

K_α-He

A. P., Do (He_2^+ ; Ne_2^+ ; Ar_2^+ ; Kr_2^+ , 1963
 He_2^+ , $HeKr^+$; $NeKr^+$; ~~Ar~~ $ArKr^+$,
 $KrKr^+$) XI 2062

Munson M. S. B. Franklin J. L.,
Field F. H., J. Phys. Chem., 1963,
67, N7, 1542-48.

a mass spectrometric study of
homonuclear and heteronuclear
rare gas molecule ions

10

Есть оригинал

40213.8401

TE, Ph, MGU

$He^+ + Kr$

28841

1973

1714

Massey Harrie.

Atom-atom and atom-ion collisions. IV.

Inelastic collisions.

"Contemp. Phys.", 1973, 14, N 6, 497-512

(англ.) 0043

025 028- 0 3 0

ВИНИТИ

Некр⁺

1974.

Ерфеевкова Л. Я.

и др.

параметры: «Оптика и светотехника»
Взрыв. 1974, 36 (1), 61-68

(сер. Ли-интерн; III)

40925.87001
TC, Ch, Ph, MGU

Некр

40892

1974

(науч. крив.) * 7

5-6427

Kim Yung Sik, Gordon R.G.

Unified theory for the intermolecular forces between closed shell atoms and ions.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 1, 1-16

(англ.)

0199

162 165

ВИНИТИ

-19-

50627.2434

Ch, Ph, TC, MGU

40892

He-K α

1975

4154

Tanaka Y., Yoshino K., Freeman D.E.

Emission spectra of heteronuclear
diatomic rare gas positive ions.

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N 11, 4484-
4496

(англ.) 0396 пик

370 374

ВИНИТИ

He + Kr

omnium 5504

1977

Altpeter R, et al.

noimms.
byaumo. J. Chem. Phys., 1977,
67, 836-37

Potentials with bends
and humps ● " "

He-Ke

1977

Ne-Ke

Ar-Ke

Kr-Ke

15 Б100. Простая теоретическая модель для потенциала Ван-дер-Ваальса при средних расстояниях. I. Сферически симметричные потенциалы. Tang K. T., Toennies J. P. A simple theoretical model for the van der Waals potential at intermediate distances. I. Spherically symmetric potentials. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 4, 1496—1506 (англ.)

Обсуждены разные подходы к определению зависимости потенциалов (Пт) межатомного взаимодействия от межъядерного расстояния R и различные формы таких Пт. Для лучшего описания межатомного взаимодействия предложено дополнить модифицированный Пт

потенциал
взаимод.

ИИЯ
И бел
ДИМ

45

Li + ин. газ

Na + ин. газ

H + ин. газ

X. 1977N15

Букингема двумя членами, учитывающими правильное поведение дисперсионных членов точного Пт в области средних R . Первый член исправляет ошибку, возникающую вследствие того, что асимптотич. разложение по обратным степеням R обрывается не на самом малом члене, а второй член учитывает перекрывание электронных волновых функций. Эта поправка получена из полуклассич. модели Друде. Окончательная формула для Пт содержит 7 параметров, из к-рых существенны лишь 5. Все параметры можно получить из известных асимптотич. параметров, характеризующих взаимодействие атомов и из атомных св-в. Рассчитаны и сравнены с результатами др. расчетов и эксперим. данными положения и глубины минимумов Пт взаимодействия атомов инертных газов (He, Ne, Ar, Kr) друг с другом, с атомами щел. металлов (Li, Na) и с атомом водорода. Отмечено очень хорошее совпадение рассчитанных потенциальных кривых с наиболее точными эксперим. данными, в частности для системы $Ar + Ar$ отклонения не превышают 3%. Предложенный Пт использован для вычисления параметров Борна — Майера из эксперим. данных. Отмечено, что он может быть применен и для описания взаимодействия атомов с двухатомными молекулами. В. Б. Павлов-Вереvкин

He-Kr

номер 8627

1979

номер.
взаимог.

Waldman M., et al

J. Chem. Phys., 1979
71 (3), 1325-39.

He Kr

ammuck 9295

1980

Klemperer W.

обзор
ссылки
данные

J. Mol. Struct., 1980, 59,
161-176.



(ссыл. №2; III)

MeKr

lom. 17432

1983

Dehmer P. M.,

Ридберг.
Состоян;
До

Comments Atom. and
Mol. Phys., 1983, 13, N5,
205-227.

HeKz

1984

Murley Philip,
Knowles David B., et al.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt 2, 80,
N11, 1349-1361.

(Ser. He₂; III)

ПОИСК-
ЦИКАЛЬ
ОСНОВ.
СОСТАВ.

HeKz

1984

Yoshino k.

Тюнкю кэнкю, Бунко

спектр,

кенкю, ф. Spectroscop.

ст. п.

Soc. Jap., 1984, 33, N3,
157 - 166.

●
(см. Ar₂; III)

KrHe

OM. 27 146, 27411 1987

23 Б1029. Релятивистский расчет методом конфигурационного взаимодействия электронных состояний KrHe^+ . Relativistic configuration interaction calculations for electronic states of KrHe^+ . Balasubramanian K., Liao M. Z., Lin S. H. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 1, 49—54 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые электронных состояний $^2\Pi_{3/2}$, $^2\Pi_{1/2}$, $^2\Sigma^+$, $B^2\Sigma^+$, $C^2\Sigma^+$ и $D^2\Pi$ иона KrHe релятивистским методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом спин-орбитального взаимодействия; для Kr использован релятивистский основной псевдопотенциал. Базис слейтеровских ф-ций включал наборы $4s$, $4s'$, $5s$, $4p$, $4p'$, $5p$, $4d$ для валентной оболочки Kr и $1s$, $1s'$, $2p$ для He. Для рассмотренных состояний (за исключением отталкиват. состояния $D^2\Pi$) предсказаны спектроскопич. постоянные. Наблюдавшиеся полосы в спектре испускания KrHe^+ (Такака Y. и др. «J. Chem. Phys.», 1975, 62, 4484) отнесены к переходам $B^2\Sigma^+ \leftarrow ^2\Sigma_{1/2}^+$ и $B^2\Sigma^+ \leftarrow ^2\Pi_{1/2}$. Полученные на основе дальнедействующей части потенциальных кривых поля-

М.П.

(4)
A

X. 1987, 19, № 23

ризуемости и энергии переходов атомов хорошо согла-
суются с эксперим. данными.

А. А. Сафонов



KrHe⁺

От. 2746, От. 27411

1987

11 Д54. Релятивистские расчеты электронных состояний KrHe⁺ методом конфигурационного взаимодействия. Relativistic configuration interaction calculations for electronic states of KrHe⁺. Balasubramanian K., Liao M. Z., Lin S. H. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 138, № 1, 49—54 (англ.)

Релятивистские расчеты методом конфигурац. взаимодействия выполнены для ряда электронных состояний (²Π_{3/2}, ²Π_{1/2}, ²Σ⁺, B²Σ⁺, C²Σ⁺, D²Π) молекулярного иона KrHe⁺. Для расчетов методом конфигурац. взаимодействия использованы молекулярные орбитали, полученные в рамках метода ССП при использовании базиса из слэтеровских ф-ций и эффективный остовный потенциал, учитывающий релятив. эффекты. В рамках метода конфигурац. взаимодействия при расчете состояний различной симметрии учитывалось от ~2000 до 10 000 конфигураций. Получены потенц. кривые и спектроскопич. постоянные для изученных состояний. Для ряда состояний значения спектроскопич. постоянных предсказаны впервые.

Е. А. Ж.

М.П.

ср. 1987, 18, N 11

KrHe⁺ OT. 27146, Om. 27411

1987

107. Relativistic configuration interaction calculations for electronic states of krypton-helium ion (1+) (KrHe⁺). Balasubramanian, K.; Liao, M. Z.; Lin, S. H. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 138(1) 49-54 (Eng). Relativistic CI calcs. are carried out on the $^1\Pi_g$, $^3\Pi_g$, $^3\Sigma^+$, $^1\Sigma^+$ and $D^2\Pi$ electronic states of KrHe⁺. These calcs. provide interaction potentials for K⁺-He as well as Kr⁺He⁺ systems. Spectroscopic properties and potential energy curves of many electronic states are predicted which are yet to be obsd.

($2^1\Pi_{3/2, 1/2}$),

$2^3\Sigma^+$, $2^1\Sigma^+$,

$2^3\Sigma^+$, $2^1\Pi$)

M.N., nomenus xp.

C.A. 1987, 107, N16

He-Kr

1987

Pathak R.K.,
Thakkar A.J.

u.n. J. Chem. Phys., 1987,
87, N4, 2186 - 2190.

(See \bullet He-He; iii)

He K α

1988

Danielson Laurie J.,
Keil Mark.

u. n.

J. Chem. Phys., 1988,
88, N2, 857-870.

( Ceo, He A α ; III)

MeKr

(DM. 30 003)

1988

Krauss M., Regan R. M.
et al.

теорет.
расчет
спектр.
взаимог.

J. Phys. Chem., 1988,
92, N 15, 4329-4333.

ReKr

(DM 35862 a")

1991

Keil et al., Danielson L. J.,

J. Chem. Phys. 1991, 94, 1,
296-309.

On obtaining interatomic potentials from
fits to experimental data. ● multiproperty

HeKr⁺

1993

Carrington A., Leach Ch. A.,
et al.

(146 correct) Chem. Phys. Lett., 1993,
212 (5), 473-9

(coll. HeKr⁺, III)

He Kr⁺

1996

(126: 178265y Microwave spectroscopy and interaction potential of the long-range He-Kr⁺ ion: An example of Hund's case (e). Carrington, Alan; Pyne, christopher H.; Shaw, Andrew M.; Taylor, Susie M.; Hutson, Jeremy M.; Law, Mark M. (Department Chemistry, University Southampton, Hampshire, UK SO17 1BJ). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(19), 8602-8614 (Eng), American Institute of Physics. The authors obsd. a microwave spectrum of the HeKr⁺ ion in which all of the obsd. levels lie within a few cm⁻¹ of either the 1st or 2nd dissocn. limit. The authors use an ion beam technique in which HeKr⁺ ions, formed by electron impact, are mass analyzed. Passage of the ion beam through an elec. field lens results in selective fragmentation of energy levels lying close to dissocn. Kr⁺ ions formed in the lens are sepd. from all other ions by an electrostatic analyzer, and are detected with an electron multiplier. Microwave radiation induces transitions which result in population transfer and produce detected changes in the elec. field-induced Kr⁺ fragment ion current. Addnl. transitions were detected by a microwave-microwave double resonance method, and the authors have also made extensive use of the Zeeman effects produced by small applied coaxial magnetic fields to identify the J quantum nos. of the levels involved. Coupled channel calcns. of the bound states of the He-Kr⁺ ion are carried out, fully including all the couplings between different electronic states correlating with He+Kr⁺ (²P_{3/2} and ²P_{1/2}). The calcns. allow the spectra to be assigned to pure rotational transitions involving

(46 cmekmp)

C. A. 1997, 126, N 13

levels in the X, A₁, and A₂ states that lie within 2.5 cm⁻¹ of the disson. limits. Because of a systematic near degeneracy between vibrational levels in the X and A₁ states, the long-range He-Kr⁺ ion provides a very good example of Hund's case (e) in the form introduced by Mulliken, in which there are no projection quantum nos. onto the interat. axis. Mulliken's case (e) is rather different from the Rydberg case (e) described by Lefebvre-Brion, and this is the 1st time that Mulliken's case (e) was obsd. The spectra allow the interaction potential for He-Kr⁺ to be detd. accurately, for the 1st time, by least-squares fitting of potential parameters to the exptl. line frequencies and g factors. The resulting interaction potential (designated MAL1) is compared with that previously detd. for He-Ar⁺: the He-Kr⁺ potential is significantly shallower, because the long-range ion-induced dipole C₄ coeff. is the same for the two systems but the larger Kr⁺ ion prevents the He atom approaching as close.

I_2-Kr

1997

128: 160374q (2+1) REMPI spectra of the I_2-Kr and I_2-N_2 van der Waals complexes and the (2+1') ZEKE-PFI photoelectron spectrum of I_2^+-Kr . Beattie, David A.; Cockett, Martin C. R.; Lawley, Kenneth P.; Donovan, Robert J. (Department of Chemistry, The University of Edinburgh, UK). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1997, 93(24), 4245-4251 (Eng), Royal Society of Chemistry. The authors present the (2+1) mass-resolved resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI) spectrum of the $[^2\Pi_{3/2}]_c5d; \Omega_g (\Omega=0,2)$ Rydberg states of the I_2-Kr van der Waals complex. Anharmonic progressions in the I_2-Kr van der Waals stretching mode have been obsd. with ω_e values of 49 ± 2 and 47 ± 2 cm^{-1} for the $[^2\Pi_{3/2}]_c5d; \Omega=0_g$ and $[^2\Pi_{3/2}]_c5d; \Omega=2_g$ states, resp. The $[^2\Pi_{3/2}]_c5d; \Omega=2_g$ state of I_2-Kr has been used as an intermediate in a two-color (2+1') zero kinetic energy pulsed-field ionization (ZEKE-PFI) photoelectron study of the $[zX\tilde{t}]^2\Pi_{3/2,g}$ state of the I_2^+-Kr ionic complex. The adiabatic ionization energy was detd. to be 74248 ± 3 cm^{-1} . An anharmonic vibrational progression in the I_2^+-Kr van der Waals stretching mode was obsd. giving a value of $\omega_e = 55 \pm 2$ cm^{-1} for the $[zX\tilde{t}]^2\Pi_{3/2,g}$ state of the complex. The $[^2\Pi_{1/2}]_c6s; \Omega=1_g$ Rydberg state of the I_2-N_2 van der Waals complex has also been obsd. using REMPI spectroscopy. Anharmonic progressions in the I_2-N_2 van der Waals stretching mode have been obsd. with $\omega_e = 71 \pm 2$ cm^{-1} . Comparisons are made between the spectroscopic data obtained for the Rydberg states of I_2-Kr and I_2-N_2 with the analogous Rydberg states in I_2-Ar .

REMPI
chemy,
M.N, We

(#) I_2-N_2

P.A. 1998

128, N 13

$I_2^+ - Kr$

[Om. 39324]

1997

David A. Beattie, Martin
C.R. Cockett et al.,

M.H.
J. Chem. Soc., Faraday
Trans., 1997, 93 (24),

4245-51.

