

$K_2H; K_2H^+$

I-1472

1961

HeH^+	(A.P.)	NeH^+	(A.P.)
ArH^+	(A.P.)	KrH^+	(A.P.)
KrD^+	(A.P.)	H_3^+	(A.P.)

Kaul W., Lauterbach U., Taubert R.

Z. Naturforsch., 1961, 16a, N 6, 624-625 (nem.)

Die Auftrittspotentiale von HeH^+ , NeH^+ , ArH^+ ,
 KrH^+ , Kr_2D und H_3^+

PX, 1962,
45416

97-1

I-1471

Bφ-5538-I

1961

HeH⁺ (A.P.), NeH⁺ (A.P.)
ArH⁺ (A.P.), KrH⁺ (A.P.)
KrD⁺ (A.P.), H₃⁺ (A.P.)

Kaul W., Lauterbach U., Taubert R.

Z.Naturforsch., 1961, 16a, N 6, 624-625
(Chem.)

Die Auftrittspotentiale von HeH⁺, NeH⁺, ArH⁺,
KrH⁺, KrD⁺ und H₃⁺.

PX, 1962,
45416

9-1

K₂H⁺

Moran T. F., Friedman L. 1964

Z₀

J. Chem. Phys., 40, № 3, 860.

K

D₀

Применение электростатической модели Тейтца к двухатомным молекулам.

(см. III Вет⁺)

K_2H^+

ВФ-3556-VI

1964.

Moran T. F.
Friedman L.

расчет
свойств

положений.

заряде, 2х ат.
модулов

J. Chem. Phys.
1964, 40, N3,
860-66.

(см. Белл; III) -

52207n Ionization curves of secondary ions in ion sources of mass spectrometers. Lauterbach, U. (Phys.-Tech. Bundesanst., Brunswick, Ger.). *Z. Naturforsch. A* 1968, 23(11), 1790-9 (Ger). By using counting techniques, a multichannel analyzer, and a conventional mass spectrometer with a retarding p.d. (R.P.D.) ion source, the R.P.D. method was adapted to produce digital ionization curves of secondary ions. An indirectly heated sintered Ni cathode (surface temp. 900°) was employed. Forty percent of the electrons produced had energies that differed by ≤ 0.1 ev. The method was applied to study the formation of KrD^+ in Kr- D_2 mixts. In addn. to the reaction $\text{Kr}^+ + \text{D}_2 \rightarrow \text{KrD}^+ + \text{D}$ [appearance potential (A.P.) = 14.0 ev.], the reaction $\text{D}_2^+ + \text{Kr} \rightarrow \text{KrD}^+ + \text{D}$ (A.P. = 15.48 ev.) contributes considerably to the KrD^+ yield. The reaction

$\text{Kr}^{**} + \text{D}_2 \rightarrow \text{KrD}^+ + \text{D} + e^-$ (A. P. = 13.9 ev.) reported by H. Hotop (1967) and H. Hotop and A. Niehaus (to be published) also occurs and contributes a small amt. of KrD^+ . Evidence was observed for the existence of the reaction path $\text{D}_2^* + \text{Kr} \rightarrow \text{KrD}^+ + \text{D} + e^-$ by long-lived excited states of D_2 above the 1st ionization limit of D_2 . FBJG

KrD⁺
A.P.
C.A. 1969. 70.12

1968

K₂H⁺

1972

Helbig H.F. et al

Phys. Rev. A, 1972,

6(1), 519-21

re, De
v. mex.
pact

(см. MeH⁺, II)

41002.8793
TC, Ph

H⁺K₂

43535

02

1974

2521

Buck_U.

Inversion of molecular scattering data.

"Revs Mod. Phys.", 1974, 46, N 2,
369-389

(англ.)

0203 пик

168 170 - 195

ВИНИТИ

1975

XI - 4471

Kp, ΔG , $\Delta A(H^+)$ (H_3^+ , K_2 , K_2H^+ , H_2)

Payzant J.D., Schiff H.I., Bohme D.

J. Chem. Phys., 1975, 63, N1, 149 -

153

10, 11

BrH^+ , KrH^+ , RbH^+ / BX-89 / 1976
(квантовомех. расчет потерь кривых)

Gardner M.A., Karo A.M., McMurphy F.E.,
Wahl A.C.,

Report 1976, UCRB-51738, 12pp. Avail. NTIS.
From ERDA Energy Res. Abstr. 1976, 1182

Hartree-Fock energy curves, for BrH^+ 5
($X^2\Pi$), KrH^+ ($X^1\Sigma^+$), and RbH^+ ($X^2\Sigma^+$).

C.A. 1976, 85, N26, 198552C

10



60512.9180

Ch, Ph, TC, MGU

96559

Ky H+

1976

* 4-12866

K p. N 60512.9179

Smith R.D., Smith D.L., Futrell

J.H. Ion-molecule reactions in H_2 /rare-gas systems by ion cyclotron resonance.

II. Reactions in systems of H_2 with Ar, Kr and Xe. "Int.J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1976, 19, N4, 395-413 (англ.)

586 591: 609 0617 пик ВИНТИ

KrH

1977

Kr-H₂

✓ 93: 173861e Problem of the possibility of producing an inversion on RH excimers under intensive recombination

conditions. Grinchenko, B. I. (USSR). — *Tr. MFTI, Ser. "Radiotekh. Elektron."* 1977, 190-4 (Russ). The population inversion on RH excimers (R = He-group gas atom) during ionization of a R-H₂ mixt. by an external source (a relativistic electron beam of short duration) is analyzed by considering the various plasma relaxation processes (RH⁺ ion formation and its 3-body recombination to RH in a lower bound state). Illustrative numerical calcns. for Kr-H₂ mixts. are presented.

небес.

защелки

© A. 1980, 93 n 18

1978

KrH^+

Ernst N., et al.,

(A.P.)

Int. J. Mass Spectrom.
Ion. Phys. 1978, 28(1),
33-48.

● (see XeH^+ ; III).

K&H+ omniunc 7251 1978

Ernst N. et al.

(A_{H^+} ; A_p)

Ber. Bunsenges.
Phys. Chem., 1978,
82, 756-66

ВФ-Х1-6369

1978

КЧН

спектр
ионизации

6 Б1323. Эмиссионный спектр KгН при искровом пробое смеси $\text{H}_2 + \text{Kг}$. Гринченко В. И. «Тр. Моск. физ.-техн. ин-та. Сер. Общ. и молекуляр. физ.», 1978, № 10, 115—118

В области 260—320 нм регистрировали спектры испускания H_2 , Kг и смесей 88% $\text{H}_2 + 12\%$ Kг , возбуждаемые импульсным разрядом в межэлектродном промежутке шириной 2,5 см. Длительность импульса 10^{-7} сек, плотности электронов $n_e \geq 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и максим. т-ра газа в канале искры 0,2 эв. В смеси $\text{H}_2 + \text{Kг}$ наблюдали полосы в области 280—300 нм, к-рые отсутствуют в чистых H_2 и Kг . Они приписаны образованию KгН в процессах $\text{Kг}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{KгН}^+ + \text{H}$ с послед. нейтр-цией ионов. В спектрах смесей Ag с H_2 подобный эффект не наблюдался. При замене H_2 на D_2 в смесях с Kг получаются идентичные спектры. Полоса излучения с центром ~ 295 нм и полушириной 20 нм предположительно отнесена к переходу $\text{KгН}(2) \rightarrow \text{KгН}(1)$.
В. Е. Скурат

X.1979, N6

KrH

B9-XI-6369

1949



91:11710m Emission spectrum of krypton hydride in the spark breakdown of a molecular hydrogen + krypton mixture. Grichenko, B. I. (USSR). *Tr. Mosk. Fiz. tekhn. In-ta. Ser. Obshch. i Molekulyar. Fiz.* 1978, (10), 115-18 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1979, Abstr. No. 6B1323. Title only translated.

чужий

C. A. 1949, 91, N2

K₂H⁺ [emmen 10710] 1980.

Rasmus D., Reinsch E.A.

Min.

Z. Naturforsch., 1980, 35a,
1066 - 1070.

● (an NeH⁺) III

KrH⁺

Ommuck 15340

1982

Ae;

Block F.H.,
Ber. Bunsenges. Phys.
Chem., 1982, 86, N9,

● 852-860.

KzH⁺

1983

Rosmus P., Reinsch E.A.,
et al.

(о́зop) NATO Adv. Sci. Inst.
from Ser., Ser. B 1983, 90, 407-
-410.

(see. AzH⁺; III)

KrH

[om. 20505]

1984

Braga J.P., Murrell J.N.

M.N.
Mol. Phys., 1984, 53,
N 2, 295-299.

KrH⁺

[Oñ. 21046]

1984

Gudeman Ch. S., Saezkally R. J.,

исследов.
с помощью
лазерной
спектроск.
высокого
разреш.

Ann. Rev. Phys. Chem.,
1984, 35, 387-418.



K₂H

1984

потен-
циалы
основ.
состоян.

Muxley Philip,
Knowles David B., et al.
J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt 2, 80,
N11, 1349-1361.

(см. H₂; III).

KrH^+

(Om 19603)

1984

101: 45683v Spectra of the protonated rare gases. Johns, J. W. C. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 106(1), 124-33 (Eng). Hollow-cathode discharges in the rare gases mixed with small amts. of H_2 were examd. Earlier results of J.W. Brault and S.P. Davis on the spectrum of ArH^+ were extended, and a new spectrum of KrH^+ was found. No emission spectra of HeH^+ , NeH^+ , or XeH^+ were obsd.

CNEKMP

⊠(+) ArH^+

C.A. 1984, 101, ~6

KrD⁺

СМ. 21259

1984

9 Л162. Нижний вращательный переход в нескольких изотопных формах KrD^+ . The lowest rotational transition of several isotopic forms of KrD^+ . Warner Hugh E., Conner William T., Woods R. Claude. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 12, Pt 1, 5413—5416 (англ.)

Получены микроволн. спектры поглощения в области вращательного перехода $J=0-1$ KrD^+ для всех шести стабильных изотопов Kr в постоянном тлеющем разряде в смеси Kr—D₂. Для изотопа $^{83}\text{KrD}^+$ определены константы квадрупольной связи (549,1 МГц) и связи ядерного магн. момента (—0,022 МГц). С использованием полученных в работе и опубликованных ранее данных рассчитаны параметры Данхэма U_{01} , Δ_{01}^{H} и Δ_{01}^{Kr} , не зависящие от массы. Проведены также точные измерения доплеровских сдвигов, позволившие определить направление дрейфа ионов в магн. поле разряда.

Е. П. Смирнов

М.П.

ср. 1985, 18, № 9

KrD⁺

[Im. 21259] 1984

102: 102662j The lowest rotational transition of several isotopic forms of krypton deuteride(1+) (KrD⁺). Warner, Hugh E.; Conner, William T.; Woods, R. Claude (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, WI 53706 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(12), 5413-16 (Eng). The $J = 0-1$ absorption line of KrD⁺ was obsd. for all 6 stable Kr isotopes in a d.c. glow discharge in Kr-D₂ mixts. For ⁸³KrD⁺, the quadrupole coupling const. [$eQq = 549.1(5)$ MHz] and nuclear magnetic coupling const. [$C_N = -0.022(2)$ MHz] were detd. By combining the new microwave data for KrD⁺ with very precise published Dunham consts. for KrH⁺ from high resoln. IR spectral data, the mass independent Dunham parameters U_{01} , $\Delta_{01}H$, and $\Delta_{01}K$ were deduced. Precise Doppler shift measurements indicated a small drift velocity in the magnetic field enhanced abnormal discharge in the direction opposite to that naively expected from the electrode polarity.

Грандмента
переход

C.A. 1985, 102, 412

KrD⁺

[om. 21259] 1984

15 B1182. Наиболее низколежащий вращательный переход нескольких изотопных модификаций KrD⁺. The lowest rotational transition of several isotopic forms of KrD⁺. Warner Hugh E., Conner William T., Woods R. Claude. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 12, Pt 1, 5413—5416 (англ.)

В линии поглощения вращат. перехода $I=0-1$ KrD⁺ (разряд постоянного тока через смесь Kr—D₂) наблюдались компоненты, соотв. всем 6 стабильным изотопам криптона. Значения постоянной квадрупольного взаимодействия, eqQ , и постоянной ядерного магн. взаимодействия, C_N , для ⁸³KrD⁺ равны соотв. 549,1 МГц и —0,022 МГц. В результате совместной обработки полученных результатов и данных по ИК-спектру высокого разрешения KrH⁺ получены независимые от массы постоянные Данхема, U_{01} , Δ_{01}^H , Δ_{01}^{Kr} и равновесное межъядерное расстояние: $r_e^{BO} = 1,421191$ А. В. М. Ковба

М. П.

X. 1985, 19, N 15

KrH⁺

(om. 27414)

1985

Merzberg G.,

Proc. Indian. Natl. Sci.

(сбор) Acad., 1985, A51, N3,
495-521.

(сепаровка с отпущ. Merzberg).

RzH

1987

Herzberg G.

Annu. Rev. Phys. Chem.

(оогор)

Vol. 38, Palo Alto,
Calif., 1987, 27-56.

(see. He_2 ; III)

KrH(2)

(om. 26894)

1987

Möller T., Beland M.,
Zimmerer G.,

Chem. Phys. Lett., 1987,
136, N 6, 551-556.

M.N.

Kr H

1987

cf. Zimmerer Georg.

$(B^2\Pi \rightarrow X\Sigma^+)$ Chem. Phys. Lett.
предсказ. 1987, 136(6), 551-6.

(св. $\bullet$ HeH; III)

КН

от. 30765

1988

12 Л268. Спектры гидридов инертных газов. Ч. I. Переходы $^2\Pi \rightarrow ^2\Sigma$ и $^2\Sigma \rightarrow ^2\Sigma$ молекул KrH и KrD . Spectra of rare gas hydrides. I. $^2\Pi \rightarrow ^2\Sigma$ and $^2\Sigma \rightarrow ^2\Sigma$ transitions of KrH and KrD . Dabrowski I., Herzberg G., Hurley B. P., Lipson R. H., Vervloet M., Wang D.-C. «Mol. Phys.», 1988, 63, № 2, 269—287 (англ.)

С высоким разрешением исследованы спектры излучения молекул KrH и KrD . Зарегистрированы протяженные полосы в близкой ИК, видимой и УФ-области. Большинство полос может быть приписано переходам из ридберговских состояний $nS\sigma$, $np\sigma$, $np\pi$, nd и nx в состояние $5s\sigma^2\Sigma$. Проанализированы переходы KrH и KrD между состояниями типа 2S и 2P объединенного атома (атом Rb). Приведены данные для переходов между состояниями $^2\Sigma$ и $^2\Pi$, связанными с орбиталями nS и np . Низшее $^2\Sigma$ -состояние молекулы KrH заметно преддиссоциировано взаимодействием с отталкивательным состоянием, коррелирующим с основными со-

М.А.

(41)

ср. 1988, № 12

стояниями Kr и H . Преддиссоциация KrH ($^2\Sigma$) заметно слабее, чем у AgH . Кроме того, в отличие от AgD у KrD преддиссоциационного уширения линий не зарегистрировано. Приведены корреляционные диаграммы, таблицы линий, спектроскопич. постоянные и качественные потенц. кривые для указанных состояний молекул KrH и KrD .

В. С. Иванов



KrH
KrD

От 30165

1988

24 Б1251. Спектры гидридов благородных газов. I. Переходы $^2\Pi-^2\Sigma$ и $^2\Sigma-^2\Sigma$ KrH и KrD. Spectra of rare gas hydrides. I: $^2\Pi-^2\Sigma$ and $^2\Sigma-^2\Sigma$ transitions of KrH and KrD. Dabrowski I., Herzberg G., Hurley B. P., Lipson R. H., Vervloet M., Wang D.-C. «Mol. Phys.», 1988, 63, № 2, 269—287 (англ.)

На дифракц. спектрографе в обл. частот 12 000—25 000 см^{-1} с точностью около 0,08 см^{-1} и ИК-фурье-спектрофотометре в обл. частот 5500—12 000 см^{-1} с разрешением 0,05 см^{-1} и точностью около 0,02 см^{-1} измерены спектры излучения полос 0—0,1—1, 2—2 и 3—3 различных электронных переходов $^2\Pi-^2\Sigma$ и $^2\Sigma-^2\Sigma$ гидридов благородных газов KrH (I) и KrD (II). Иссле-

М.А.

Х. 1988, № 24

дованные молекулы I и II относятся к ридберговским, и все наблюдаемые электронные переходы связаны с ридберговскими состояниями. Возбужденные состояния отнесены к орбиталям $ns\sigma$, $np\sigma$ и $n\pi$, а нижнее состояние к $5s\sigma^2\Sigma$. Для всех состояний определены эффективные значения молек. постоянных. Вращат. постоянные I и II, соотв., равны для состояния $5s^2\Sigma^+$ ($v=0$) $B=8,283$ (5) и $4,21902$ (12) см^{-1} . Уширение линий I для переходов на нижнее состояние $^2\Sigma$ связано с диссоциацией из-за взаимодействия с диссоциативным состоянием $\text{Kr}(4p^6) + \text{H}(1s)$. С. Н. Мурзин

KrH

Om. 30 165

1988

108: 194988v Spectra of rare gas hydrides. I. $211-2\Sigma$ and $2\Sigma-2\Sigma$ transitions of krypton hydride and krypton deuteride (KrH and KrD). Dabrowski, I.; Herzberg, G.; Hurley, B. P.; Lipson, R. H.; Vervloet, M.; Wang, D. C. (Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Mol. Phys.* 1988, 63(2), 269-87 (Eng). Extensive emission bands of KrH and KrD were obsd. in the near IR, visible and UV regions. Most of them can readily be arranged in Rydberg series with $ns\sigma$, $np\sigma$, $np\pi$, nd and nf upper states and a $5s\sigma$ 2Σ lower state. There is a strong resemblance of the diagram of electronic states of KrH to that of the electronic states of the united atom Rb. The present paper deals with the electronic transitions of KrH and KrD corresponding to the $2S$ and $2P$ states of Rb. The conventional mol. consts. were detd. For most electronic states, only $v = 0$ levels have been obsd. from hot bands. No bands with $v' \neq \delta''$ have been found and thus no reliable vibrational frequencies are obtained. The rotational consts. of KrH are very similar in value to those of KrH^+ as is to be expected for Rydberg states. As for ArH, the line widths of the band lines of KrH involving the lowest 2Σ state is not negligible (0.5 cm^{-1}) indicating predissocn. in this 2Σ state. This predissocn. is presumably caused (as in ArH) by interaction with the repulsive ground state arising from ground state $Kr + H$. it is however distinctly less strong than in ArH. Indeed in KrD (unlike ArD) line broadening by predissocn. is undetectable.

211-2\Sigma, 2\Sigma-2\Sigma

(+)
~~211-2\Sigma~~
 211-2\Sigma

KD

C.A. 1988, 108, N 222

KrH

(DM 29260)

1988

Selgren S. F., Hipp D. E.
et al.

J. Chem. Phys., 1988,
88, N5, 3116 - 3124.

Neutralized[●] ion - beam.

studies of the rare gas hydrides: Observation of unique metastability for NeH .

KrH

DM 30341 1988

№ 1 Б1033. Неэмпирический расчет основного и возбужденных электронных состояний KrH. Ab initio calculations on the ground and excited electronic states of KrH / Theodorakopoulos G., Petsalakis I. D. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 149, № 2.— С. 196—200.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям рассчитаны потенциальные кривые основного и ряда возбужденных электронных состояний молекулы KrH. Использован двухэкспонентный для внешних орбиталей базис сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненный диффузными ф-циями s- и p-типа. Основное состояние KrH является отталкивательным, имеется лишь вандерваальсов минимум при межъядерном расстоянии ~ 8 ат. ед. Возбужденные состояния—связанные, их равновесные расстояния близки к межъядерному расстоянию основного состояния иона KrH^+ , что соответствует их ридбергову характеру. Для возбужденных состояний получены энергии возбуждения, колебат. частоты и вращат. постоянные. Полоса спектра KrH при 8141 Å отнесена к переходу $2^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$.

А. А. Сафонов

М.А.

X. 1989, N 1

KrH

от. 30341

1988

71 Д98. Неэмпирические расчеты основного и возбужденных электронных состояний KrH. Ab initio calculations on the ground and excited electronic states of KrH / Theodorakopoulos G., Petsalakis I. D. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 149, № 2.— С. 196—200.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия с выбором набора исходных конфигураций рассчитаны потенц. кривые основного $X^3\Sigma^+$ и связанных возбужденных $A^2\Sigma^+$, $3^3\Sigma^+$, $1^2\Pi$, $2^2\Pi(Kr\ 5p)$ электронных состояний эксимера KrH. Базис состоял из миним. набора ГФ для описания внутренних АО и двухэкспериментного набора для АО $3d$, $4s$ и $4p$ атома Kr и набора $(4s/3s)$ на ядре H. В базис включались также диффузные АО. Для основного состояния на потенц. кривой обнаружен ван-дер-ваальсов минимум при межъядерном расстоянии около 7 ат. ед. Полученные данные позволили провести отнесение наблюдаемой в спектре KrH полосы 8141 Å к переходу $2^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$.

А. И. Дементьев

М.А.

ср. 1989, №1

KrH

Om 30 341

1988

109: 176775q Ab initio calculations on the ground and excited electronic states of krypton hydride (KrH). Theodorakopoulos, G.; Petsalakis, I. D. (Dep. Chem., Carleton Univ., Ottawa, ON Can. K1S 5B6). *Chem. Phys. Lett.* 1988, 149(2), 196-200 (Eng). Nonrelativistic CI calens. were carried out on the ground and excited electronic states of KrH. The ground state is repulsive, except for a van der Waals min. at large internuclear distance (R). The excited states are bound with min. at R near the equil. bond length of KrH^+ , and have Rydberg character. The theor. values for the rotational consts. and also for T_0 of the $3^2\Sigma^+(p) \rightarrow A^2\Sigma^+(s)$ transition agree with the available exptl. values. Calens. on the vertical transition energies indicated that the 8141-Å band of KrH should be assigned to the $2^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$ transition.

(meop. pacem)



C.A. 1988, 109, N20

KrH^+

1992

§ 21 Б1402. Определение электрического дипольного момента KrH^+ . Determination of the electric dipole moment of KrH^+ /Linnartz Harold, Havenith Martina, Zwart Erik, Meerts W. Leo, ten Meulen J. J. //J. Mol. Spectrosc. — 1992. — 153, № 1—2. — С. 710—717. — Англ.

д-н.

Х. 1994, № 21

KrH⁺

1992

116: 264476t Determination of the electric dipole moment of krypton hydride ion (KrH⁺). Linnartz, Harold; Havenith, Martina; Zwart, Erik; Meerts, W. Leo; Ter Meulen, J. J. (Dep. Mol. Laser Phys., Univ. Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 153(1-2), 710-17 (Eng). By measuring the isotope shifts of the rotational *g*-factors of different isotopic species the elec. dipole moment of the mol. ion KrH⁺ was detd. For that purpose the Zeeman effect was studied of the $J = 1 \leftarrow 0$ transition of KrH⁺ at 494.5 GHz and the $J = 2 \leftarrow 1$ transition of KrD⁺ at 503 GHz. In a magnetic field of 4.950 T the rotational transition splits into two $\Delta M = \pm 1$ components, resulting in splittings of approx. 41.8 MHz (KrH⁺) and 21.1 MHz (KrD⁺). There is a major influence of the zero-point vibrations on the exptl. detd. elec. dipole moment, which results in an uncertainty of the interpretation of the exptl. data. The ions were generated in a modified anomalous discharge placed in a superconducting magnet. The transitions were obsd. by direct absorption of the harmonics of a 70-GHz klystron, using the tunable FIR sideband spectrometer at Nijmegen University.

(14)

C. A. 1992, 116, N26

K_2H^+

1993

Lundell Jan, Nieminen
Janne, et al.

Chem. Phys. Lett. 1993,
208 (3-4), 247-55.

Ze, We,
meop.
pacrim

( cer. ArH^+ ; III)

KrH⁺

1994

122: 39344c Numerical calculation of the ground-state potential energy function of KrH⁺ from spectroscopic data. Surkus, A. (Fizikos Katedra, SPI, Siauliai, Lithuania 5419). *Spectrochim. Acta, Part A* 1994, 50A(14), 2391-3 (Eng). The sufficiently simple method of solving the inverse spectroscopic problem based on the fitting of the generalized potential energy function to the measured spectrum is applied to the ground state of ⁸⁴KrH⁺. The fitting is performed by numerically solving the one-dimensional Schroedinger equation.

номер.
книжки
оценки
ком.стел

С.А. 1995, 122, N 4

KM⁺

[oeu. 38020]

1995

Ze, Z, De

Vi,

map.

pacrēm

Jan Lundell,

J. Mol. Struct., 1995,

355, 291-297.

KrH⁺

1996

125: 124293s Optimization approach to solution of the inverse spectroscopic problem for diatomic molecules: numerical calculations of the potential function of $X^1\Sigma^+$ state of KrH^+ . Surkus, A. (Siauliai Pedagogical Inst., Siauliai, Lithuania). *Liet. Fiz. Z.* 1996, 36(1), 16-21 (Russ). A fully quantal method of solving the inverse spectroscopic problem for diat. mols. is proposed. The method uses a previously suggested generalized potential energy function (GPEF) for representation of the Born-Oppenheimer diat. potential. The radial Schroedinger equation in the optimization procedure is solved numerically with the help of the Numerov-Cooley method. Long-range boundary conditions are used to ensure the proper long-range behavior of the potential. The method is applied to the ground state of KrH^+ . Vibrational-rotational (IR) spectroscopic data (total 291 lines belonging to five isotopomers of KrH^+) are reduced to the Born-Oppenheimer potential. The obtained GPEF reproduces the spectra within the exptl. errors of measurement, has qual. correct $-R^{-4}$ long-range behavior, and reproduces the exptl. value of disocn. energy and long-range induction coeff. C_4 . The advantages of the proposed method are discussed.

no met. cal.

gs - ucl

$X^1\Sigma^+$ geom.

meop.

pacem

C.A. 1996, 125, n10

KrH

1997

Jungen C.H., Roche A.L.

интерпретация
от

Philos. Trans. R. Soc.
London, Ser. A 1997,

очк. соотв.
до которых
приведены

355 (1729), 1481-1506.

KrH⁺

1997

127: 269617b The pure rotational spectra of ⁸⁴KrH⁺ and ⁸⁶KrH⁺. Linnartz, H.; Zink, L. R.; Evenson, K. M. (Inst. für Physikalische Chem., Univ. Basel, CH-4056 Basel, Switz.). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 184(1), 56-59 (Eng), Academic. Rotational absorption spectra of the Kr hydride ion in its ground electronic and vibrational state were measured with tunable far-IR radiation. These accurate frequency measurements det. the rotational consts. B, D, and H, and yield transition frequencies accurate to 40 kHz (1σ). By combining the new results with the former microwave data on several isotopic forms of ⁸⁴KrD⁺ a Dunham anal. can be performed, yielding accurate information on the Born-Oppenheimer breakdown parameters.

micro fra-
ham. Chem.,
Br, Dr, Hv

C. A. 1997, 127, N 19

$^{82}\text{KrD}^+$

1998

$^{82}\text{KrH}^+$

$n = 82, 84, 86$

Prans.
Cherny

129: 142027v Tunable far-infrared spectroscopy of $^{82}\text{KrD}^+$, $^{84}\text{KrD}^+$, $^{86}\text{KrD}^+$, and $^{82}\text{KrH}^+$. Odashima, Hitoshi; Matsushima, Fusakazu; Kozato, Atsushi; Tsunekawa, Shozo; Takagi, Kojiro; Linnartz, Harold (Department Physics, Toyama University, Toyama, Japan 930-8555). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 190(1), 107-111 (Eng), Academic Press. Pure rotational spectra of isotopic species of protonated Kr $^{82}\text{KrD}^+$, $^{84}\text{KrD}^+$, $^{86}\text{KrD}^+$, and $^{82}\text{KrH}^+$ were obsd. at 0.75-3.5 THz, using a tunable far-IR radiation source. Rotational parameters B, D, and H of these mol. ions were detd. By analyzing the obsd. frequencies with the previous data on all the isotopic species, the mass independent Dunham parameters U_{kl} , Δ_{kl}^{Kr} , and Δ_{kl}^{H} have improved. (c) 1998 Academic Press.

C.A. 1998, 129, N 11

$KrH^+ (X^1\Sigma^+)$

2000

135: 279571m Reduction of spectra to effective Hamiltonian parameters: $X^1\Sigma^+$ state of KrH^+ . Surkus, A. (Department of Physics, Siauliai University, Siauliai, Lithuania 5400). *Lith. J. Phys.* 2000, 40(6), 451-453 (Eng); FISICA. The redn. of spectral data for KrH^+ in the ground electronic state is presented. Numerous spectroscopic data on KrH^+ may be reduced to several parameters of an effective Hamiltonian contg. the Born-Oppenheimer potential energy function (PEF). An effective Hamiltonian for the $X^1\Sigma^+$ state of KrH^+ contg. radial functions of $V(R)$ and $V'(R)$ and $\alpha(R)$ with the same parameters was reproduced. The generalized PEF (GPEF) with parameters (Born-Oppenheimer potential) reproduces the exptl. value of dissocn. energy and the value of long-range induction (coeff. C_4 and has a correct R^{-4} long-range behavior.