

He - O

50124.8714
Ch, Ph, TC, MGU

96201 02

1974

$\text{He}^+ - \text{O}_2$

* 4-7972

Harris H.H., Crowley M.G., Leventhal J.J.

Luminescence ■ from $\text{He}^+ - \text{O}_2$ collisions
at low energy.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 29, N 4, 540-546

(англ.)

0288 пчч

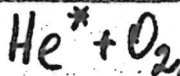
263 263

0 280

ВИНИТИ

40906.1879

TC, Ch



40892

024

1974

4-6067

West W.P., Cook T.B., Dunning F.B.,
Rundel R.D., Stebbing R.F. Chemiionization of O_2 molecules by helium metastable atoms.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 12, 5126-5127
 (англ.)

0185

152 156

178

ВИНИТИ

70331.313

Ph, Ch, TC

76189

 He_2O

1977

*B-17529

Fereday R.J., Sinha Shyama P..

Molecular orbital calculations on helium
oxides and oxyfluoride. "J. chim. phys.
et phys.-chim. biol.", 1977, 74, № 1, 87-91
(англ., рез. франц.)

0042

ФНЦ

ВНИИТИ

810 813 814 815

$O_2 X$

X-атом инертного
газа

1983

1 B1161. Спектр тонкой структуры вандерваальсовых молекул O_2 -благородный газ. Fine-structure spectrum of O_2 -rare gas van der Waals molecules. van der Avoird A. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 3, 1170—1175 (англ.)

Предложена простая модель с решаемыми аналитически уравнениями для колебательно-вращательно-спиновых состояний комплексов $O_2 X$ (X — атом инертного газа), — позволяющая предсказывать ТС спектра. Показано, что хотя в комплексе $O_2 Ag$ связь $O_2—Ag$ является слабой вандерваальсовской, спектр его сильно отличается от спектра O_2 . Различие объяснено частичным торможением свободного вращения O_2 вследствие влияния анизотропного Пт взаимодействия в $O_2 Ag$. Введение анизотропии взаимодействия приводит к тому, что хорошо определенным квантовым числом является уже проекция $|K| = |M_N + M_S|$ углового момента $I = N + S$ O_2 на ось $O_2 Ag$, а не общего углового момента I двухатомного фрагмента O_2 . Рассчитанный спектр ТС ти-

спектр

X. 1984, 19, N1

пичен для всех T -образных комплексов O_2X . В случае линейной конфигурации, если она может реализоваться, предложенная модель позволяет легко рассчитать соответствующий спектр. Учет поправок второго порядка в величину расщепления энергетич. уровней приводит к колич. согласию модельного спектра с данными точных динамич. расчетов, проведенных с использованием эмпирич. анизотропных P_t для O_2Ag . Проанализирована зависимость частот рассчитанных переходов от средн. значения анизотропного потенциала $V_2 = \langle V_2(R) \rangle_0$ и значения вращательной постоянной $B = \langle B(R) \rangle_0 = \langle R^{-2} \rangle_0 / 2\mu$. Указано, что предложенная модель хорошо описывает экспериментально полученный спектр ТС O_2Ag .

С. Б. Осин

O₂-He

от 18829

1984

9 Л150. Влияние анизотропии потенциала на рассчитанную тонкую структуру спектра O₂He. Effects of the potential anisotropy on the calculated fine-structure spectrum O₂He. Tennyson Jonathan, Van der Avoird A d. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 49—53 (англ.)

С использованием простой аналитич. модели рассчитаны уровни спин-колебательно-вращательной энергии молекулярного комплекса O₂=He, зеemanовское расщепление уровней и частоты переходов; результаты расчета приведены в табл. При вычислениях использован эмпирический анизотропный потенциал взаимодействия O₂ с атомом He, представленный в виде ряда по полиномам Лежандра от величины $\cos(\nu)$, где ν — угол, образованный осью молекулы и вектором, соединяющим центры взаимодействующих частиц. Найдено, что величина расщепления в основном определяется составляющей потенциала, пропорциональной полиному второй степени. Член, пропорциональный полиному четвертой степени, вносит поправку, не превышающую 10%; остальные члены приводят к поправке, не превышающей 1%. Рассмотрены возможные источники погрешности полученных результатов. Библи. 14. Н. Ф.

расчет E,
спектр

ф. 1984, 18,
№ 9

O_2He

Om. 18829 1984

13 Б1027. Влияние анизотропии потенциала на рассчитанную тонкую структуру спектра O_2He . Effects of the potential anisotropy on the calculated fine-structure spectrum of O_2He . Tennyson Jonathan, Avoird Ad van der. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 49—53 (англ.)

Рассчитана тонкая структура спектра и зеемановские расщепления для вандерваальсовой молекулы H_2He . Модельный гамильтониан не учитывал колебаний O_2 и отличий постоянных тонкой структуры O_2He от постоянных O_2 . Использована эмпирич. потенциальная поверхность, представленная разложением по полиномам Лежандра от переменной, задающей ориентацию He относительно молекулы O_2 . Основное внимание уделено роли высших членов разложения потенциала, т. е. учету анизотропии. Сделан вывод, что основной вклад при учете анизотропии вносит первый член разложения, однако, следующее слагаемое (V_4) может изменить зеемановское расщепление на 10%. А. В. Немухин

расчет м.п.

x. 1984, 19, № 13

O₂He

[Om. 18829] 1984

100: 128954q Effects of the potential anisotropy on the calculated fine-structure spectrum of molecular oxygen-helium complex (O₂He). Tennyson, Jonathan; Van der Avoird, Ad (Daresbury Lab., SERC, Daresbury/Warrington/Cheshire, UK WA4 4AD). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 105(1), 49-53 (Eng). Rovibrational-spin calcs. were performed on the O₂-He van der Waals mol. using a recent empirical potential-energy surface. All the bound states of the complex are presented, as are the fine-structure spectrum and weak-field Zeeman splittings of the low-lying states. The V₄ anisotropic term sometimes has a significant (~10%) effect, but that of the higher anisotropic terms is negligible (<1%).

meop. pacem
romeris. q-uy

C.A. 1984, 100, N16

He-O₂

от 20 235 1984

7 Б1110. Неэмпирические расчеты поверхности потенциальной энергии He—O₂. Хартри-фоковская нестабильность O₂. Ab initio calculations on the He—O₂ potential energy surface. Hartree—Fock instability of O₂. van Lenthe J. H., van Duijneveldt F. B. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 3168—3173 (англ.)

Рассчитаны фрагменты Пв потенциальной энергии для взаимодействия He с O₂ (³Σ_g⁻). Отмечено, что метод Хартри-Фока (одноконфигурац. приближение ССП) приводит к симметрично-нестабильным решениям для изолированной молекулы O₂. Симметричная нестабильность устраняется переходом к двухконфигурац. волновой функции, смешивающей почти вырожденные конфигурации с π-орбитальными частями π_u⁴π_g⁴ и π_u²π_g⁴. В связи с этим расчеты энергии системы He—O₂ выполнены в приближении МК ССП. К энергиям, полученным в приближении ССП, добавлены поправки на дисперсионное взаимодействие, вычисленные в рамках теории возмущений 2-го порядка по хартри-фоковским

расчет по-
верхн. потенц.
энергии

Х. 1985, 19, № 7

функциям изолированных подсистем. В расчетах использованы базисные наборы расширенного типа (более, чем двухэкспонентные) с добавлением поляризац. орбиталей d -типа для кислорода и p -типа для гелия. Введены поправки на базисные суперпозиц. ошибки. Энергия взаимодействия приведена для 5 значений угла между межъядерной осью O_2 и направлением из центра O_2 до He и 6 расстояний от He до центра O_2 от 4 до 12 ат. ед. Найденные точки на потенциальной Пв аппроксимированы разложениями по четным степеням полиномов Лежандра, приведены графики зависимостей коэф. разложений от расстояния между He и O_2 . Найдено, что на потенциальной поверхности имеются 2 минимума (при углах 0° и 90°), разделенные потенциальным барьером. Эксперим. данные свидетельствуют об отсутствии барьера. А. В. Нёмухин



He-O₂

От 20 235 1984

3 Д128. Неэмпирические расчеты поверхности потенциальной энергии He—O₂. Хартри-фоковская неустойчивость для O₂. Ab initio calculations on the He—O₂ potential energy surface. Hartree—Fock instability of O₂. Van Lenthe J. H., Van Duijneveldt F. B. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 3168—3173 (англ.)

Неэмпирическим методом ССО МО ЛКАО в многоконфигурац. приближении и с учетом энергии дисперсионного взаимодействия рассчитано 58 структур системы He—O₂ при фиксированном расстоянии O—O, равном 2,2819 а. ед. Учитывалась поправка на суперпозицию базиса. Отмечено, что хартри-фоковская волн. функция O₂ неустойчива по отношению к нарушению симметрии $D_{\infty h}$, что делает необходимым описание его Ω -системы методом МК ССП. На поверхности потенц. энергии обнаружены минимумы для углов между осью O₂ и линией, соединяющей атом He с серединой связи O—O, равные 90° и 0° с максимумом ~47°. Библ. 22.

В. Л. Лебедев

расчет
поверхности
потенц. энер.

ср. 1985, 18, № 3

He - O₂

(Om. 20 235) 1984

/ 101: 198517u Ab initio calculations on the helium-molecular oxygen potential energy surface. Hartree-Fock instability of molecular oxygen. Van Lenthe, J. H.; Van Duijneveldt, F. B. (Theor. Chem. Group, Univ. Utrecht, Utrecht, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(7), 3168-73 (Eng). The interaction energy between He and O₂ (³Σ_g⁻) was obtained for five angles and eight distances, keeping the O-O distance fixed. The energies were calcd. at the Hartree-Fock and MC-SCF levels, cor. for basis-set superposition errors and augmented by an est. of the dispersion energy from second-order perturbation theory. The Hartree-Fock wave function for O₂ was unstable with respect to breaking the D_{∞h} symmetry. This makes a multiconfigurational description of the O₂ π system essential to obtain uniform reliability at all angles. The MC-SCF + dispersion surface shows min. at 90° (-0.17 millihartree [mh]) and 0° (-0.16 mh), and a barrier in between at 47° (-0.13 mh).

(ab initio
paper)

C.A. 1984, 101, N 22

$O_2 - He$

(Дм. 23028)

1986

11 Б1090. Расчеты поверхностей потенциальной
энергии систем с открытыми оболочками в приближе-
нии связанных электронных пар (СЭП). V. Вандер-
ваальсов потенциал для $O_2 - He$. CEPA calculations of
potential energy surfaces for open-shell systems. V. The
 $O_2 - He$ van der Waals Potential. Jaquet R., Staemmler V. «Chem. Phys.», 1986, 101, № 2, 243—257 (англ.)

Рассчитаны фрагменты Пв потенциальной энергии
основного состояния системы $O_2 - He$, для к-рой харак-
терно наличие неглубокого минимума (~ 2 мэВ) в ван-
дерваальсовой обл. (при расстояниях между подси-
стемами более $3 \text{ \AA}$). Использовано приближение свя-
занных электронных пар с учетом всех одно- и дву-
кратных возбуждений по отношению к хартри-фоков-
ской волновой ф-ции. Базисы составлены на основе

расчет
поверхностей
потенц.
энергии

Х. 1986, 19, № 11

трехэкспонентных наборов с добавлением диффузных и поляризац. орбиталей. С полученными энергиями взаимодействия методом внезапных возмущений бесконечного порядка решена задача о рассеянии He на O₂. Отмечено, что x-ки эксперим. сечений рассеяния воспроизводятся достаточно хорошо. А. В. Немухин

O₂ He

OM - 23 028

1986

(Re, notes
поверх.)

/ 104: 75430q CEPA calculations of potential energy surfaces for open-shell systems. V. The molecular oxygen-helium van der Waals potential. Jaquet, R.; Staemmler, V. (Abt. Chem., Ruhr-Univ. Bochum, D-4630 Bochum, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1986, 101(2), 243-57 (Eng). Ab-initio calcs. were done on the van der Waals interaction between O₂(X ³Σ_g⁻) and He(1¹S). CEPA was used, which starts from a RHF wave function and includes all singly and doubly substituted configurations. Different Gaussian basis set were employed; the largest one consisted of a triple-zeta,*s,p*-set augmented by diffuse *s,p*-functions on O₂ and He and by various sets of polarization functions (2*d1f* on O, 3*p1d* on He). The different contributions to the total interaction energy (SCF repulsion, repulsion due to the change in the intrat. (He) or intramol. (O₂) correlation energy, dispersion) were analyzed sep. The min. of the potential were calcd. to be: R_m = 3.28 Å, ε = 2.08 meV (C_{2v}), and R_m = 3.81 Å, ε = 1.89 meV (C_{∞v}). Extrapolations to infinite basis size including the effects of triple substitutions yielded a potential, which was in close agreement with the exptl. one. Infinite-order-sudden calcs. for total differential cross sections were done; the results nearly reproduced the exptl. cross sections.

C.A. 1986, 104, N10

He_2O^{2+}

(Dm. 24564)

1986

Koch W., Frenking G.,

J. Chem. Soc. Chem.

Commun., 1986, N14,

1095-1096.

структура,
устойчив,
теорет.
исследов.

He-O₂

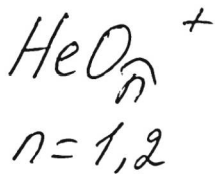
1987

Gianturco F. A.,
Palma A., et al.

теор.
расчет
результаты.

J. Chem. Phys. 1987,
87 (2), 1054-61.

(ср. He-CO; III)



$$n=1,2$$

1989

Frenking G.,

Koch W., et al.

J. Phys. Chem. 1989,
93, C. 3397-3410.

временные
 константы
 распада

(see  HeLi_n^+ , III)

He₂O₂⁺

[om. 34757]

1990

Frenking G., Koch W., et al.,

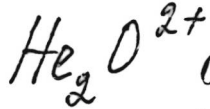
структ.
стабильн.

J. Amer. Chem. Soc., 1990,
112, N 11, 4240-4256.

и св. 36
теор.
расчет

Light Noble Gas Chemistry:
Structures, Stabilities, and
Bonding ● of Helium Neon

and Argon Compounds.



1990

Frenking Bernot,
Koch Wolfram et al.

стабиль-
ность и
геометрия,
расчет.

J. Am. Chem. Soc. 1990,
112 (11), 4240-4256.



HeO_3^+

1994

120: 280714g Ab initio studies of complexes of ozone with some positive ions. Snyder, G.; Sapse, D. (Queensborough Community College of CUNY, Department of Chemistry, Springfield Boulevard and 56th Avenue, Bayside, NY 11364 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 218(4), 372-6 (Eng). Ab-initio calcs. using the 6-31G* and the 6-311G* basis sets were done on HeO_3^+ , LiO_3^+ , and N_2O_3^+ complexes. In the HeO_3^+ and N_2O_3^+ complexes, the pos. charge is on the oxygen, and the complexes are not bound with respect to dissociation into He or N_2 and O_3^+ . In the LiO_3^+ complex, the pos. charge is on lithium and the complex is strongly bound with respect to the Li^+ and O_3 .

ab initio
pacem

(+2) ~~Li~~ LiO_3^+ , N_2O_3^+

C.A. 1994, 120, 122

HeO²⁺

1995

124: 158880a Lifetimes of the metastable $X^3\Sigma^-$ and $a^1\Delta$ states of the HeO^{2+} ion. Aver'yanov, A. S.; Khait, Yu. G. (Ross. Nauchnyi Tsentr "Prikladnaya Khimiya", St. Petersburg, Russia 197198). *Opt. Spektrosk.* 1995, 79(4), 595-600 (Russ). The possibility of HeO^{2+} existence was studied. Spectroscopic consts. and lifetimes were detd. using quantum chem. and quantum mech. methods for vibrational levels in 2 of its lower electronic states $X^3\Sigma^-$ and $a^1\Delta$. The lifetime of the zero-point level of the $X^3\Sigma^-$ is 2×10^{-7} s, and that of its first vibrational level is 7×10^{-10} . The lifetimes of the analogous levels of the $a^1\Delta$ state are 1.7×10^{-3} and 2×10^{-3} resp.; this indicates that exptl. observation is more likely in the excited states due to the longer lifetimes.

($X^3\Sigma^-$; $a^1\Delta$ - $\tilde{v}$)

C. A. 1996, 124, N12.

1995

F: O₂+*He

P: 3

7Б169. Функции потенциальной энергии и электронно-колебательно-вращательные уровни комплекса O[2]{+}He(X{2}'ΠΠ'). Potential energy functions and bound rovibronic levels of the O[2]+He(X{2}'ΠΠ') complex / Schmelz T., Reinsch E.-A. // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 42. - С. 15580-15586. - Англ. Место хранения ГПТБ

эмпирическим методом с учетом вз-вия конфигураций получены трехмерные ф-ции потенциальных энергий. Показано, что комплекс имеет Т-образную равновесную геометрию с R(O[2]{+}...He)=5,2363 Бор (A'-компонента) и 5,1601 Бор (A"-компонента). Энергии диссоциации получены равными 167,5 см⁻¹ (A') и 194,3 см⁻¹ (A"), а барьеры для перехода в линейное состояние 50,9 см⁻¹ (A') и 77,7 см⁻¹ (A"), соответственно. Исследовано влияние колебательного возбуждения O[2]{+} на колебания с большой амплитудой.

Р. Ж. Х. №7, 1996.

$O_2^+ He$

1995

($X^2\Pi$)

cmp - pa,
Do, meg
panel

123: 238259z Potential Energy Functions and Bound Rovibronic Levels of the O_2^+He ($X^2\Pi$) Complex. Schmelz, T.; Reinsch, E.-A.; Rosmus, P. (Fachbreich Chemie, Universitaet Frankfurt, D-60439 Frankfurt, Germany). *J. Phys. Chem.* 1995, 99(42), 15580-6 (Eng). Three-dimensional potential energy functions were generated for the electronic ground state of the O_2^+He ($X^2\Pi$) complex using highly correlated multireference internally contracted CI (MRCI) and averaged coupled pair functional (ACPF) electronic wave functions. The complex has a T-shaped equil. geometry with $R_e(O_2^+ \cdots He)$ of 5.2363 Bohr (A' component) and 5.1601 Bohr (A'' component). The ACPF calcns. predict the dissocn. energies of 167.5 cm^{-1} (A') and 194.3 cm^{-1} (A'') and the barriers to linearity of 50.9 cm^{-1} (A'), and 77.7 cm^{-1} (A''), resp. The results from both MRCI and ACPF approaches were compared. The rovibronic levels were obtained by a variational approach which includes the rotation-vibration, electron angular momentum, and electron spin coupling effects, but neglects the nuclear spin. Vibronic states with up to 6 bending and 2 stretching quanta excited are bound. Due to the large differences between the shapes of the A' and A'' potentials, large parity splittings (more than 1 cm^{-1} in excited bending levels) were obtained. Also the influence of the vibrational excitation in the O_2^+ fragment on the large amplitude modes was studied.

C.A. 1995, 123, N/8

1996

124: 353225t Ab initio study of the $O_2(\bar{X}^3\Sigma_g^-) + He(^1S)$ van der Waals cluster. Cybulski, Slawomir M.; Burcl, Rudolf; Szczesniak, Malgorzata M.; Chalasinski, Grzegorz (Dep. Chem., Miami Univ., Oxford, OH 45056 USA). *J. Chem. Phys.* 1996, 104(20), 7997-8002 (Eng). Potential energy surface for the $He(^1S) + O_2(X^3\Sigma_g^-)$ interaction is calcd. using the supermol. unrestricted Moeller-Plesset perturbation theory approach and is analyzed via the perturbation theory of intermol. forces. The latter has been generalized to provide a decompn. of the interaction energies into electrostatic, exchange, induction, and dispersion constituents for monomers described by UHF determinants. The global min. occurs for the t-shaped geometry, around $6.0a_0$. The authors' UMP4 est. of the well depth of the global min. is $D_e = 27.7 \text{ cm}^{-1}$. This value is expected to be accurate to within a few percent. The potential energy surface reveals also a local min. for the collinear geometry at about $7.0a_0$. The well depth for the secondary min. is estd. at $D_e = 25.5 \text{ cm}^{-1}$. (UMP4) and is expected to be accurate within a few percent. The min. are sepd. by a barrier of 7.5 cm^{-1} . The energy partitioning reveals that the origin of interaction in this complex is typical for van der Waals clusters involving He. The global min. is detd. by the min. in the exchange repulsion in the direction perpendicular to the O-O bond. The secondary linear min. results from the max. dispersion attraction and enhanced by a slight flattening of the electron d. near the ends of the inter-oxygen axis.

O_2
 $(X^3\Sigma_g^-) + He(^1S)$

нагрев атомов
 кластер

ab initio расч.
 геометрии.
 потенциал, D_e

C. A. 1996, 124, N 26

HeO²⁺

1997

(ab initio
param)

, 126: 298844h Ab initio calculations of the rovibrational states of He₂O²⁺. Hughes, Jason M.; von Nagy-Felsobuki, Ellak I. (Dep. Chem., Univ. Newcastle, Callaghan, 2308 Australia). *THEOCHEM* 1997, 389(1-2), 1-11 (Eng), Elsevier. All electron CCSD(T)/cc-pCVTZ theory was used to calc. the equil. geometry and a 68 point discrete potential energy hypersurface for the dihelium oxene dication He₂O²⁺. The CCSD(T) optimized geometry was of C_{2v} symmetry with an R_{O-H} bond length of 1.168 Å and an included bond angle of 92.6°. An anal. potential function was obtained from this surface using an Ogilvie Pade (4,5) power series expansion, which yielded a $(\chi^2)^{1/2}$ value of 2.810×10^{-5} a.u. The anal. function was then embedded in the Eckart-Watson Hamiltonian, which was solved variationally. Within the anharmonic approxn., the fundamental frequencies for the breathe, bend and asym. stretch vibrations are 1247.3 cm⁻¹, 816.8⁻¹ and 1275.6 cm⁻¹, resp. Using a 560 configuration basis involving products of vibrational eigenfunctions and plus/minus combinations of regular sym.-top rotor functions, the low-lying rovibrational states of the ¹A₁ electronic state of He₂O²⁺ were detd.

C. A. 1997, 126, N 22

He₂O²⁺

1998

теор. расчет
спектр.,
смазаны.

128: 326775y Theoretical study of possible decay channels and lifetime of the metastable triplet state of the He₂O²⁺ ion. Tulub, A. V.; Panin, A. I.; Khait, Yu. G. (Inst. Fiz., St.-Peterburg Gos. Univ., St. Petersburg, Russia 198904). *Opt. Spektrosk.* 1998, 84(1), -35-40 (Russ), MAIK Nauka. Using quantum chem. calcns. the possible existence of the He₂O²⁺ dication is shown with a linear at. configuration in the triplet $1^3\Sigma_g^-$ state. The equil. spacing, vibrational spectra, and an est. for the lifetime at 5×10^2 s.

C.A. 1998, 128, N26

He-O₂ (ab initio paper)

2000

134: 9677u **Three-dimensional ab initio potential energy surface for He-O₂.** Groenenboom, Gerrit C.; Struniewicz, Izabela M. (Institute of Theoretical Chemistry, NSR-Center, University of Nijmegen, 6525 ED Nijmegen, Neth.). *J. Chem. Phys.* **2000**, 113(21), 9562-9566 (Eng), American Institute of Physics. An interaction potential with vibrational coordinate dependence is presented for the He-O₂(X ³Σ_g⁻) van der Waals complex. The interaction is calcd. with the partially spin-restricted open-shell single and double excitation coupled cluster method with perturbative triples [RCCSD(T)] in the supermol. approach, with correction for the basis set superposition error. The augmented correlation consistent polarized triple zeta basis set is used with an addnl. set of bond orbitals. The single ref. configuration method breaks down at an O-O sepn. of $r \approx 3.5 a_0$. No points with $r > 3.1 a_0$ are used in the construction of the potential surface. A high quality 120 parameter fit to 754 ab initio points is presented. Special attention is given to the extn. of the long range coeffs.