d^2 4s 4p^2 {}^2D$ and $3d^3 4s 4p^2 {}^1F^o$, with electron affinities 0.109 and 1.052 eV, resp.

Ac, обзательна
некнпотн-
состояние

C.A. 1988, 108, N 18

Cu (I)

[Om. 28064]

1987

Cu (II)

Forrest L.F., Pejcev V.,
Smith D., et al.,

(автоматично)
(со стоеч.)

J. Phys. B: At. Mol.

Phys. . . ● 1987, 20, 3985-96

Cu^{2+}

1987

22 Б1042. Сверхтонкие взаимодействия в тетрагональных комплексах Cu^{2+} со структурой сжатого октаэдра. Муравьев В. Н. «Координац. химия», 1987, 13, № 5, 605—614

Для тетрагонально сжатых октаэдрич. комплексов CuL_4N_2 ($L=Cl, Br$; основное состояние — терм $^2A_{1g}$) в кристаллах $Cu^{2+}:NH_4Cl$ и $Cu^{2+}:NH_4Br$ рассчитаны ковалентные вклады в параметры собственного и лигандных сверхтонких взаимодействий. Параметры ковалентных связей вычислены из данных ЭПР и оптич. спектроскопии комплексов. Анализ вкладов в компоненты A - и A^L -тензоров позволяет сделать вывод о существенном влиянии ковалентности на параметры СТВ. Анализ структуры делокализованных связей в комплексе $CuClN_2$ позволил установить, что компоненты A - и A^L -тензоров положительны. Из расчетов параметра sd -смешивания АО иона меди в основном состоянии комплекса $CuCl_2N_2$ следует, что в комплексе имеется

(8i)

х. 1987, 19, № 22

перекомпенсация спин-поляризационного вклада в параметр изотропного СТВ вкладом от примеси 4s-АО иона меди в основном состоянии. Это объясняет аномально высокое значение компоненты A -тензора в ориентации постоянного магн. поля $H \parallel$ аксиальной оси комплекса.

Автореферат



Cu

1988

| 110: 124001k Lifetime measurements and Stark mixing of autoionizing copper (Cu I)-states. Baier, S.; Martins, M.; Mueller, B. R.; Zimmermann, P. (Inst. Strahlungs Kernphys., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1988, 10(4), 445-9 (Eng). Using a combination of collisional and laser excitation the lifetimes of 1m autoionizing Cu I states in the configurations $3d^9 4s 6s$ and $3d^9 4s 4d$ were measured. The lifetimes are in the range of 1-50 ps and depend strongly on the coupling properties, the mixing with different configurations, and the radical integrals of the discrete with the continuum states. For the level $3d^9 4s 4d^4 S_{3/2}$ the influence of an elec. field via Stark mixing of $3d^9 4s 5p^4 P_{1/2}$ on the autoionizing rate was investigated. The exptl. values are compared with theor. results which follow from ab initio calcs. for the transition probabilities and least square fit values deduced from the exptl. positions. Good agreement is found only for the $J = 3/2$ levels of both configurations $3d^9 4s 4d$ and $3d^9 4s 6s$.

(2, 1mn)

c.A. 1989, 110, N 14

Cu

1988

(7)

110: 65884a Lifetime measurements and Stark mixing of autoionizing copper (Cu I)-states. Baier, S.; Martins, M.; Mueller, B. R.; Zimmermann, P. (Inst. Strahlungs- Kernphys., Tech. Univ. Berlin, D-1000 Berlin, 12 Fed. Rep. Ger.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1988, 10(4), 445-9 (Eng). By using a combination of collisional and laser excitation, the lifetimes of 17 autoionizing Cu I states in the configurations $3d^9 4s6s$ and $3d^9 4s4d$ were measured. The lifetimes are in the range of 1-50 ps and depend strongly on the coupling properties, the mixing with different configurations, and the radial integrals of the discrete with the continuum states. For the level $3d^9 4s4d^4S_{3/2}$, the influence of an elec. field via Stark mixing of $3d^9 4s5p^4P_{1/2}$ on the autoionizing rate was investigated. The exptl. values were compared with theor. results which follow from ab initio calcns. for the transition probabilities and least square fit values deduced from the exptl. positions. Good agreement was found only for the $J = 3/2$ levels of both configurations $3d^9 4s4d$ and $3d^9 4s6s$.

C. A. 1989, 110, N 8

UM 29451

1988

15 Б1080. Теоретическое исследование сродства к электрону Cu , Cu_2 и Cu_3 . Theoretical study of the electron affinities of Cu , Cu_2 , and Cu_3 . Bauschlicher C. W. Jr., Langhoff S. R., Taylor P. R. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 2, 1041—1045 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в широком базисе с учетом электронной корреляции методом функционала связанных пар рассчитана электронная и геометрич. структура анионов Cu^- , Cu_2^- и Cu_3^- . Согласно расчетам, адиабатич. сродство к электрону (в эВ) равно 1,01 (1,235); 0,62 (0,842) и 1,66 (2,30—2,50) для Cu , Cu_2 и Cu_3 соотв. (в скобках — эксперим. данные). Основное состояние иона Cu_2^- имеет симметрию $^2\Sigma_u^+$; неспаренный электрон находится на σ_u -МО, разрыхляющей линейной комбинации 4s-АО Cu . Это приводит к удлинению связи $\text{Cu}-\text{Cu}$ по сравнению с Cu_2 с 2,272 до 2,394 Å и уменьшению энергии диссоциации и частоты колебаний на 20%. Состояние $^2\Pi_u$, в к-ром электрон занимает связывающую комбинацию 4 p_π -АО,

X. 1988, 19, N 15

на 1,35 эВ выше. Молекула Cu_3 в основном состоянии имеет геометрию D_{3h} ; линейная структура на 0,28 эВ менее устойчива. Основное состояние $\text{Cu}_3^- \ ^1\Sigma_g^+$ соответствует линейной структуре; состояние $\ ^3A_2'$ с геометрией D_{3h} на 0,51 эВ выше. Полученные результаты хорошо объясняют эксперим. фотоэлектронный спектр Cu_2^- и Cu_3^- .

В. К. Михалко



Cu

(Om. 29431)

1988

/ 109: 27855p Theoretical study of the electron affinities of atomic, diatomic, and triatomic copper. Bauschlicher, Charles W., Jr.; Langhoff, Stephen R.; Taylor, Peter R. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(2), 1041-5 (Eng). Modified-coupled-pair-functional (MCPF) calcs. gave the electron affinities of Cu, Cu₂, and Cu₃ to nearly equal accuracy. The structural results for Cu₂, together with existing exptl. neg.-ion-photoelectron results, showed conclusively that Cu₂⁻ is linear in its (¹Σ_g⁺) ground state. The weak feature in the Cu₃⁻ photoelectron spectrum at an electron binding energy of 1.5 eV is due to ionization from the ³A₂' (equilateral triangle) excited state of Cu₃.

Ae, comp. ref.

X¹Σ_g⁺(+2) Cu₂Cu₃, Cu₃⁻

C. A. 1988, 109, N 4

Cu I

1988

108: 121111u Generalized oscillator strengths for dipole-forbidden transitions in copper I, zinc II, and magnesium II. Msezane, Alfred Z.; Henry, Ronald J. W. (Dep. Phys., Atlanta Univ., Atlanta, GA 30314 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1988, 37(3), 988-91 (Eng). Accurate electron-impact differential cross sections for various optically forbidden transitions in Cu I, Mg II, and Zn II were used to calc. apparent generalized oscillator strengths (GOS's) at electron-impact energy 15-100 eV. Most curves of the GOS vs. momentum transfer squared, K^2 , appear compatible with the E. N. Lassettre et al. (1969) limit theorem. Extrapolation to the optical oscillator strength values is meaningless for the 15-eV curves of Mg II and Zn II for which the unphys. region is significant. The GOS min., where they exist, near $K^2 \rightarrow 0$ are important in assessing whether a given transition is interpretable in terms of the Born approxn.

(fmm)

(72) ~~10~~

C.A. 1988, 108, N14



Mg II, Zn II

Cu I

1988

2 Л113. Вероятности переходов линий Cu II. Transition probabilities of CuII lines // Neger T., Jäger H. // Z. Naturforsch. A.— 1988.— 43, № 5.— С. 507—508.— Англ.

Измерены относит. вероятности переходов для 7 линий CuII из области 400—500 нм. Измерения выполнены путем регистрации перпендикулярно оси интенсивности излучения плазменной струи, истекающей из капилляра, а также при наблюдении интенсивности аксимального разряда взрывающейся медной проволоочки. Необходимые параметры плазмы ($T=18\,000\text{—}24\,000\text{ К}$ и $n_e=(5\text{—}8)\times 10^{17}$) находились соответственно из отношений интенсивностей линий Cu I с известными вероятностями переходов и из штарковской ширины линии H_β водорода. Погрешность определения относительных вероятностей переходов в Cu II оценивается в $\pm 25\%$.

А. Н. Рябцев

(Gi)

сп. 1989, № 2

Cu (II)

1988

(fmm)

109: 45445j Transition probabilities of copper (Cu II) lines. Neger, T.; Jaeger, H. (Inst. Experimentalphys., Tech. Univ., A-8010 Graz, Austria). *Z. Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1988, 43(5), 507-8 (Eng). Relative transition probabilities of 7 Cu II lines in the visible spectral region are measured by side-on observation of a plasma jet emerging out of a capillary as well as by using an axial discharge-type of an exploding Cu wire. The results were compared with those of two other expts.

C.A. 1988, 109, N 6

Cu^{+}

1989

9 Б1072. Расчет энергий спин-мультиплетных электронных переходов в $NaF:Cu^{+}$ в приближении локальной спиновой плотности и с поправкой на самодействие. Spin-multiplet electronic energies in $NaF:Cu^{+}$ by self-interaction—corrected local-spin-density approximation / Erwin S. C., Lin C. C. // Phys. Rev. B.— 1989.— 40, № 3.— С. 1892—1900.— Англ.

(ϵ_i)

В рамках формализма функционала плотности с поправкой на самодействие и в приближении локальной спиновой плотности развит метод расчета электронной структуры примесных центров в кристаллах. В методе учтены также эффекты спиновой поляризации, орбитальной релаксации и спин-орбитальное взаимодействие. С использованием этой процедуры рассчитаны уровни энергии и волновые ф-ции 8 термов примесного иона Cu^{+} в кристалле NaF , относящихся к возбужденной $3d^9 4s$ -конфигурации; вычислена также энергия $3d-4s$ -перехода. Для расчетов разности энергий между триплетными и синглетными уровнями использован формализм параметров дробной заселенности. Рассчитанные уровни энергии $3d^9 4s$ -конфигурации и энергия $3d-4s$ -перехода хорошо согласуются с эксперим. данными.

В. С. Миронов

X.1990, N 9

Ca

1989

Raghavachari Krishnar,
Trucks Gary W.

J,

J. Chem. Phys. 1989,

kv. mex.
pacrim

91 (4), 2457-60.

( cer. Sc; III)

Ci

1990

Lee Sang Hyun,
Kim Sok Won et al.

(cp) Ungyong Mulli 1990,
3(3), 393-9.

(ci. Al; I)

Si

1990

- 7 Б1032. О зависимости вычисленных свойств от учета корреляции и релятивистских эффектов. Сродство к электрону атома меди. On the dependence of correlation and relativity: The electron affinity of the copper atom / Marian C. M. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 173, № 2—3.— С. 175—180.— Англ.

С использованием различных вариантов учета электронной корреляции и релятивистских эффектов рассчитано сродство к электрону атома меди. Базис составлен на основе набора $[11s8p5d3f]$; орбитали оптимизированы в рамках многоконфигурац. метода ССП в полном активном пространстве. Корреляц. поправки к энергиям систем Cu и Cu^- вычислены в приближении конфигурац. вз-вия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к набору исходных конфигураций, либо в модифицир. приближении ф-ционала связанных пар. Релятивистские поправки, включающие масс-поляризац. и дарвиновские вклады, оценены по теории возмущений. Наилучшим значением сродства признано 1,09 эВ, что меньше эксперим. величины на 0,14 эВ. Сделано заключение, что корреляц. и релятивистские поправки не являются независимыми и следовательно, не м. б. учтены по аддитивной схеме.

А. В. Немухин

(Ac)

X-1991, № 7

Li

1990

и ионы Li
до Li XXIX

уровни
энергии

X. 1991, № 24

24 Б1060. Уровни энергии меди; Cu I до Cu XXIX.
Energy levels of copper, Cu I through Cu XXIX / Sugar
Jack, Musgrove Arlene // J. Phys. and Chem. Ref. Data.
— 1990. — 19, № 3. — С. 527—567. — Англ.

Сводка результатов по всем изученным состояниям
атома меди и его ионов до Cu XXIX. Представлены
энергии различных состояний и g -факторы, энергии
ионизации, а также, по возможности, те конфигурации,
к-рые дают основной вклад в волновые ф-ции. Для
каждой системы указаны способы получения включен-
ных в таблицу результатов и их точность.

Cu

1990

, 113: 103653w Energy levels of copper, Cu I through Cu XXIX. Sugar, Jack; Musgrove, Arlene (Cent. At. Mol. Opt. Phys., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1990, 19(3), 527-616 (Eng). The energy levels of the Cu atom, in all stages of ionization for which exptl. data are available, have been compiled. Ionization energies, either exptl. or theor., and exptl. g-factors are given. Leading components of calcd. eigenvectors are listed.

Ypobhee
Hemuu

C. A. 1990, 113; N 12

III

Cu^{2+}
 Cu^{3+}

М.П.

1991

7 16 Б1033. Электронная структура Си-кластеров / Кулагин Н. А., Кулиев Ш. И. // Физ. тверд. тела (С.-Петербург).— 1991.— 33, № 11.— С. 3382—3386.— Рус.

Приводятся результаты численных расчетов электронной структуры ионов Cu^{2+} , Cu^{3+} (конфигурации $3d^8$, $3d^8 4s$, $3d^9$) в кластерах $\text{Cu}^{n+} : [\text{O}^{2-}]_r$, $r=3, 4, 5, 6$ при различных радиусах координац. сферы, полученных методом самосогласованного поля для кластеров. Показано, что при определенных значениях параметров n, r, R происходит существенная перестройка электронной структуры, косвенно подтверждающая электронный механизм ВТСП.

Х. 1992, N 16.

Cu

1991

Tamassy - Lentei I.,

Derecskei - Kovacs A.

He, meop.
pacrēm

Acta Phys. Chem.

Debrecina 1991, 27,

19-29.

(cell. Na; III)

Li-

Om. 36855

1992

Cha Chia-Yen,
Ganteför G., et al.

qomo-
flekmp.
chekmp.

Ber. Bunsenges. Phys.
Chem. 1992, 96, N9,
1223-1227.

Photoelectron Spectroscopy

of Clusters and Adsorbates
on Clusters.

Cu (I)

1992

117: 14715h Investigation of autoionizing copper(I) in the region of the second ionization limit $\text{CuII } 3d^9 4s$. Martins, M.; Zimmermann, P. (Inst. Strahlungs- Kernphys., Tech. Univ. Berlin, W-1000 Berlin, 12 Germany). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1992, 23(2), 115-19 (Eng). The combination of collisional and laser excitation was used for the investigation of autoionizing Cu(I) states in the region of the second ionization limit $\text{Cu(II)} 3d^9 4s$ at $85000-95000 \text{ cm}^{-1}$. The anal. of the complicated signal structure was concd. on the first measurement of $\text{CuI } 3d^9 4p^2$ levels. The exptl. results are compared with Hartree-Fock calcns. of the energy values and level widths of the autoionization resonances.

спектр вблизи
второго ионизационного
предела

C. A. 1992, 117, N 2

lie (I)

1992

116: 139062d Reinvestigation of some of the autoionizing levels in the spectrum of copper (Cu I). Rao, P. Meenakshi Raja; Padmanabhan, S.; Krishnamurty, G.; Sekhar, B. N. Raja (Spectrosc. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, 400 085 India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1992, 47(2), 113-19 (Eng). The emission spectrum of Cu I was generated in a 10 A d.c. arc and photographed in the second and third orders of a 3.4 m Jarrell-Ash spectrograph using a 1200 groove/mm grating. The spectral lines involving the autoionizing levels $5s^4D$, $5s^2D$, and $5s^2D$ arising from the $3d^34s5s$ configuration have been reinvestigated to obtain comprehensive data on the half-widths of all of the diffuse lines. The data on $5s^2D_{3/2}$ are reported for the first time. The half-widths of the $5s^4D_{3/2}$ and $^2D_{3/2}$ lines are larger than those of the corresponding multiplet components $5s^4D_{5/2}$ and $^2D_{5/2}$, whereas the half-width of $5s^2D_{5/2}$ is larger than that of $5s^2D_{3/2}$. The line profiles were fitted to Gaussian and Lorentzian distributions and the results showed that the contribution to the breadth of a sharp line is mainly from the instrumental width (Gaussian), whereas the anomalous broadening of the diffuse lines caused by autoionization is predominantly Lorentzian.

crkmp

C.A. 1992, 116, N 14

Cu

(Om. 3781)

1992

Tatewaki H., Tomonari M.,

(9) Can. J. Chem., 1992, 70,
642-656.

Li

1993

119: 58725g Analysis of autoionizing Rydberg series copper (Cu I) $3d^9 4s n l$ with the multichannel quantum defect theory. Martins, M.; Zimmermann, P. (Inst. Strahlungs Kernphys., Tech. Univ. Berlin, W-1000 Berlin, 12 Germany). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1993, 27(2), 115-21 (Eng). Using at. beam technique, a combination of collisional and laser excitation, and photoion detection, autoionizing Cu I states in the region of the ionization limits Cu II $3d^9 4s(^1D)$ were investigated. In spite of the complicated structure of the signals due to the four different ionization limits 3D_1 , 3D_2 , 3D_1 and 1D_2 and the large no. of possible (LSJ)-states, which can be reached by this exptl. technique, the majority of the signals could be attributed to definite Rydberg series $3d^9 4s(^1D_1, ^3D_2, ^3D_1, ^1D_2) n l$ (LSJ). Perturbations were analyzed by the three- and four-channel quantum defect theory and by Hartree-Fock calcns. General formulas for the calcn. of the photoionization cross section by the four-channel quantum defect theory in the case of two closed and two open channels are given.

(Program agreed)

C.A. 1993, 119, N 6

Cu

1993

122: 299446j Electron impact excitation of copper atoms: Final report. Stumpf, B. J. (Dep. Phys., Univ. Idaho, Moscow, ID USA). Report 1993, UCRL-CR-113452; Order No. DE93017995, 13 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Energy Res. Abstr.* 1993, 18(11), Abstr. No. 34443. The optical excitation function method was used in a crossed atom and electron beam arrangement to measure the electron impact cross section of the copper $4^2P \rightarrow 4^2S$ resonance lines (32.8, 327.4 nm) from threshold (3.8 eV) to 8 eV. Relative exptl. cross section data were normalized at an energy of 1000 effect with respect to first Born theory that includes the $4^2S \rightarrow 4^2P$ resonance transition with an oscillator strength of 0.652 and cascading from the $(3d^{10}nd)^1D$ states with $n = 4, \dots, 10$. The measured Cu $4^2S^4 \rightarrow 4^2P$ cross section is compared with recent theor. calcns. in close-coupling approxn. Very good agreement was found with the 1-0st close-coupling theory of Scheibner.

$4^2P \rightarrow 4^2S$

6 M. Y. Jap

C. A. 1995, 122, N24

li

1993

(fmm)

/ 118: 157011g Lifetime measurements of the $3d^34s(^1D)4p$ configuration of copper (Cu I). Van der Veen, W. E.; Van Diest, R. J. J.; Doenszelmann, A. (Zeeman Lab., Univ. Amsterdam, 1018 XE Amsterdam, Neth.). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1993, 25(3), 201-3 (Eng). The radiative lifetimes of the levels in the $3d^34s(^1D)4p$ configuration of Cu I are measured. The levels are excited from the metastable $3d^34s^2D_{3/2,5/2}$ levels. The metastable Cu atoms are generated in a pulsed hollow cathode discharge. The levels studied are populated with a 35-ps laser pulse at wavelengths at ~ 220 nm. The laser induced fluorescence signal is detected. The lifetime of the $3d^34s(^3D)4p^4D_{3/2}$ level is also detd. by direct excitation from the ground state. A comparison with calcd. literature values is given.

C.A. 1993, 118, N16

Li⁺

1993

119: 258693g Observation of singly-ionized copper emission lines from a Grimm-type glow discharge plasma with argon-helium gas mixtures in a visible wavelength region. Wagatsuma, Kazuaki; Hirokawa, Kichinosuke (Inst. Mater. Res., Tohoku Univ., Sendai, Japan 980). *Spectrochim. Acta, Part B* 1993, 48B(8), 1039-44 (Eng). In the Ar-He plasmas, the emission lines of Cu⁺, which cannot be excited in the pure Ar plasma, can be obsd. in the visible wavelength region. These lines are identified to the 3d⁹4f-3d⁹4d, 3d⁹5d-3d⁹5p, or 3d⁹6s-3d⁹4p transitions. The collisional reactions occurring and the resonance energy transfer between Cu atoms and He ions are a feasible mechanism for the obsd. excitations.

(cncmp)

C.A. 1993, 119, N 24

Cu (II)

1994

121: 216356k Absolute transition probabilities of Cu II lines. Crespo Lopez-Urrutia, J. R.; Kenner, B.; Neger, T.; Jaeger, H. (Inst. Experimentalphysik, Tech. Univ. Graz, A-8010 Graz, Austria). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1994, 52(1), 111-14 (Eng). Transition probabilities of 47 lines of Cu II have been detd. exptl. in the spectral region 2000-3000 Å by performing emission measurements using a special high frequency hollow electrode discharge. The branching ratios found for the levels of 4p and 5s are converted to abs. transition probabilities using lifetime data found in the literature. Comparison of the results with available values of other authors has been made. The deviation between our values and those compared is less than 10% for most of the lines.

(fmm)

C.A. 1994, 121, N18

Lu

Om 39634

1994

Нуклеонац.
физическ.
состоян.

Kiroshi Tatenaki,
Toshikatsu Koga,

Chem. Phys. Lett.
1994, 228, 562-67

Р4

1994

Tatewaki Hiroshi,

Koga Toshikatsu.

незко-
сенкав.
уровни
мерзев

Chem. Phys. Lett.

1994, 228 (6), 562-7.

(ср. Арнольд σ Se go Zn; III)

Li

1995

123: 353235a Atomic transition probabilities and lifetimes for the Cu I system. Fu, K.; Jogwich, M.; Knebel, M.; Wiesemann, K. (Ruhr-Universitaet, D-44780 Bochum, Germany). *At. Data Nucl. Data Tables* 1995 (Pub. 1995). 61(1), 1-30 (Eng). Measured and calcd. transition probabilities, oscillator strengths, and wavelengths for Cu I at. transitions and measured and calcd. lifetimes of Cu I states are tabulated. Data published from 1957 to mid-1994 are covered in this compilation.

вероятность
переходов,
силы осцил-
ляторов
обзор

C.A.-1995, 123, N 26

Cu

Om 38941

1997

(I, Ae)



(+2)

127: 40041m Ionization potentials and electron affinities of Cu, Ag, and Au: electron correlation and relativistic effects. Neogrady, Pavel; Kello, Vladimir; Urban, Miroslav; Sadlej, Andrezej J. (Department Physical Chemistry, Faculty Sciences, Comenius University, Bratislava, Slovakia SK-842 15). *Int. J. Quantum Chem.* 1997, 63(2), 557-565 (Eng), Wiley. The electron correlation and relativistic effects on ionization potentials and electron affinities of Cu, Ag, and Au are investigated in the framework of the coupled cluster method and different 1-component approxns. to the relativistic Dirac-Coulomb Hamiltonian. The first-order perturbation approach based on the mass-velocity and Darwin terms is found to be sufficiently accurate for Cu and Ag while it fails for Au. The spin-averaged Douglas-Kroll no-pair method gives excellent results for the studied at. properties. The ionization potentials obtained within this method and the coupled cluster scheme for the electron correlation effects are 7.733(7.735) eV for Cu, 7.461(7.575) eV for Ag, and 9.123(9.225) eV for Au (exptl. values given in parentheses). The calcd. (exptl.) electron affinity results for Cu, Ag, and Au are 1.236(1.226), 1.254(1.303), and 2.229(2.309) eV, resp. There is a marked relativistic effect on both the ionization potential and electron

C. A. 1997, 127, N3

Ag, Au

affinity of Ag which sharply increases for Au while Cu exhibits only a little relativistic character. A similar pattern of relativistic effects is also obsd. for elec. dipole polarizabilities of the coinage metal atoms and their ions. The coupled cluster dipole polarizabilities of the coinage metal atoms calcd. in this article in the Douglas-Kroll no-pair formalism (Cu: 46.50 au; Ag: 52.46 au; Au: 36.06 au) are compared with our earlier data for their singly pos. and singly neg. ions.

Cu⁻

1998

Bilodeau, Rene C;
et al;

(Ae) J. Phys. B: At. Mol. Opt.
Phys. 1998, 31 (17), 3885-
3891

(Cu. Cu⁻;  III)

1998

 $\mu(r, k)$

129: 8682b Force fields in liquid and solid Cu metal. Relation between quantum chemical and density functional treatments. March, N. H.; Ray, A. K. (Dep. Physics, Univ. Texas, Arlington, TX USA). *Phys. Chem. Liq.* 1998, 36(4), 207-214 (Eng), Gordon & Breach Science Publishers. A review with 14 refs. comparing and contrasting 2 types of force fields for condensed Cu in metallic phases. The 1st is a conventional liq. metal pair potential, accessible through inversion of the measured liq. structure factor $S(q)$. The form of this, for $T = 1423$ K, and no. d. $\rho = 0.07554 \text{ \AA}^{-3}$ is known from the very recent work of Rajagopalan and Srinivasa Rao and from the earlier study of Arai and Yokoyama. This potential is suitable to discuss structural rearrangements only at the specific atom vol. $\Omega = \rho^{-1}$ referred to above. The 2nd type of force field is appropriate for cryst. Cu lattices with different local coordination nos. As a concrete example, the work of Carlsson et al. on fcc. Cu metal is analyzed in terms of the $^1\Sigma_g$ and $^3\Sigma_u$ potential energy curves of the free-space Cu dimer. The relation to Cu clusters is briefly referred to.

(see note)

⑦ μ_{12}
(re, k) Δ

C. A. 1998, 129, v. 1

Cu

1999

(62, 317.3(2))

(9)

130: 174726j Reassessment of the first ionization potentials of copper, silver, and gold. Looock, Hans-Peter; Beaty, Leanne M.; Simard, Benoit (Steacie Institute for Molecular Sciences, National Research Council of Canada, 100 Sussex Drive, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys.* 1999, 59(1), 873-875 (Eng), American Physical Society. The 1st ionization potentials (V_{IP} 's) of Cu, Ag, and Au were reassessed using a 2-color resonant excitation scheme on laser-vaporized at. beams of Cu, Ag, and Au. Rydberg levels of the $nd^{10}n_{RS}1-(^2S_{1/2})$ and $nd^{10}n_{RD}1(^2D_{3/2,5/2})$ series converging to the ground 1S term of the singly charged cations were excited and pulse-field ionized. The fit to the Rydberg levels yielded the ionization potentials $V_{IP}(Cu)=62,317.3(2) \text{ cm}^{-1}$, $V_{IP}(Ag)=61,106.45(20) \text{ cm}^{-1}$, and $V_{IP}(Au)=74,409.0(2) \text{ cm}^{-1}$. A comparison of these results to the currently accepted values revealed slight discrepancies to the previously reported IP of Ag.

(+2)

C.A. 1999, $\square$

Ag, Au



130, N13

Li

[Om. 41256]

2002

Shobhana Narasimham
et al.,

Phys. Rev. 2002, 65B, N6,
064302-1 — 064302-7.

Ab initio calculation of the

thermal properties of Cu:
Performance of the LDA
and GGA.