

Li₂

1981

4 Л74. Триpletные сателлитные полосы на дальних синих крыльях самоуширенных *D*-линий атомов щелочных металлов. Triplet satellite bands in the very far blue wings of the self-broadened alkali *D* lines. Movre M., Veža D., Pichler G., Niemax K. «Spectral Line Shapes. Proc. 5 Int. Conf., Berlin (West), 7—11 July, 1980». Berlin; New York, 1981, 851—856 (англ.)

спектр

⊗ (74)

ср. 1984, 18,
N 4

Обсуждается механизм образования сателлитных спектральных полос на очень далеких синих крыльях самоуширенных резонансных линий атомов щелочных металлов. Предполагается, что сателлитная структура возникает вследствие наличия максимума в разности потенциалов $C^3\Pi_g - X^3\Sigma_g^+$ образующихся при сравнительно больших плотностях димеров щелочных металлов. Приводятся рассчитанные в данном предположении положения максимумов сателлитных полос для димеров Li_2 , Na_2 , K_2 , Rb_2 и Cs_2 относительно соответствующих *D*-линий. Показано, что синглетная сателлитная структура, существующая для легких атомов, постепенно переходит в полосы, имеющие 3 и 5 максимумов (Rb и Cs) вследствие усиления спин-орбитального взаимодействия.

С. Ч.

Li₂

О. П. Миск 12564 1981

И Д145. Оценка энергии диссоциации щелочных диатомов на основе обобщенного соотношения Линдерберга. Estimation of dissociation energy of alkali diatomics using an extended Linderberg relation. Raina V., Sane K. V., Saxena R. P., Srivastava P. K. «Int. J. Quantum Chem.», 1981, 20, № 4, 807—816 (англ.)

Для молекул Li₂, Na₂, K₂, Cs₂ рассчитаны энергии диссоциации (D) на основе соотношения $D=2(T-S)\beta$, где величина интеграла перекрывания S находилась при экспериментальном межъядерном расстоянии для аналитич. волн. ф-ций валентного электрона, построенных с помощью одной из разновидностей метода квантового дефекта, а резонансный интеграл β вычислялся по обобщенной ф-ле Линдерберга $\beta=K/RdS/dR$ при $K=2,6$. Полученные значения D удовлетворительно согласуются с экспериментальными. Проведен также прямой расчет значений β , и исследована зависимость величины K от R и от квантового дефекта. А. Ф. Шестаков

Do



(73)

ф. 1982, 18, №4.

Li2

qfucker 12564

1981

Do

meep. pacem

/95: 156968u Estimation of dissociation energy of alkali diatomics using an extended Linderberg relation. Raina, V.; Sane, K. V.; Saxena, R. P.; Srivastava, P. K. (Univ. Delhi, Delhi, 110007 India). *Int. J. Quantum Chem.* 1981, 20(4), 807-16 (Eng). The ground state wave function of a model potential consisting of a zero-range square well jointed to a Coulomb tail is used in a two equiv. center problem to evaluate the overlap integral (S) and the resonance integral (β). An extended Linderberg relation of the form $\beta = K/R(dS/dR)$ is generally well obeyed. The extended relation was used within a LCAO framework to obtain dissociation energies of the homonuclear diat. mols. of the alkali atoms. The calcd. results agree with the exptl. data.

☒
(+4)

Na₂, K₂, Rb₂, Cs₂

C.A. 1981, 95, N18.

Li₂

Оттиск 12564 1981

8 Б21. Оценка энергии диссоциации двухатомных молекул щелочных металлов на основе обобщенного соотношения Линдерберга. Raina V., Sane K. V., Saxena R. P., Srivastava P. K. Estimation of dissociation energy of alkali diatomics using an extended Linderberg relation. «Int. J. Quantum Chem.», 1981, 20, № 4, 807—816 (англ.)

Do;

(+3) ^Δ

Проведены оценки энергии диссоциации основных состояний двухатомных молекул щел. металлов Li₂, Na₂, K₂ и Cs₂ на основе модельных представлений. Молекула рассматривается как двухэлектронная система, для которой используется приближение ЛКАО с базисными функциями s-типа, описывающими поведение электрона в поле сферич. потенциальной ямы конечного радиуса и кулоновского потенциала вне ямы. Подобный подход позволяет выразить энергию диссоциации через обменный интеграл β и интеграл перекрывания s. Далее

х. 1982, 19, 48

используется обобщенное соотношение Линдерберга $\beta = (K/R)(dS/dR)$, где R — межъядерное расстояние, а K — параметр. Модель содержит подгоночный параметр a , имеющий смысл квантового дефекта атома и связанный с параметром K обобщенного соотношения Линдерберга. Рассчитанные значения энергий диссоциации согласуются с эксперим. данными.

А. В. Немухин

Li₂

1981

(Zr, Do, Y,

Kb. Mex. packet)

' 95: 157042z The CNDO/BW study of lithium clusters. I. Two-, three-, and four-atomic clusters. Skala, L. (Fac. Math. Phys., Charles Univ., 12116 Prague, Czech.). *Phys. Status Solidi B* 1981, 107(1), 351-7 (Eng). The CNDO/BW (Boyd and Whitehead) method was used for a detailed study of Li₂, Li₃, and Li₄ clusters. The equil. distances between atoms, binding energies, ionization potentials, dipole moments, charges at atoms, and bond orders were investigated for 14 different geometries of the clusters. The most stable geometrical forms are found and compared with available theor. and exptl. results.

⊗
(+2)

Li₃, Li₄



C. A. 1981, 95, N 18.

1981

 Li_2 (кластеры)Электрон-
строение

З Б53. Исследование методом ППДП/БВ кластеров Li. I. Двух-, трех- и четырехатомные кластеры. Skála L. The CNDO/BW study of lithium clusters I. Two-, three-, and four-atomic clusters. «Phys. status solidi», 1981, В 107, № 1, 351—357 (англ., рез. рус.)

Полуэмпирическим методом ППДП/БВ рассчитано электронное строение кластеров Li_2 , Li_3 и Li_4 . Равновесные структуры кластеров и их относит. стабильность определены в результате расчета 14 различных геометрич. конфигураций кластеров. Из анализа данных расчетов следует, что наиболее стабильный кластер Li_3 имеет форму неравностороннего треугольника. Геометрия наиболее стабильного кластера Li_4 соответствует параллелепипеду и может рассматриваться, как конфигурация Li_3 плюс 1 атом Li. В соответствии с эксперим. данными рассчитанный кластер Li_3 является нестабильным. Для наиболее стабильных систем получены на-

ⓧ
+2

X. 1982, 19, N 3.

 Li_3, Li_4

ибольшие порядки связи. Наиболее стабильные кластеры имеют низкосимм. геометрич. конфигурации. Рассчитанная энергия связи Li_4 согласуется с данными др. теор. расчетов. Полученные результаты указывают на то, что крит. ядром в зародышеобразовании кластеров Li_n является Li_2 . Из проведенных расчетов следует, что наиболее стабильные кластеры Li_3 и Li_4 имеют ненулевые дипольные моменты, на основании чего сделан вывод о том, что эксперим. измерения дипольных моментов могут быть решающими для определения геометрии кластеров.

И. А. Тополь.

Li₂

1981

ГД145. Изучение кластеров лития методом ППДП/БВ. Ч. 1. Двух-, трех- и четырехатомные кластеры. The CNDO/BW study of lithium clusters. I. Two-, three-, and four-atomic clusters. Skála L. «Phys. status solidi», 1981, B107, № 1, 351—357 (англ.; рез. рус.)

Метод ППДП/БВ применяется для детального расчета кластеров Li₂, Li₃ и Li₄. Равновесные межатомные расстояния, энергии связи, потенциалы ионизации, дипольные моменты, заряды на атомах и порядки связей рассчитываются для 14 различных геометрий кластеров. Полученные геометрич. формы наивысшей стабильности сравниваются с доступными теоретич. и эксперим. результатами. Резюме

all. n., y

(+2)



sp. 1982, 18, n/.

ommuch 77760

1981

Li₂
Li₃

94:90770u A successful CNDO/BW parametrization for the calculation of lithium clusters. Skala, L. (Fac. Math. Phys., Charles Univ., 12116 Prague, 2 Czech.). *Phys. Status Solidi B* 1981, 103(1), K27-K29 (Eng). The bond length (R), bond energy, and ionization potential (IP) of Li₂, and the equil. lattice const. (effective R value corresponding to the min. in the total energy), the binding energy, and IP of the at. cluster Li₃ were calcd., in good agreement with existing exptl. data, by using the CNDO/BW method (CNDO with Boyd-Whitehead parametrization).

kv. mex.
pакет
(ρ_e, τ_e, T)



C.A. 1571.94 N12

Liz

[omnuch 12083] 1981.

Skála L.

кв. мек.
фракт,
мол. геол.
у. ге. м

Phys. Status Solidi,
1981, B107, 351-57

Y
dia

Ommuck 16302

1981

снелмр
лазерной
присоедн.
guccosuan.
прежде
очн. сост.,
не сохлел
коллаб.
ураму

Stwalley W.C., Verma K.K.,
Rajaei-Rizi A., et al.,

Reprinted from Pro-
ceedings of the Internatio-
nal Conference on La-
ser '81, December 14-18,
1981

ОТЛУСК 12228

1981

Li₂

Спектр
предиссоц.

1 Д322. Модельные расчеты индуцированных магнитным полем возмущений и преддиссоциации ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ вблизи диссоциационного предела. Model calculations of magnetic-field-induced perturbations and predissociations in ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ near dissociation. Uang Yea-Hwang, Ferrante Robert F., Stwalley William C. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 6267—6270 (англ).

Произведены модельные расчеты индуцированных магн. полем возмущений и преддиссоциаций (резонансов в рассеянии) для ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ вблизи резонанса. Расщепление ${}^3\Sigma_u^+$ -состояния в магн. поле вызывает зависящие от поля взаимодействия, преимущественно пересечения уровней, между близко расположенными слабо связанными высокими колебательно-вращательными уровнями $X^1\Sigma_g^+$ и ${}^3\Sigma_u^+$ -состояний вблизи диссоциационного предела. Из соображений симметрии такие взаимодействия отсутствуют в гомоядерных молекулах ${}^7\text{Li}_2$ или ${}^6\text{Li}_2$. Так как экспериментально возможно наблюдать высокие колебательные уровни основного электронного состояния (до $v \leq 36$), а также преддиссоци-

Фр. 1982, 18, №1.

ацию с этих уровней через электронное состояние $^3\Sigma_u^+$, то возможно наблюдение и предсказываемых данной теорией возмущений и преддиссоциаций. В. Н. Р.

Li₂

574CK 1228

1981

(cremp)

95: 1310Sc Model calculations of magnetic-field-induced perturbations and predissociations in lithium-6, -7 near dissociation. Uang, Yea-Hwang; Ferrante, Robert F.; Stwalley, William C. (Dep. Chem., Univ. Iowa, Iowa City, IA 52242 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(11), 6267-70 (Eng). A model calcn. of magnetic-field-induced perturbations and predissocns. (scattering resonances) in ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$ near dissoen. is presented. The splitting of the Σ_u^+ state by an external magnetic field yields field-dependent interactions (dominated by a curve crossing) between closely spaced, weakly bound high vibrational-rotational levels of the $X^1\Sigma_g^+$ and ${}^+\Sigma_u^+$ states near dissoen. Due to the symmetry of homonuclear mols., there will be no such field-induced phenomena in the cases of ${}^7\text{Li}_2$ and ${}^6\text{Li}_2$. Since a bound-free-bound transition involving the ${}^3\Sigma_u^+$ state of ${}^7\text{Li}_2$ and high vibrational levels ($v \leq 36$) in $X^1\Sigma_g^+$ ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$ and ${}^7\text{Li}_2$ have recently been obsd., exptl. observation of these perturbations and predissocns. should be feasible.

C. A. 1981, 95, N2.

$6\text{Li}^7\text{Li}$

потенц.
кривые,
Do;

X. 1982, 19, 4

ОТЧЕТ 12286

1981

4 B209. Новые наблюдения и приведенный по массе анализ полос системы $B'\pi_u - X'\Sigma_g^+$ в спектре флуоресценции молекулы ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$ возбуждаемом лазером. Verma K. K., Koch M. E., Stwalley W. C. New observations aid mass-reduced analyses of the laser-excited fluorescence of the $B'\pi_u - X'\Sigma_g^+$ bands of the ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$ molecule. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 2, 548—559 (англ.)

Измерены спектры флуоресценции (4400—6300 Å) паров лития (~99,95% ${}^7\text{Li}$) возбуждаемые Ar^+ -лазером. Целью работы являлось исследование системы $B'\pi_u - X'\Sigma_g^+$ ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$, построение потенциальных кривых и определение энергии диссоциации основного состояния.

Положение линий измеряли относительно двух известных серий в спектре флуоресценции ${}^7\text{Li}_2$ и атомных линий лития. Определены молекулярные постоянные ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$, эффективные значения $G_9(v'')$, $B_2(v'')$, $U_9''(R)$ (значения при $I''=9$), $G_{19}(v'')$, $B_{19}(v'')$, $U_9''(R)$, точки поворота потенциальной кривой основного состояния. Построена правильная (безвращательная) потенциаль-

ная кривая состояния $X'\Sigma_g^+$. Рекомендованы след. значения энергий диссоциации молекулы Li_2 : основное состояние — $D_e = 8516 \pm 18 \text{ см}^{-1}$, состояние $A'\Sigma_u^+ — D_e = 9349 \pm 19 \text{ см}^{-1}$, состояние $B'\pi_u — D_e = 2984 \pm 19 \text{ см}^{-1}$.
В. М. Ковба

Li₂

(B¹Π - X¹Σ)

(M.N)

Beitz!

OMMICK 12286 1981

95:52011k New observations and mass-reduced analyses of the laser-excited fluorescence of the B¹Π_u-X¹Σ_g⁺ bands of the lithium (⁶Li⁷Li) molecule. Verma, K. K.; Koch, M. E.; Walley, W. C. (Iowa Laser Facil., Univ. Iowa, Iowa City, IA 52242 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 87(2), 548-59 (Eng). An Ar⁺ laser at 4579 Å was used to excite the B¹Π_u-X¹Σ_g⁺ fluorescence of the ⁶Li⁷Li mol. in a crossed heat pipe oven. The spectrum at 4400-6300 Å was recorded photoelec. with an emphasis on the observation of higher vibrational levels in the ground state close to the dissociation limit. P and R doublets corresponding to v'' ≤ 26 originating from the (v' = 13, J' = 19) level were obsd. and identified by using mass-reduced quantum numbers. Two addnl. ⁶Li⁷Li series, known from earlier work were also analyzed. These data were used to construct effective Rydberg-Klein-Rees (RKR) potentials for specific J'' (=9,19) quantum numbers of the ground state and from them the true (rotationless) potential energy curve (for X¹Σ_g⁺) was derived. This extends the previously known curve of Li₂ from 4.28 to 5.18 Å (outer turning point; this turning point corresponds to an energy which is approx. 88% of the dissociation energy, which is 8516 ± 18 cm⁻¹).

C.A. 1981, 95, N 6.

$^7\text{Li}_2$

1981

спектр
природы.

95: 123262f Assignment of the lithium-7 dimer optically pumped laser transitions pumped by argon(1+) and krypton(1+) laser lines. Verma, K. K.; Stwalley, W. C.; Zemke, W. T. (Dep. Chem., Univ. Iowa, Iowa City, IA 52242 USA). *J. Appl. Phys.* 1981, 52(6), 3821-6 (Eng). In an attempt to det. the assignments for the wavelengths obsd. in the line tunable Li dimer laser pumped by the Kr^+ 6471-Å laser, the corresponding fluorescence spectrum of the $^7\text{Li}_2$ mols. was examd. Unlike the Ar^+ laser fluorescences which have previously been assigned, the Kr^+ laser fluorescence of Li_2 has not been previously studied. The assigned fluorescence spectrum consists of 2 series of the A-X system ($v' = 9, J' = 11$; $v' = 12, J' = 60$) along with the line frequencies and their calcd. abs. radiative transition probabilities. The optically pumped laser lines are identified and addnl. wavelengths are listed which may lase when pumped at 6471 Å or at various Ar^+ laser wavelengths.

C.A. 1981, 95, N 14

7 Li₂

1981

3 Д1211. Отнесение переходов в лазере на ${}^7\text{Li}_2$ с оптической накачкой излучением Ar^+ и Kr^+ -лазеров. Assignment of the ${}^7\text{Li}_2$ optically pumped laser transitions pumped by Ar^+ and Kr^+ laser lines. Verma K. K., Stwalley W. C., Zemke W. T. «J. Appl. Phys.», 1981, 52, № 6, 3821—3826 (англ.)

В видимой и ближней ИК области спектра исследована флуоресценция димеров ${}^7\text{Li}_2$, возбуждаемых излучением ~~ионного~~ Kr^+ -лазера (6471 Å). В спектре флуоресценции выявлены две серии линий, отнесенных к переходам в $\text{Li}_2(A \rightarrow X)$ с уровнями $v' = 9, J' = 11$ (с высокой интенсивностью) и $v' = 12, J' = 60$ (с низкой интенсивностью). Эксперим. данные сопоставлены с результатами теоретич. расчетов частот линий и абс. вероятностей радиационных переходов на основе известных молекулярных констант. Идентифицированы экспериментально наблюдавшиеся лазерные переходы в Li_2 при оптич. накачке излучением ионных Ar^+ - и Kr^+ -лазеров, а также указано несколько новых переходов, на которых можно ожидать получения лазерной генерации.

С. Литке

флуоресцен.

ф. 1982, 18, N 3.

Li₂

1981

2 Д957. Новые наблюдения и анализ полосы $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ в спектре возбуждаемой лазером флуоресценции молекул ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$. New observations and mass-reduced analyses of the laser-excited fluorescence of the $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ bands of the ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$ molecule. Verma K. K., Koch M. E., Stwalley W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 2, 548—559 (англ.)

Исследован заново спектр флуоресценции $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ молекул ${}^6\text{Li}{}^7\text{Li}$, возбуждаемый излучением Ar^+ -лазера (4579 Å). Зарегистрированы переходы на колебательные уровни основного состояния, близкие к диссоциационному пределу (с $v'=13$ на $v'' \leq 26$). Построен РКТ-потенциал для основного состояния $X^1\Sigma_g^+$ молекулы Li_2 в области межъядерных расстояний до $r=5,18$ Å. Оценена энергия диссоциации $\text{Li}_2(x)$, $D_e = (8516 \pm 18)$ см⁻¹. Библ. 17. В. С. Иванов

спектр,
М.А.

ф. 1982, 18, № 2.

1981

Lia

10 Б21. Замечание о дипольном моменте переходов димеров щелочных металлов. Woerdman J. P. A note on the transition dipole moment of alkali dimers. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 11, 5577—5578 (англ.)
 Для переходов $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow A^1\Sigma_u^+$ и $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Pi_u$ молекул Li_2 и Na_2 зависимость дипольного момента перехода $D(R)$ от межъядерного расстояния R качественно объяснена зависимостью от R частоты перехода $\nu(R)$ для потенциальных кривых соотв-щих состояний: $D(R) \sim \nu(R)^{-1/2}$. Предсказаны $D(R)$ переходов $X \rightarrow A$ и $X \rightarrow B$ для молекулы K_2 .
 Н. Ф. Степанов

M


 (H)

X. 1982, 19, N 10.

Li_2

1981

5 Д97. Замечание о дипольном моменте перехода в щелочных димерах. A note on the transition dipole moment of alkali dimers. Woerdman J. P. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 11, 5577—5578 (англ.)

Для молекул Li_2 , Na_2 , K_2 проведен расчет дипольных моментов переходов $X \rightarrow B$ и $X \rightarrow A$ в предположении, что силы осцилляторов f для этих переходов находятся в постоянном отношении к атомному значению f . Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с данными неэмпирич. вычислений.

А. Ф. Шестаков

дипольный
момент
перехода

(f2) ☒

СФ 1982, 18, N5.

1981

Li₂

96:11847q A note on the transition dipole moment of alkali dimers. Woerdman, J. P. (Philips Res. Lab., 5600 MD Eindhoven, Neth.). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(11), 5577-8 (Eng). For Li₂ and Na₂, the variations, as a function of the internuclear distance (R), of the dipole moments [$D(R)$] of the dimer $X \rightarrow A$ and $X \rightarrow B$ electronic transitions were quant. described by the R dependences of the dimer transition frequencies [$\nu(R)$]. The calcns. were done by using the postulated new relations between the dimer oscillator strengths (f) and the at. oscillator strengths (F), and assuming F to be const. The relations were used to calc. $D(R)$ for K₂. The relations between f and F led to the correlation $D^2(R) \times \nu(R) \approx \text{const.}$

 $\mu(R);$

Na₂, K₂

C.A. 1982, 96, N2.

Li₂

1982

5 Д134. Расчет ряда характеристик кластера Li₂ методом конфигурационного взаимодействия. MRD CI calculations of some properties of the Li₂ cluster. Beckmann Hans-Ottmar. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, № 3, 240—242 (англ.)

расчет, ϵ , E , J , D_0

Li₃ (H) $\boxtimes$

9. 1983, 18,
IV 5

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом конфигурационного взаимодействия (отбор конфигураций по спец. схеме) в большом базисе гауссовых орбиталей исследовано электронное строение Li₂ (I) и Li₂ (II). Подробно проанализировано влияние учета корреляционных эффектов на результаты расчетов. Энергия связи в расчете на один атом для II оценена в 9,66 ккал/моль (что существенно ниже эксперим. значения $13,8 \pm 1,3$), причем эта величина для I лишь ненамного больше (10,17, эксперим. значение 12,33). Энергия диссоциации II на I и атом Li оценена в 8,6 ккал/моль. Потенциалы ионизации I и II согласуются с эксперим. значениями с точностью до ошибок эксперимента. Рассчитаны энергии 8 низших возбуждений для II, которые оказались значительно более низкими, чем у I и Li₄.

В. Л. Лебедев

1982

9 Б48. Расчеты свойств кластера Li_3 методом конфигурационного взаимодействия [двухкратных] возбуждений нескольких исходных конфигураций. MRD CI calculations of some properties of the Li_3 cluster. Beckmann Hans-Ottmar. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, № 3, 240—242 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с построением одно- и двукратных возбуждений по отношению к выделенному набору нескольких исходных конфигураций (КВ ДВ НИК) по программам Бюнкера и Пейеримхоф рассчитаны энергии кластера Li_3 в состоянии 2B_2 . Для равновесной геометрич. конфигурации определены полная энергия, энергия связи, приходящаяся на атом, энергия ионизации и энергии возбуждения в восемь низших электронных состояний. Отмечено, что энергия связи и потенциал ионизации несколько меньше соотв-щих эксперим. значений. Использование корреляц. поправки Давидсона приближает теор. величины к экспериментальным. Проведено сравнение св-в в ряду $\text{Li}_2, \text{Li}_3, \text{Li}_4$.

А. В. Немухин

геометр.,
структура,
 $D_{\infty h}$, Σ

(+2) Δ

X. 1983, 19, № 9

${}^7\text{Li}_2$

Ommuck 13692

1982

$(E^1\Sigma_u^+)$

/ 96: 76699n A study of the $E^1\Sigma_g^+$ state of dimeric lithium-7 by pulsed optical-optical double resonance spectroscopy. Bernheim, R. A.; Gold, L. P.; Kelly, P. B.; Tipton, T.; Veirs, D. K. (Dep. Chem., Pennsylvania State Univ., University Park, PA 16802 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(1), 57-60 (Eng). The results of pulsed optical-optical double resonance spectroscopic studies of the $E^1\Sigma_g^+$ state of ${}^7\text{Li}_2$ are presented. Observations were carried out on the $v = 0$ through $v = 12$ levels. A set of Dunham mol. consts. was derived and an Rydberg-Klein-Rees potential was generated. Franck-Condon factors for transitions to the $A^1\Sigma_u^+$ state were detd. for the range obsd. vibrational levels. An apparent deviation from the expected disocn. energy is obsd. consistent with the suggestion that a double min. exists for this state.

C. A. 1982, 96, N10-

Li₂

Оттиск 13692 · 1982

7 Д427. Исследование состояния ${}^7\text{Li}_2(E^1\Sigma_g^+)$ методом импульсной оптически-оптической спектроскопии двойного резонанса. A study of the $E^1\Sigma_g^+$ state of ${}^7\text{Li}_2$ by pulsed optical-optical double resonance spectroscopy. Bernheim R. A., Gold L. P., Kelly P. B., Tipton T., Veirs D. K. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 1, 57—60 (англ.)

М. П.

Исследована вращательная структура уровней $v=0\div 12$ состояния ${}^7\text{Li}_2(E)$. Определены коэф. Данхема и построена потенц. кривая RKR. Рассчитаны коэф. Франка—Кондона для переходов в состояние $A^1\Sigma_u^+$. Полученные результаты не согласуются с известным значением энергии диссоциации для состояния $A^1\Sigma_u^+$. Это кажущееся несоответствие свидетельствует, по мнению авторов, о наличии двух минимумов на потенц. кривой состояния $E^1\Sigma_g^+$. Библ. 15.

ф. 1982, 18, № 4.

Li₂

Оттиск 13692

1982

14 Б133. Изучение состояния $E^1\Sigma_g^+$ $^7\text{Li}_2$ методом спектроскопии импульсного оптико-оптического двойного резонанса. Bernheim R. A., Gold L. P., Kelly P. B., Tipton T., Veirs D. K. A study of the $E^1\Sigma_g^+$ state of $^7\text{Li}_2$ by pulsed optical—optical double resonance spectroscopy. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 1, 57—60 (англ.)

м.п.;

Методом двойного оптич. резонанса [$E^1\Sigma_g^+(v=0-12) \leftarrow A^1\Sigma_u^+ \leftarrow X^1\Sigma_g^+$] исследовано состояние $E^1\Sigma_g^+$ $^7\text{Li}_2$. Для него получен набор коэф. Дэпхема Y_{nh} ($n=0-5$, $k=0-2$), значения $G(v)$, B_v поворотные точки РКР потенциальной кривой. Приведены кривые потенциальной энергии Li_2 в состояниях $E^1\Sigma_g^+$, $F^1\Sigma_g^+$, $G^1\Pi_g$, факторы Франка—Кондона для системы $E^1\Sigma_g^+(v=0-12) \leftarrow A^1\Sigma_u^+(v=0-20)$ $^7\text{Li}_2$ ($I=0$) В. М. Ковба

х. 1982, 19, N14.

Li₂

Om. 15056 1982

5 B172:—Ридберговские состояния Li₂ и молекулярные постоянные Li₂⁺. Rydberg states of Li₂ and molecular constants of Li₂⁺. Bernheim R. A., Gold L. P., Tipton T. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 1, 13—15 (англ.)

М.П;

Методом импульсного двойного оптич. резонанса исследованы ридберговские серии возбужденных электронных состояний молекулы ⁷Li₂. Наблюдали 29 ридберговских состояний четной симметрии, в том числе 13 членов серии $nd\pi^1\Pi_g$ ($n=3-15$) и 16 — серий $nd\sigma^1\Sigma_g^+$ и $ns\sigma^1\Sigma_g^+$. Для компонент П-состояний первой серии приведены значения T_0 , T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e , D_e и δ . В случае состояний $9d\Pi^1\Pi_g^-$ и $10d\pi^1\Pi_g^-$ наблюдали взаимные колебательные возмущения (для этих состояний приведены также указанные выше молек. постоянные, исправленные с учетом возмущений). Методом экстраполяции оценены молек. постоянные ⁷Li₂⁺(X²Σ_g⁺) (в см⁻¹): $\omega_e=262\pm 2$, $\omega_e x_e=1,6\pm 0,5$, $B_e=0,496\pm 0,002$, $\alpha_e=(5,2\pm 1,4)\cdot 10^{-3}$, $D_e=10463\pm 23$. Значения ω_e , $\omega_e x_e$ и D_e согласуются с результатами неэмпирич. расчетов.

В. М. Ковба

Li₂⁺

(11)

X. 1983, 19, N5

Li_2 , Li_2^+

Om. 15056

1982

2 Д470. Ридберговские состояния Li_2 и молекулярные постоянные Li_2^+ . Rydberg states of Li_2 and molecular constants of Li_2^+ . Bernheim R. A., Gold L. P., Tipton T. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 1, 13—15 (англ.)

Г. А. А.

С использованием техники двойного импульсного оптически-оптич. резонанса исследованы ридберговские состояния $nd\pi^1\Pi_g$ ($n=3-15$) молекулы $^7\text{Li}_2$. Измерения проведены с помощью двух лазеров, один из которых работал на резонансной частоте электронного перехода $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow A^1\Sigma_u^+$, а частота второго перестраивалась в диапазоне 530—370 нм. Определены: потенциал ионизации $^7\text{Li}_2$ ($41\,496 \pm 4 \text{ см}^{-1}$) и молекулярные постоянные состояния $X^1\Sigma_g^+$ иона $^7\text{Li}_2^+$. А. В. Н.

② 17

сп. 1983, 18, №2



Li_2^+ (м.п.)

${}^7\text{Li}_2$

1982

99: 202649y Pulsed optical-optical double resonance spectroscopy of the gerade excited states of diatomic lithium-7. Bernheim, R. A.; Gold, L. P.; Tipton, T. (Jt. Inst. Lab. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *Proc. Int. Conf. Lasers* 1981 (Pub. 1982), 193-8 (Eng). The technique of pulsed optical-optical double resonance spectroscopy is described. The results of studies on the $E^1\Sigma_g^+$, $F^1\Sigma_g^+$ and $G^1\Pi_g$ states are reviewed. The spectroscopic studies yield good descriptions of the lower 60% of the potential wells for the F and G states, and there is evidence for a double min. in the E state. A ${}^1\Pi_g$ Rydberg series was studied which gives a value of $41496 \pm 4 \text{ cm}^{-1}$ for the ionization potential of ${}^7\text{Li}_2$ and mol. consts. of $D_e = 10463 \pm 23 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_e = 261.6 \text{ cm}^{-1}$, $B_e = 0.493 \text{ cm}^{-1}$, and $\omega_{ex} = 1.6 \text{ cm}^{-1}$ for the $X^2\Sigma_g^+$ state of ${}^7\text{Li}_2^+$.

M.N.

C.A. 1983, 99, N 24

Li₂

1982

Borisov Yu. A.

теорет.
расчет
энергии

Chem. Phys. Lett.
1982, 93, N 2, 197 -
- 200.

● (сер. H⁻; III)

h₂

Оммуек 14054

1982

Борисов Ю. А., Муса-
ев Д. Т.

расши-
ритель
отверстия

и
механизм
расшир-
ома.

Ис. Вейрукийур. жм.,
1982, 23, N1, 10-15.

Li₂

Оттиск 73681

1982

12 Б19. Случайная преддиссоциация в димере лития; теоретическое исследование. Cooper David L., Hutson Jeremy M., Uzer T. Accidental predissociation in lithium dimer: a theoretical investigation. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 86, № 5—6, 472—476 (англ.)

преддиссоциация.

Исследована случайная преддиссоциация с колебательных уровней электронного состояния $A^1\Sigma_u^+$, обусловленная смешиванием с $b^3\Pi_u$ электронным состоянием за счет спин-орбитального взаимодействия и последующим переходом на отталкивательное $a^3\Sigma_u^+$ -состояние. Расчет матричных элементов взаимодействия между электронными состояниями выполнен неэмпирически с использованием волновых функций, найденных методом ССП в базисе слейтеровских орбиталей. Обсуждены различные факторы, влияющие на время преддиссоциации. Указаны энергетич. области, в к-рых наиболее вероятно обнаружить преддиссоциацию экспериментально.

Б. И. Жилинский

Х. 1982, 19, № 12.

Li₂

Ommuck 13681

1982

neopemur.
pacrem

96: 149494d Accidental predissociation in lithium dimer: theoretical investigation. Cooper, David L.; Hutson, Jeremy M.; Uzer, T. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 86(5-6), 472-6 (Eng). The positions of accidentally predissociated vibration-rotation levels in Li₂ were predicted by using ab-initio calcs. of coupling matrix elements together with recent potential-energy curves and exptl. results. The factors affecting predissocn. lifetimes are discussed, and the most likely regions for exptl. observable predissocns. are identified.

C.A. 1982, 96, N18

Li₂

Оттиск 13681

1982

8 Д125. Теоретическое исследование случайной преддиссоциации в димере лития. Accidental predissociation in lithium dimer: A theoretical investigation. Cooper David L., Hutson Jeremy M., Uzer T. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 86, № 5—6, 472—476 (англ.)

Рассчитаны энергии и преддиссоциационные времена жизни (ПВЖ) вибронных уровней электронных состояний $A^1\Sigma_u^+$ и $b^3\Pi_u$ молекул ${}^6\text{Li}_2$ и ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$. Расчеты проводились на основании теоретич. данных о потенц. кривых Li_2 , исправленных в соответствии с имеющейся эксперим. информацией о квазивыврождении вибронных термов. Необходимые для определения ПВЖ уровней недиагональные матричные элементы операторов спин-орбитального взаимодействия и компоненты орбитального момента вычислены на базе хартри-фоковских волн. ф-ций указанных электронных состояний. Обсуждаются факторы, оказывающие влияние на величину ПВЖ. Предсказано положение уровней, преддиссоциацию которых можно обнаружить в фотодиссоциационном эксперименте.

А. В. Зайцевский

м.п.; пред-
диссоциация

Ф. 1982, 18, № 8

1982

Li_n

n=2-7

расчет ξ_i ,

м.п.



14 Б24. Изучение методом ППДП/2 роста модельных кластеров лития. A CNDO/2 study of the growth of model lithium clusters. Delineshev S. P. «Докл. Болг. АН», 1982, 35, № 11, 1511—1513 (англ.)

В рамках схемы ППДП/2 проведены расчеты кластеров Li_N (N=2—7). Во всех исследованных кластерах расстояния между ближайшими соседями принимали фиксированными и равными 3,5089 Å (эксперим. значение межъядерного расстояния в ОЦК-решетке Li). Показано, что при N=4—7 наиболее стабильные кластеры трехмерны. Наиболее стабильный (N+1)-атомный кластер м. б. получен добавлением атома Li к наиболее стабильному N-атомному кластеру. Для данного числа атомов N атомы, образующие наиболее стабильный кластер, характеризуются наибольшим координац. насыщением, т. е. (N+1)-й атом занимает положение с максим. числом 1-х, 2-х, 3-х и т. д. соседей. Найдено, что энергия связи на атом монотонно возрастает с ростом N.

М. Б. Кузьминский

х. 1983, 19, N 14.

Li₂, Li₃, Li₄

Li₂

1982

97: 28850d Quenching and vibrational energy transfer in diatomic lithium ($B^1\Pi_u$). Dubreuil, B.; Chaleard, C. (Groupe Rech. Energet. Milieux Ionises, Univ. Orleans, 45046 Orleans, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(11), 5365-9 (Eng). Radiative lifetimes, quenching, and excitation transfer in the $v' = 0, 1, 2, 3, 4$ vibrational levels of $Li_2(B^1\Pi_u)$ are studied by means of time resolved laser spectroscopy in a heat-pipe-type oven. Radiative lifetimes in the range 8.35-8.6 ns compare well with recent theor. results. Quenching and excitation transfers towards neighboring vibrational levels are mainly due to collision with Li atoms with rate coeffs. in the range $1.9-5.6 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^3$. These values are two orders of magnitude larger than the rate coeffs. for quenching and excitation transfers induced by neon atoms. These results can be used in the rate equations of the optically pumped Li₂ laser.

C. A. 1982, 97, N 4

1982

Li₂

2 Д772. Тушение и передача колебательной энергии в молекуле $\text{Li}_2(B^1\Pi_u)$. Quenching and vibrational energy transfer in $\text{Li}_2(B^1\Pi_u)$. Dubreuil B., Chaleard C. «J Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5365—5369 (англ.)

Методом разрешенной во времени лазерной спектроскопии изучены процессы столкновительной и радиационной дезактивации уровней $v'=0\div 4$ состояния $B^1\Pi_u$ молекулы Li_2 . Димеры Li_2 получались в трубчатой печи при $550\text{—}680^\circ\text{C}$ с добавлением нескольких мм рт. ст. неона как буфера. Получены кинетич. кривые изменения интенсивности излучения с отдельных колебательных уровней. Определены времена жизни колебательных уровней и константы скорости тушения флуоресценции атомами Li. Константы скорости тушения тех же уровней атомами Ne по крайней мере на 2 порядка ниже. По увеличению интенсивности переходов с уровней $v'=1\div 3$ после импульсного заселения уровня $v'=0$ оценены константы скорости передачи колебательной энергии $v'=0\rightarrow v''=1, 2, 3$ при столкновениях с атомами Li, которые уменьшаются с ростом Δv . Библ. 15. М. Т.

Спектр,

Ср. 1983, 18, №2

hi2

1982

24 B1447: Тушение и перенос колебательной энергии в $\text{Li}_2(B^1\Pi_u)$. Dubreuil B., Chalcard C. Quenching and vibrational energy transfer in $\text{Li}_2(B^1\Pi_u)$. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5365—5369 (англ.)

Методом разрешенной во времени лазерной спектроскопии измерены излучательные времена жизни τ , и константы скорости k процессов тушения и переноса энергии для колебат. уровней $v'=0-4$ возбужденного состояния $\text{Li}_2(B^1\Pi_u)$. Измерения проводили в печи типа нагретой трубки при T -рах $550-680^\circ$, обеспечивающих плотности паров Li в диапазоне $1,56 \cdot 10^{14}-3,33 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и плотности димерных молекул Li_2 $1,5 \cdot 10^{12}-6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Парциальное давл. буферного газа Ne составляло $0,1-5$ Торр. Состояния $\text{Li}_2(B^1\Pi_u, v', j')$ возбуждали из основного состояния $X^1\Sigma_g^+$ перестраиваемым лазером на красителе со спектральной шириной ~ 13 ГГц и длительностью импульса $3,5$ нс. При этом осуществлялось одновременное возбуждение

τ ,

тушение

перенос

колебат. энер.

X, 1982, 19, № 24

нескольких вращат. уровней j' определенного состояния Li_2 ($B^1\Pi_u, v'$). Свечение флуоресценции (Фл) в зависимости от времени регистрировали с использованием монохроматора с разрешающей силой ~ 50000 , фотомножителя (время нарастания сигнала 2 нс) и прогаммированного аналого-цифрового преобразователя с временным разрешением 1,7 нс, синхронизированного с импульсным лазером. В экспериментах зависящую от времени населенность накачиваемого уровня v_p' находили на основании кинетич. измерений Фл в переходе $v_p' \rightarrow v''$ (выбирали $v' > v_p''$, чтобы свести к минимуму влияние самопоглощения на эффективное время жизни уровня). В столкновит. процессах $\text{Li}_2(B^1\Pi_u, v_p') + \text{Li}$ (или Ne) $\rightarrow \text{Li}_2(B^1\Pi_u, v' \neq v_p') + \text{Li}$ (или Ne) происходит перенос энергии колебат. возбуждения с уровня v_p' на соседние колебат. уровни v' , что приводит к возникновению сенсibilизир. Фл в переходах $v' \rightarrow v''$. Получены след. значения τ_r (нс) для уровней $v_p' = 0-4$ соотв.: $8,38 \pm 0,23$; $8,62 \pm 0,10$; $8,45 \pm 0,10$; $8,35 \pm 0,12$; $8,6 \pm 0,11$. Эти величины хорошо согласуются с известными из лит-ры теор. оценками $\tau_r = 7,8-8,3$ и $7,8-8,5$ нс для уровней $v_p' = 0$ и $v_p' = 4$ соотв. Кон-

станты скорости тушения Фл в столкновениях с атомами Li для уровней $v_p' = 0-4$ соотв. таковы (10^{-9} см³/молекула·с): $5,6 \pm 2$; $1,9 \pm 0,2$; $2,5 \pm 0,2$; $2,2 \pm 0,3$; $3,7 \pm 0,1$. Константа скорости тушения Фл в переходах с уровня $v_p' = 3$ атомами Ne равна $\sim 0,05 \cdot 10^{-9}$ см³/молекула·с при $T = 908$ К, т. е. на два порядка величины меньше по сравнению с k тушения Фл атомами Li. Коэф. скорости переноса энергии $v_p' = 0 \rightarrow v' = 1, 2, 3$, индуцированного столкновениями с атомами Li и Ne соотв. таковы (10^{-9} см³/молекула·с): $v_p' = 0 \rightarrow v' = 12,7 \pm 0,04$; $\sim 0,02$; $v_p' = 0 \rightarrow v' = 20,9 \pm 0,1$; $\sim 0,004$, $v_p' = 0 \rightarrow v' = 30,6 \pm 0,1$; $\sim 0,002$. Т. обр., эффективность переноса энергии является убывающей функцией разности $\Delta v = |v_p' - v'|$. Полученные результаты могут использоваться при анализе кинетич. ур-ний для лазеров на Li_2 с оптич. накачкой. В. Е. Скурат

1982

Li₂

12 Д742. Точный ионизационный потенциал Li₂, полученный методом резонансной двухфотонной ионизации. Accurate ionization potential of Li₂ from resonant two-photon ionization. Eisel D., Demtröder W. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 88, № 5, 481—486 (англ.)

С использованием техники сверхзвуковых молекулярных пучков получена спектральная зависимость эффективности двухфотонной ионизации паров лития. Для возбуждения применены два импульсных лазера на красителях: один, настроенный в полосе поглощения $X^1\Sigma_g^+(v'', J'') \rightarrow B^1\Pi_u(v', J')$ молекулы Li₂, второй — перестраиваемый в области, необходимой для получения спектра двухфотонной ионизации. Определена величина первого адиабатич. потенциала ионизации Li₂: $(41\,475 \pm 8)$ см⁻¹, а также энергии диссоциации иона Li₂⁺(²Σ_g⁺): $(10\,353 \pm 25)$ см⁻¹. Обсуждены автоионизационные процессы в Li₂ и влияние внешнего электрич. поля на измеряемое значение потенциала ионизации. Библи. 17.

М. Т.

у, до,



(H) Li₂⁺(D)

сп. 1982, 18, № 12

Li₂

1982

/ 97: 46835g Accurate ionization potential of lithium (Li₂) from resonant two-photon ionization. Eisel, D.; Demtroeder, W. (Fachber. Phys., Univ. Kaiserslautern, D-6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 88(5), 481-6 (Eng). Sequential 2-photon ionization of Li₂ in a supersonic beam with 2 pulsed tunable dye lasers yields an adiabatic ionization potential $IP(Li_2) = 41,475 \pm 8 \text{ cm}^{-1}$ and a dissoen. energy of the ion $D_0(Li_2^+ \ ^2\Sigma_g^+) = 10,353 \pm 25 \text{ cm}^{-1}$. The influence of elec. fields on the measured value of the ionization potential and the appearance of numerous autoionization lines are discussed.

y,

¹⁷
(41) Li₂⁺ (D₀)

C.A. 1982, 97, 16

Li₂

1982

18 Б22. Применение волновых функций АСГ для расчетов основных состояний Li₂ и CH⁺. Application of AGP wave functions to the ground states of Li₂ and CH⁺. Elander Nils, Sangfelt Erland, Kurtz Henry, Goscinski Osvaldo. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4th Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap., Pt 3; 1047—1056 (англ.)

расчет Li,
М.П;

Волновые функции в виде антисимметризованной степени геминали (АСГ) применены для расчета полных потенциальных кривых основных состояний Li₂ и CH⁺. Для представления орбиталей использованы небольшие базисные наборы гауссовых функций, т. к. основной целью работы являлось исследование возможностей с функциями типа АСГ описывать диссоциацию на атомные фрагменты с нечетным числом электронов, а не получение точных значений спектроскопич. параметров.

⊗ (4)

X-1983, 19, N 18

Для оптимизации орбиталей применены методы, обладающие квадратичной сходимостью. Прослежено изменение заселенностей орбиталей (и связанных с ними коэф. перед геминалями) при изменении межъядерного расстояния от равновесного до диссоциац. предела. Найдено, что метод АСГ позволяет добиться разумного описания полных потенциальных кривых, и следовательно, использование ф-ции АСГ вместо хартри-фокской в кач-ве исходной ф-ции в приближении случайных фаз имеет хорошие перспективы для расчета и возбужденных состояний. А. В. Немухин

Li₂

1982

9 Д88. Использование волновых функций АСГ для основных состояний Li₂ и CH⁺. Application of AGP wave functions to the ground states of Li₂ and CH⁺. Elander Nils, Sangfelt Erland, Kurtz Henry, Goscinski Osvaldo. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4 Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap., Pt 3, 1047—1056 (англ.)

расчет D₀;

На примере молекул Li₂ и CH⁺ исследована применимость приближенных волн. ф-ции типа антисимметризованных степеней гемминалей (АСГ) для описания диссоциации системы с замкнутой электронной оболочкой на фрагменты с нечетным числом электронов. Показано, что энергия диссоциационного предела близка к сумме хартри-фоковских энергий атомов, тогда как при равновесных межъядерных расстояниях энергия молекул включает значительную часть корреляционных попра-

(4) ~~4~~

99. 1983, 18, № 9

вок. Анализ заселенностей натуральных орбиталей подтвердил, что ф-ция АСГ на диссоциационном пределе является некоррелированной, а ф-ции АСГ изолированных атомов сильно коррелированы (напр., корреляционная энергия АСГ для Li составляет 87,7% от точной). Обнаруженный эффект может приводить к завышению расчетной диссоциационной энергии молекулы. Оценки энергии диссоциации по разности энергий молекулы и изолированных атомов в приближении АСГ оказались заниженными. А. В. Зайцевский



Li₂

От. 15003 1982

1 Д870. Индуцированные столкновениями переходы между электронными состояниями $B \leftarrow A$ и $C \leftarrow B$ возбужденных лазером молекул Li₂. Collision-induced transitions between electronic states $B \rightarrow A$ and $C \rightarrow B$ of laser-excited Li₂ molecules. Ennen G., Ottin-ger Ch. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 5812—5819 (англ.)

м.п.;

Получены спектры флуоресценции паров лития в присутствии аргона, возбужденные лазером Ar⁺ с линиями 514,5 нм, 496,5 нм, 488 нм, 476,5 нм, 457,9 нм и 351,1 нм. Кроме полос, соответствующих переходам молекул Li₂ из возбужденных состояний $A^1\Sigma_a^+$, $B^1\Pi_u$, $C^1\Pi_u$ в основное состояние $X^1\Sigma_g^+$, наблюдаются полосы, отвечающие переходам между возбужденными состояниями и запрещенными правилами отбора. Поскольку интенсивность этих полос возрастает при увеличении давления аргона, они связаны с переходами, индуцированными столкновениями молекул Li₂ с атомами аргона. Определены сечения столкновений, вызывающих эти переходы. Библ. 23.

М. В. Т.

сп. 1983, 18, 41

Li₂

Omnuck 15003 1982

97: 101353a Collision-induced transitions between electronic states $B \rightarrow A$ and $C \rightarrow B$ of laser-excited diatomic lithium molecules. Ennen, G.; Ottinger, C. (Max-Planck-Inst. Stromungsforsch., 3400 Goettingen, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(12), 5812-19 (Eng). Nonradiative transitions between the Li_2 ($C^1\Pi_u$, $B^1\Pi_u$, $A^1\Sigma_u^+$) states were studied using monochromatic laser excitation. In a cell expt. under single-collision conditions, the $B \rightarrow A$ transfer was induced by rare gas atom collisions. With Ar, the cross section is $240 \text{ \AA}^2$. $B \rightarrow A$ And $C \rightarrow B$ transfer by Li atom collisions was obsd. with cross sections 1200 and $330 \text{ \AA}^2$, while $C \rightarrow B$ transfer is not measurably induced by Ar collisions. The final state rotational-vibrational level population distribution is very broad and non-Boltzmann.

назрхое
боф-уау.

©.A. 1982, 97, N 12

Li₂

ОТТИСК

15003

1982

24 Б158. Индуцированные столкновениями переходы между электронными состояниями $B \rightarrow A$ и $C \rightarrow B$ молекулы Li_2 , возбуждаемый лазерным излучением. Ennen-G., Ottinger Ch. Collision-induced transitions between electronic states $B \rightarrow A$ and $C \rightarrow B$ of laser-excited Li_2 molecules. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 12, 5812—5818 (англ.)

Изучены нераднац. переходы между состояниями $C'\Pi_u$, $B'\Pi_u$ и $A'\Sigma_u^+$. Возбуждение паров Li_2 осуществляли Ar^+ -лазером. Для возбуждения состояния $B'\Pi_u$ использованы линии 4579, 4765, 4880, 4965 и 5145 Å, для состояния $C'\Pi_u$ — 3511 Å. Ячейка с Li_2 нагрета до 650°. Парц. давл. инертных газов, добавляемых в ячейку, варьировали от 0,5 до 15 мм. Получены сечения для след. процессов: $\text{Li}_2(C'\Pi_u) + \text{Li} \rightarrow \text{Li}_2(B'\Pi_u) + \text{Li}$, $\sigma = 3300 \text{ Å}^2$, $\text{Li}_2(B'\Pi_u) + \text{Li} \rightarrow \text{Li}_2(A'\Sigma_u^+) + \text{Li}$, $\sigma = 1200 \text{ Å}^2$, $\text{Li}_2(B'\Pi_u) + \text{Ar} \rightarrow \text{Li}_2(A'\Sigma_u^+) + \text{Ar}$, $\sigma = 240 \text{ Å}^2$. Сечения процесса $\text{Li}_2(C'\Pi_u) + \text{Ar} \rightarrow$ мало. σ определяли

$B \rightarrow A$

$C \rightarrow B$

X. 1982, 19, № 24

по относит. интенсивности полос $(C'\Pi_u - X'\Sigma_g^+)$ и $(B'\Pi_u - X'\Sigma_g^+)$ для $C \rightarrow B$ и $(B'\Pi_u - X'\Sigma_g^+)$ и $(A'\Sigma_u^+ - X'\Sigma_g^+)$ для $B \rightarrow A$ при разных давлениях буферного газа. Показано, что σ для $B \rightarrow A$ не зависит от длины волны возбуждающей лазерной линии. Сравнение экспериментально полученных спектров флуоресценции и рассчитанных при условии больцмановского распределения показало, что расселение по колебательно-вращательной структуре состояний $B'\Pi_u$ и $A'\Sigma_u^+$ в результате столкновений происходит в широкой области V' и I' и неравновесно. В. М. Ковба.

(для
внеш

Li₂

1982

5 B228. Спектры КР матрично-изолированных димеров металлов и больших молекул. Raman spectra of matrix-isolated metal dimers and larger molecules. Frank F., Schulze W., Froben F. W. «Raman Spectrosc.: Linear and Nonlinear. Proc. 8th. Int. Conf., Bordeaux, 6—11 Sept., 1982». Chichester e. a., 1982, 657—658 (англ.)

Li, M. n;

Обсуждены имеющиеся результаты исследований изолированных в матрицах димеров металлов периодич. системы (Li_2 , Na_2 , K_2 , Cu_2 , Ag_2 , Al_2 , Ga_2 , In_2 , Tl_2 , Pb_2 , As_2 , Sb_2 , Bi_2). Металлы испаряли из нагреваемых точечных ячеек Кнудсена, скорость напыления контролировалась методом микробаланса. Атомы металлов сосаждались с инертным газом на полированную медную пластинку при 6—20 К. Возбуждение спектров КР осуществляли Kr^+ -лазером. Рассмотрено поведение

412

X. 1983, 19, N5

спектров при аннелировании, в частности, отмечен рост полос тримеров и полимеров при высоких температурах осаждения. Измерения спектров с варьированием частоты возбуждающей линии от УФ- до ИК-области дают дополнительную информацию, необходимую для надежного отнесения. Отмечено, что изучение сдвига частот в ИК- и КР-спектрах при адсорбции малых неорг. молекул (CO , NO , NH_3) на кластерах Ag_3 имеет большое значение для исследования механизма катализа. С. Б. Осин

Li₂

1982

22 Б17. Правильный учет поляризации остова в псевдопотенциалах: соединения щелочных металлов с одним валентным электроном. Fuentealba Patricia, Preuss Heinzwerner, Stoll Hermann, Von Szentpály László. A proper account of core-polarization with pseudopotentials: single valence-electron alkali compounds. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 5, 418—422 (англ.)

Исследованы возможности включения в псевдопотенциал (ПП) поправок на поляризацию остова. Рассмотрены 2 случая: а) включение поляризац. Пт в полумпирич. ПП и б) учет поляризац. Пт в хартри-фоксовском ПП. Показано, что для молекул учет поляризац. Пт в ПП приводит к появлению зависимости ПП от геометрии молекулы. Для молекул A_2^+ и AH^+ ($A = Li, Na, K$) с использованием ПП типа (а) и (б) вычислены спектроскопич. параметры R_e , D_e и ω_e . Уста-

расчет м.п.

(+5)

X. 1982, 19, N 22.

Na₂, K₂, LiH⁺,
NaH⁺, KH⁺

новлено, что отсутствие поправки на поляризацию оста-
ва в полуэмпирич. ПП приводит к занижению величин
межъядерного равновесного расстояния R_e и уве-
личению энергии диссоциации D_e в рассмотренных мо-
лекулах. В случае (б) учет поляризац. поправки к ПП
приводит к занижению величины R_e и завышению ве-
личины D_e по сравнению с соотв. величинами, рассчи-
танными с использованием хартри-фоковского ПП.

И. А. Тополь

Li₂

От. 14848. 1982

1 Д140. Неэмпирические расчеты молекул с помощью псевдопотенциалов: высококачественные расчеты Li₂, LiH и BeH₂. Ab initio molecular calculations with pseudopotentials. higher quality calculations on Li₂, LiH, and BeH₂. Gáspár R., Gáspár R., Jr. «Int. J. Quantum Chem.», 1982, 22, № 2, 421—427 (англ.)

Путем численного интегрирования для атомов тем же методом, что и ранее (см. реф. 1Д139) получены 2-экспонентные псевдопотенциалы для атомов Li и Be. В том же приближении проведены расчеты Li₂ (длина связи 5,12 ат. ед., эксперим. значение 5,05 ат. ед.), LiH (2,95 и 3,10 ат. ед., дипольный момент 6,33 и 5,88 ед. Дебая) и BeH₂ (2,585 и 2,54 ат. ед.). Проанализирована сходимость метода расчета как ф-ции числа примитивных орбиталей и числа независимых варьируемых параметров для LiH. В. Л. Лебедев

расчет
геометрии,
структура

м.п.

☒
⊕2

ср. 1983, 18, 41

Li2

(Om. 14848)

1982

3 Б41. Неэмпирические молекулярные расчеты с псевдопотенциалами. Расчеты повышенной точности для Li_2 , LiH и BeH_2 . Ab initio molecular calculations with pseudopotentials: higher quality calculations on Li_2 , LiH , and BeH_2 . Gáspár R., Gáspár R., Jr. «Int. J. Quantum Chem.», 1982, 22, № 2, 421—427 (англ.)

Методом псевдопотенциала рассчитаны равновесные межъядерные расстояния и энергии связи для молекул Li_2 , LiH и BeH_2 . Волновые функции валентных электронов построены в приближении плавающих сферич. гауссовых орбиталей. Выражение для модельного потенциала атомов Li и Be записано в виде комбинации кулоновской и гауссовых функций. Параметры гауссовых функций в модельном потенциале подобраны по энергиям основного и возбужденных состояний атомов с помощью численной процедуры, а не при реше-

расчет
геометрии,
структуры,
Do; (+2) X

X: 1983, 19, № 3

нии атомной задачи вариационным методом. Отмечено, что полученные таким образом параметры модельных потенциалов обеспечивают большую точность в молекулярных расчетах.

А. В. Немухин

Li₂

Ommuck 14848 1982

97: 98587x Ab initio molecular calculations with pseudo-potentials: higher-quality calculations on lithium dimer, lithium hydride, and beryllium dihydride. Gaspar, R.; Gaspar, R., Jr. (Inst. Theor. Phys., Kossuth Lajos Univ., H-4010 Debrecen, Hung.). *Int. J. Quantum Chem.* 1982, 22(2), 421-7 (Eng). New pseudopotentials of higher quality were used in ab initio mol. calcns. Simple mol. systems like Li₂, LiH, and BeH₂ were investigated with varying basis sets. Energy, geometrical parameters, and dipole moments were detd. The convergence properties of the various quantities have been investigated. They show characteristic behavior, e.g., stationary value for the energy where such behavior may be expected.

neopem.
pocnem

(72) [⊠]

LiH,

BeH₂



C.A. 1982, 97, N12

Li₂

1982

1 Д117 ДЕП. Программа для квантовомеханических расчетов двухатомных молекул методом Хартри—Фока—Рутана. Гусейнов И. И., Имам-ов Э. М., Исмаилов Э. Х.; Азерб. ун-т. Баку, 1982. 15 с. Библиогр. 6 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 19 июля 1982 г., № 3855—82 Деп.)

На основе полученных ранее аналитич. ф-л для многоцентровых интегралов с орбиталями слэтеровского типа разработаны алгоритмы для проведения квантовомеханич. расчетов двухатомных молекул по методу Хартри—Фока—Рутана. С помощью этих алгоритмов найдены волн. ф-ции, энергетич. уровни и полные энергии основных состояний двухатомных молекул Li_2 , Be_2 , C_2 , N_2 , F_2 , LiH , BH , NH , FH , CO , BF и LiF . При этом показатели экспонент атомных орбиталей найдены из аналитич. ф-лы. Полученные результаты для полных энергий молекул хорошо согласуются с эксперим. значениями. Автореферат

Кв. мех.
расчет

(11)

Ср. 1983, 18, N 1

Li₂

1982

Poteren

Hout Robert F, Levi Beverly A., et al.

Pi

J. Comput. Chem., 1982,
3, N2, 234-250.

● (cer. H₂; III)

7/
Li₂

1982

97:14158x A spectroscopic study of the $G^1\Pi_g$ state of lithium-7 dimers by pulsed optical-optical double resonance. Veirs, Douglas Kirk (Pennsylvania State Univ., University Park, PA USA). 1981. 131 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DAS205934. From *Diss. Abstr. Int. B* 1982, 42(10), 4083.

(u.n.)

C. A. 1982, 97, N2.

Li₂

1982

96: 151594c Electronic structure and spectra of light alkali diatomic molecules and their molecular cations. Konowalow, D. D.; Rosenkrantz, M. E. (Dep. Chem., State Univ. New York, Binghamton, NY 13901 USA). ACS Symp. Ser. 1982, 179(Met. Bonding Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Met.), 3-17 (Eng). All-electron ab-initio calcs. of the potential curves and wavefunctions for the 8 lowest-lying electronic states of Li₂ and of Na₂ and the 6 lowest-lying electronic states of Li₂⁺ and Na₂⁺ were used to predict the spectral features of a variety of transitions. These results were scaled to predict qual. several aspects of the structure and spectra of K₂, K₂⁺, Rb₂, Rb₂⁺, Cs₂, and Cs₂⁺.

расчет
мол. ион.
спектр.
состоян.

(+3) Na₂, Li₂⁺ ● Na₂⁺

C. A. 1982, 96, N 18

Li_2

1982

10 Б1054. Электронная структура и спектры двух-атомных молекул легких щелочных металлов и их молекулярных катионов. Electronic structure and spectra of light alkali diatomic molecules and their molecular cations. Konowalow D. D., Rosenkrantz M. E. «Metal Bond and Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Metals. Symp. 181st Meet. Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga, March 31—Apr. 3, 1981». Washington, D. C.. 1982, 3—17 (англ.)

Приведены результаты неэмпирич. квантовомех. расчетов кривых потенциальной энергии тех состояний молекул Li_2 , Na_2 и их однозарядных катионов Li_2^+ , Na_2^+ , к-рые адиабатически коррелируют с первыми двумя диссоциац. пределами. Расчеты проведены в приближении ССП, в основном же использованы лит. данные. Обсуждены общие черты и различия потенциальных кривых состояний одинаковой симметрии для

потенц. крив.,
м.п., Ze ; (79)
X. 1984, 19, n10 Li_2^+ , Na_2 , Na_2^+ , K_2 , K_2^+ ,
 Rb_2 , Rb_2^+ , Cs_2 , Cs_2^+

соединений Li и Na. Погрешности в энергиях для Li_2 , Li_2^+ оцениваются в 2%, для Na_2 , Na_2^+ — в 6%. С помощью процедуры масштабирования по равновесному межъядерному расстоянию и энергии связи с использованием данных для Li_2 , Li_2^+ , Na_2 , Na_2^+ построены потенциальные кривые нек-рых связанных состояний для K_2 , K_2^+ , Rb_2 , Rb_2^+ , Cs_2 , Cs_2^+ . Обсуждены способы расчета дипольных моментов переходов и интенсивностей электронных спектров на основании неэмпирич. расчетов. Отмечено, что полуэмпирич. оценки интенсивностей без привлечения данных об энергиях молекул в области равновесных межъядерных расстояний могут приводить к ошибкам до 70%.

А. В. Немухин

Li₂

1982

5 Д55. Электронное строение двухатомных молекул легких щелочных металлов и их молекулярных катионов. Electronic structure and spectra of light alkali diatomic molecules and their molecular cations. Konowalow D. D., Rosenkrantz M. E. «Metal Bond and Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Metals Symp. 181 Meet. Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga, March 31—Apr. 3, 1981». Washington, D. C., 1982, 3—17 (англ.)

расчет
потенц. крив.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО рассчитаны потенц. кривые (ПК) 8 низлежащих электронных состояний Na_2^+ . С использованием данных проведенных ранее авторами аналогичных расчетов для Li_2 , Na_2 и Li_2^+ обсуждены различные спектральные характеристики указанных систем и построены ПК для K_2 , Rb_2 , Cs_2 и их монокатионов. Библ. 32. В. Л.

(49) ☒ 
ср. 1984, 18, N 5

Na_2 , K_2 , Rb_2 , Cs_2 ,
 Li_2^+ , Na_2^+ , K_2^+ , Rb_2^+ , Cs_2^+

Li_2

Оттиск 14614

1982

24 Б19. Влияние взаимодействия ионной пары Li^+Li^- на спектр колебательных энергий второго возбужденного состояния Li_2 симметрии $^1\Sigma_g^+$. Konowalow Daniel D., Fish J. L. The effect of Li^+Li^- ion-pair interaction on the vibrational energy spectrum of the second excited state of Li_2 of $^1\Sigma_g^+$ symmetry. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 9, 4571—4572 (англ.)

расчет Li_2 ,
м.п.

На основании неэмпирич. расчета возбужденных электронных состояний молекулы Li_2 проведена интерпретация колебательного спектра для электронного состояния $E^1\Sigma_g^+$, к-рое является третьим состоянием данного типа симметрии. Потенциальная кривая для этого состояния рассчитана в рамках приближения эффективного потенциала; она обладает двумя минимумами, а в области больших расстояний ее поведение полностью определяется взаимодействием ионной пары Li^+Li^- . Получено хорошее согласие между теоретиче-

х. 1982, 19, № 24

ски рассчитанными колебательными уровнями с $v < 12$ и эксперим. данными. Отмечено, что колебательный уровень с $v=12$ соответствует положению второго минимума на потенциальной кривой, и данная область энергий является наиболее интересной для дальнейших эксперим. исследований. Б. И. Жилинский



Li₂

Оттиск 14614 1982

[12 Д88. Влияние взаимодействия ионной пары $\text{Li}^+ - \text{Li}^-$ на спектр колебательной энергии второго возбужденного состояния молекулы Li_2 с симметрией $^1\Sigma_g^+$. The effect of Li^+Li^- ion-pair interaction on the vibrational energy spectrum of the second excited state of Li_2 of $^1\Sigma_g^+$ symmetry. Konowalow Daniel D., Fish J. L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 9, 4571—4572 (англ.)

кривая
потенц.
энергии

Делается попытка объяснить наблюдаемую необычную последовательность колебательных уровней второго возбужденного $3^1\Sigma_g^+$ -состояния молекулы Li_2 . Неэмпирически методом эффективного потенциала, учитывающим дипольную и квадрупольную поляризуемость $1s^2$ -остова, рассчитана кривая потенц. энергии этого состояния. Использовался базис из 11 ф-ций, приводящий к правильным энергиям атомных $2s^2S$ -, $2p^2P$ -, $3s^2S$ - и ионного $2s^2\ ^1S$ -состояний. Кроме того, выбор базиса определялся возможностью правильного предсказания

ср. 1982, 18, N12

дипольной и квадрупольной поляризуемостей $2s^2S$ - и $2p^2P$ -атомов. Рассчитанная кривая потенц. энергии имеет несколько необычную форму: кроме минимума при малых расстояниях имеется второй широкий минимум, отделенный от основного невысоким барьером. Такое поведение объясняется доминирующей ролью кулоновского взаимодействия в конфигурации $Li^-—Li^+$ ионной пары на расстояниях до 5 Å. Необычен и колебательный спектр в таком потенциале: разность энергий колебательных уровней вначале монотонно падает, затем при достижении горба она возрастает и после прохождения горба опять начинает уменьшаться. Полученный спектр хорошо согласуется с экспериментальным.

А. А. Зембеков

Li₂

1982

4 Б1014. Современные достижения в релятивистской квантовой химии. Recent developments in relativistic quantum chemistry. Malli G. L. «Curr. Aspects Quantum Chem., 1981. Proc. Int. Conf. and Workshop, Barcelona, 28 Sept.—3 Oct., 1981». Amsterdam e. a., 1982, 199—218 (англ.)

Статья обзорного характера. На примере релятивистской теории одно- и многоэлектронных атомов рассмотрены проблемы вариационной неустойчивости, обусловленной примешиванием состояний с отриц. энергией к состояниям с положит. энергией в различных вариантах теории Дирака—Фока. Обсужден формализм метода Дирака—Фока для молек. систем с замкнутыми и открытыми электронными оболочками, а также схема построения многоконфигурац. метода Дирака—Фока. Проанализированы проблемы выбора базиса гауссовых и слэтеровских ф-ций при проведении релятивистских молек. расчетов. В кач-ве иллюстрации представлены результаты релятивистских расчетов орбитальных и полных энергий молекул Li₂, Be₂, F₂, а также LiH и H₂CO.

расчет E;



X. 1984, 19,
N 4

И. А. Тополь

112

[Ummuck 13987]

1982

Kb. mex.

racem

Ohtwada K.,

J. Chem. Phys., 1982,

76, N 5, 2565-2568.

Li₂ (кластеры)

1982

14 Б16. Исследование кластеров щелочных металлов методом псевдопотенциала с учетом конфигурационного взаимодействия, включающего двукратные возбуждения из нескольких исходных конфигураций. Raschioni Gianfranco, Beckmann Hans-Ottmar, Koutecký Jaroslav. Investigation of alkali-metal clusters with pseudopotential multireference double-excitation configuration interaction method. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 87, № 2, 151—158 (англ.)

расчет и.п.,
до, кометр,
структуры

Неэмпирическим методом ССП МО с учётом конфигурац. взаимодействия (КВ) и приближения псевдопотенциала (ПП) для учета остовных электронов проведены расчеты простейших кластеров M_2 и M_4 , $M = Li, Na, K$. Расчет КВ проводили в рамках процедуры учета всех однократно и двукратно возбужденных конфигураций по отношению к нескольким исходным конфигурациям (с использованием техники экстраполяции к нулевому порогу). Параметры полулокального ПП взя-

(+5) 

х. 1982, 19, N 14

Li₄, Na₂, N₄, K₂, K₄

ты из работы («Mol. Phys.», 1977, 33, 159). Рассчитанные в приближении ПП МО, корреляц. эффекты, геометрии кластеров, энергии диссоциации и ионизац. потенциалы хорошо согласуются с результатами расчетов, учитывающих все электроны. Расчеты двухатомных молекул приводят к хорошему согласию с экспериментом. Для M_4 найдена ромбич. геометрия в случае основных синглетного и плоская квадратная в случае триплетного состояний. С увеличением атомного номера различие в стабильности различных кластерных форм уменьшается, энергии связи тоже уменьшаются, а корреляц. эффекты возрастают.

А. Багатурьянц



Li₂

1982

' 96: 223601e Investigation of alkali metal clusters with pseudopotential multireference double-excitation configuration interaction method. Pacchioni, Gianfranco; Beckmann, Hans Ottmar; Koutecky, Jaroslav (Inst. Phys. Chem., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 87(2), 151-8 (Eng). The energies of dimers and tetramers of Li, Na, and K were calcd. by using a pseudopotential method with multiref. double-excitation CI. Results for Li and Na are compared with corresponding all-electron calcs. Geometry optimization of K₄ predicted a comparable stability for singlet rhombic and T-shaped forms and for the triplet square arrangement.

meepem.
pacrem

(75) 

C. A. 1982, 96, N 26.

 Li₃, Na₂ Na₃,
K₂, K₃

Li2

1982

8 Д149. Исследование кластеров щелочных металлов в приближении псевдопотенциала методом конфигурационного взаимодействия с включением двукратно возбужденных конфигураций по отношению к набору ссылочных функций. Investigation of alkali-metal clusters with pseudopotential multireference double-excitation configuration interaction method. Pacchioni Gianfranco, Beckmann Hans-Ottmar, Koutecký Jaroslav. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 87, № 2, 151—158 (англ.)

Do, M.N.

Методом конфигурац. взаимодействия в валентном приближении рассчитаны стабильность, равновесная геометрия и потенциалы ионизации димеров и тетрамеров Li, Na и K. В расчете использовалась схема эстраполяции результатов на полный учет конфигурац. взаимодействия в пространстве двукратно возбужденных конфигураций. Найдено, что в случае Li₄ и Na₄ наиболее устойчивой является ромбич. конформация, которой отвечает синглетное электронное состояние. Для K₄ ромбическая, квадратная и Т-образная конформации практически имеют одну и ту же энергию связи (соответственно 5,69; 5,07 и 5,03 ккал/моль).

15

ф. 1982, 18, № 8

Для молекул Li_2 , Na_2 , Li_4 и Na_4 проведены также расчеты с учетом всех электронов, результаты которых хорошо согласуются с результатами расчетов, сделанных в валентном приближении. А. Дементьев

Na_2 , K_2 , Li_4 , Na_4 , K_4

Ommuck 162831

1982

Liz

Painter G. S., Averill F. W.,

Hepner
66834

Phys. Rev. B: Condens.

Matter, 1982, 26, N 4,

781-790.

${}^6\text{Li}_2$, ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$

1982

99: 203233v New optically pumped alkali metal dimer lasers. Rajaei-Rizi, A.; Bahns, John T.; Verma, K. K.; Stwalley, William C. (Iowa Laser Fac., Univ. Iowa, Iowa City, IA 52242 USA). *Proc. Int. Conf. Lasers* 1981 (Pub. 1982), 447-9 (Eng). Stable unidirectional ring laser oscillation of optically pumped ${}^6\text{Li}_2$ and ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$ mols. was obtained for the 1st time. A total of 27 transitions for ${}^6\text{Li}_2$ and 3 transitions for ${}^6\text{Li}^7\text{Li}$ were obsd.; also 14 new Na_2 transitions were obsd. Transitions were obsd. in the range 5196-5889 Å pumping with one of 7 single-mode Ar ion laser lines in the 4579-5017 Å range.

(Accepted)

Na_2

c. A. 1983, 99, N24

Liz

Ommick 14511

1982

Rajaei-Lizi A., Bahns J.T.
et al.,

чекмп

Appl. Phys. Lett., 1982,
40, N10, 869-871.

Li-Li
Li-Li-Li

1982
Rao B.K., Das T.P.

потенц.
Ван-дер
Ваальс.
взаимод.

Pratapa 1982, 19
(3), 289-302.

●
(сер. Li-He; III)

1982

Li_2

Reynolds P. J., Ceperley
D. M., et al.

расчёт Li_2 ,
м. н.

J. Chem. Phys., 1982,
77, N 11, 5593 - 5603.

(свер. H_2 ; III)

Li₂

1982

5Д143. Электронное строение небольших кластеров металлов групп IA и IB. Electronic structure of small group IA and IB metal clusters. Richtsmeier Steven C., Eades Robert A., Dixon David A., Gole James L. «Metal Bond. and Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Metals. Symp. 181 Meet. Amer. Chem. Soc., Atlanta, Ga, March 31—Apr. 3, 1981». Washington, D. C., 1982, 177—205 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в больших базисах сгруппированных гауссовых ф-ций исследовано электронное строение Li₂, Li₃ (I), Li₅, Na₂, Na₃ (II). Проанализированы различные схемы расчета взаимодействия электрона с использованием неэмпирических волн. ф-ций. Детально проанализированы поверхности потенц. энергии (ППЭ) для I, I⁻ и II. Методом 2-атомных

расчет Li₂,

(14) IX

ср. 1984, 18, 25

фрагментов в молекулах рассчитаны I, II, K_3 , Rb_3 и CS_3 (кластеры металлов группы IA), Cu_3 , Ag_3 и Au_3 (кластеры металлов группы IB). Показано, что наиболее стабильной конфигурацией тримеров является 2B_2 симметрии C_{2v} . Тримеры являются связанными по отношению к диссоциации на атом и 2-атомную молекулу. В то же время подчеркнуто, что ППЭ тримеров очень пологи и их структура является гибкой, поэтому, хотя они и были изолированы в матрицах при низкой т-ре, в газовой фазе они должны быть гибкими и легко испытывать псевдовращение между состояниями 2A_1 и 2B_2 . Рассчитаны и подробно обсуждены колебательные частоты для этих состояний и отмечена трудность отнесения частот, связанная с гибкостью молекул. Библ. 64. В. Л.

Li₂

1982

96: 149370k Electronic structure of small Group IA and IB metal clusters. Richtsmeier, Steven C.; Eades, Robert A.; Dixon, David A.; Gole, James L. (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *ACS Symp. Ser.* 1982, 179 (Met. Bonding Interact. High Temp. Syst. Emphasis Alkali Met.), 177-205 (Eng). The electronic structures of Group IA and IB

Ae;

metal clusters were detd. using 2 theor. methods: ab initio MO theory and the semiempirical DIM method. Electron affinities for Li₂, Li₃, Li₂, Na₂, and Na₃ are detd. and various methods for calcg. the electron affinity from ab initio wavefunctions are considered. Surfaces for Li₃ and Li₃⁻ are discussed in detail with respect to electron attachment and detachment. Similar considerations are outlined for Na₃. The structures of the Group IA trimers, Li₃, Na₃, K₃, Rb₃, and Cs₃ were calcd. using the DIM method. The trimers are all bound with respect to dissocn. to atom plus diat. having C_{2v} structures, a ²B₂ (obtuse angle)

(+10) 



C.A. 1982, 96, N18

all. Ha asoroff

geometry being the most stable form. A 2A_1 state lies slightly higher in energy. A general discussion of the potential energy surface for the trimers is presented. Further DLM calcs. on the Group IB trimers (Cu_3 , Ag_3 , Au_3) are outlined and their similarity to the Group IA trimers is emphasized. Vibrational frequencies for the 2B_2 and 2A_1 configurations are presented (uncorrected for the effect of higher potential surfaces) in the hope that they will aid the search for trimer spectroscopic features in both matrix isolation and gas phase spectroscopic studies.

Li_3 (Ae, структура, парем)
 Li_5 (Ae)
 Na_2 (Ae)
 Na_3 (Ae, структура, парем)

K_3 (структура, парем)
 Cr_3 (— — — —)
 Rb_3 (— — — —)
 Cu_3 (теорет. парем)
 Ag_3 , Au_3 (структура, парем)

Li₂

Om. 15453

1982

4 Б21. Расчёт энергии диссоциации основного состояния Li₂ в рамках обобщенной геминальной модели. An extended geminal model calculation of the dissociation energy of the ground state of Li₂. Røeggen I. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 4, 398—404 (англ.)

Предложенный автором обобщенный метод геминалей (см. «Int. J. Quantum Chem.», 1981, 19, 319; 1981, 20, 817) применен для расчёта энергии диссоциации основного состояния молекулы Li₂ в базисе ОГТ [9s5p1d]. Расчёт выполнен в трех точках на потенциальной кривой вблизи предполагаемого равновесного межъядерного расстояния и для расстояния 50,0 ат. ед. Полученное значение энергии диссоциации 1,024 эВ — одно из наиболее близких к эксперим. значению $1,048 \pm 0,012$ по сравнению с предшествующими расче-

М.П., До

Х. 1983, 19, № 4.

тами, тогда как погрешность в определении равновесного межъядерного расстояния оказалась неожиданно большой — 0,017 Å. Обсуждены возможные источники ошибок данного расчета и др. теор. подходов к определению энергии диссоциации Li_2 . А. В. Немухин

Li₂

Om. 15453

1982

97: 223369f An extended geminal model calculation of the dissociation energy of the ground state of diatomic lithium. Roeeggen, I. (Inst. Math. Phys. Sci., Univ. Tromsøe, 9001 Tromsø, Norway). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 92(4), 398-404 (Eng). The dissoen. energy of the ground state of the Li₂ mol. was calcd. by using an extended geminal model. The calcd. result is 1.024 eV and the exptl. value is 1.018 ± 0.012 eV. The discrepancy can at least partly be attributed to a deficiency in the orbital basis set.

D₀;

C.A. 1982, 97, N26

Li₂

Om. 15453

1982

3 Д61. Расчеты энергии диссоциации основного состояния Li₂ в рамках расширенной модели геминалей. An extended geminal model calculation of the dissociation energy of the ground state of Li₂. Røeggen I. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 92, № 4, 398—404 (англ.)

Предложенный ранее («Intern. J. Quantum Chem.», 1981, 19, 319) расширенный вариант приближения антисимметризованного произведения сильно ортогональных геминалей (АПСОГ) использован для расчета параметров потенциальной кривой основного электронного

основн.
состоян.,
До потениз.
кривые

ср. 1983, 18, №3

состояния молекулы Li_2 в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций $[9s5p1d]$. Размерность орбитальных подпространств как для связывающей, так и для остовных электронных пар равнялась пяти, что обеспечивало удовлетворительное описание связывающей геминали при всех межъядерных расстояниях и достаточно точный учет энергии корреляции между электронными парами (ЭКМП). Полученное значение энергии диссоциации Li_2 составляет 1,024 эВ и отличается от экспериментального менее чем на 3%. Отмечено, что пренебрежение ЭКМП, эквивалентное переходу к обычной модели АПСОГ, увеличивает эту ошибку вдвое. Расчетная длина связи на 0,017 Å больше экспериментальной. Обсуждается возможность изменения различных составляющих корреляционной энергии при расширении базиса.

А. В. Зайцевский

Liz

1982

3 Б14. Необходимо ли представление об атомах для построения молекулярных электронных волновых функций? I. Модель ПОРП. Are atoms intrinsic to molecular electronic wavefunctions? I. The FORS model. Ruedenberg Klaus, Schmidt Michael W., Gilbert Mary M., Elbert S. T. «Chem. Phys.», 1982, 71, № 1, 41—49 (англ.)

Изложена концепция полного оптим. реакц. пространства (ПОРП) для описания электронной структуры молекул, меняющейся в ходе хим. превращения. Кроме вычислительных аспектов проблемы большое внимание уделено интерпретации молек. волновых ф-ций в привычных хим. терминах, в частности, тому, как сохранить представление об атомах, составляющих молек. систему. Отмечено, что для каждой молекулы можно т. обр. сгруппировать исходный набор примитивных гауссовых АО, чтобы выделить базисный набор

расчет
потенц.
кривой
основного
состояния

X: 1983, 19, N3

C2H4 (расчет потенц.
поверхн.)

доминирующих АО на каждом центре, совпадающий с миним. базисным набором атома. Сформулированы правила для дополнения этих миним. наборов до системы базисных ф-ций, позволяющих проводить достаточно точные расчеты. В таких базисах предполагается далее проводить оптимизацию МО методом МК ССП. При этом набор МО подразделяется на орбитали, заселенные в конфигурац. ф-циях, и орбитали, роль которых сводится лишь к исправлению в процессе итераций МК ССП орбиталей 1-го типа. Предполагается, что число МО первого типа не превышает суммарного числа АО в миним. базисных наборах атомов. Конфигурации, возникающие при распределении электронов молекулы всеми возможными способами по МО 1-го типа, образуют полное реакц. пространство. Модель ПОРП предполагает оптимизацию МО. Приведены примеры, иллюстрирующие описанную процедуру: расчет потенциальной кривой основного состояния молекулы Li_2 и расчет двух низших потенциальных Пв C_2H_4 .

А. В. Немухин



Li_2

1982

Сафронов А.А., изр.

расчет.

Вестн. МГУ. Химия

и.н.

1982, 22, № 1, 27-30.

●
(см. M_2 ; III)

Li₂

1982

№1 Б93. Неэмпирический расчет потенциала взаимодействия между атомами гелия в основном состоянии и [молекулами] Li₂ в состояниях $X^1\Sigma_g^+$ и $A^1\Sigma_u^+$. Staemmler V., Stahl U. Ab initio calculation of the interaction potential between ground state helium atoms and Li₂ in the $X^1\Sigma_g^+$ and $A^1\Sigma_u^+$. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1982, 86, № 5, 480—481 (англ.)

потенциал
кривые

Методами конфигурац. взаимодействия и связанных электронных пар с учетом всех одно- и двукратных возбуждений рассчитаны потенциальные Пв, отвечающие взаимодействию атомов гелия в основном состоянии с молекулами Li₂ в основном $X^1\Sigma_g^+$ и возбужденном $A^1\Sigma_u^+$ состояниях. Использован достаточно широкий базисный набор, позволяющий правильно описать как область отталкивания на коротких расстояниях, так и область дальнего взаимодействия. Найдено, что по сравнению с потенциалом He/Li₂($X^1\Sigma_g^+$) потенциал He/Li₂($A^1\Sigma_u^+$) характеризуется большей глубиной ямы при меньшем атом-молек. расстоянии и значительно большей анизотропией.

А. В. Немухин

Х. 1982, 19, №21

Li₂

1982

лазерный
чехия.

Stwalley, William

C. ; Verma, K.K. et al.

Proc. Int. Conf.
Lasers 1981 (Pub. 1982),
205-15.

(see. LiH; III).

Liz.

Omniuck 15872.7

1982

Szentpaly L., Fuentealba P.,
et al.,

No. 9

Chem. Phys. Lett., 1982, 93,
N6, 555-559.

M_2, M_2^+

Оттиск 14286 1982

М-щелочной
металл

19 Б20. Потенциальные кривые димеров щелочных металлов и их катионов. Новое спектроскопическое правило и предсказания на его основе. Szentpály László Von. Potential curves for the alkali dimers and their cations: a new spectroscopic rule and its predictions. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 88, № 3, 321—324 (англ.)

Отмечено, что форма потенциальных кривых состояний $A'\Sigma_u^+$ димеров щел. металлов практически совпадает с формой потенциальных кривых состояний $X^2\Sigma_g^+$ соотв-щих однозарядных катионов. Это приводит к близким значениям таких спектроскопич. постоянных как D_e , R_e , ω_e и B_e для этих состояний. Отмечена важность корреляц. эффектов для теор. объяснения такого совпадения. Предлагается использовать замеченную закономерность для предсказания неизвестных спектроскопич. св-в димеров щел. элементов и их однозарядных катионов.

В. Б. Павлов-Веревкин

М. П.,

потенц.
кривые

17
(10)

Х. 1982, 19, N 19.

см. № 10

$\text{Li}_2, \text{Li}_2^+, \text{Na}_2, \text{Na}_2^+, \text{K}_2, \text{K}_2^+,$
 $\text{Rb}_2, \text{Rb}_2^+, \text{Cs}_2, \text{Cs}_2^+$

$\frac{E}{V_c},$

7Li2

1982

Рыберг.
состоян.

/ 99: 30076r Rydberg states of dimeric lithium-7 by pulsed optical-optical double resonance spectroscopy. Tipton, Terence Lamar (Pennsylvania State Univ., University Park, PA USA). 1982. 183 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8305706. From Diss. Abstr. Int. B 1983, 43(10), 3257.

С.А. 1983, 99, N 4

Li₂

1982

Van Hooydonk G.

homoties.
op-uit

Z. Naturforsch., A
1982, 37A (9), 971-81.

(cell. H_2 ; III)

Li2

Omnuck 14032

1982

Varandas A.F.C., Bran
dao F.,

Mol. Phys., 1982, 45,
N 4, 857-875.

Кв. мех.
раств

Li_2

[Im. 15080]

1982

6 Б141. Связанные, индуцированные лазером флуоресцентные серии (СИЛ ФС) в $^7\text{Li}_2$. Coupled laser-induced fluorescence series (CLIFS) in $^7\text{Li}_2$. Verma K. K., Stwalley W. C. «Opt. Commun.», 1982, 43, № 3, 185—188 (англ.)

М.П.

Исследована относит. интенсивность линий в четырех сериях спектра флуоресценции молекулы $^7\text{Li}_2$, возбуждаемой Kr^+ лазером ($\lambda_{\text{возб}} = 568,2$ нм). Одновременно возбуждали четыре перехода: серия I — переход $B-X$, $V'=9$, $I'=25 \leftrightarrow V''=16$, $I''=25$; серия II — переход $B-X$, $9,32-16,31$; серия III — переход $A-X$, $25,24-5,23$; серия IV — переход $A-X$, $28,8-7,7$. В пределах одной серии наблюдается хорошее согласие эксперим. и вычисленных относит. интенсивностей линий, однако, при сравнении линий различных серий обнаружены значит. расхождения, проявляющиеся в усилении серии I. Рассмотрены три возможные причи-

X. 1983, 19, № 6

ны этого усиления, базирующиеся на взаимодействии серий, относящихся к $B-X$ и $A-X$ переходам через уровень $V''=16$, $Y''=25$ основного состояния $X^1\Sigma_g^+$. Этот уровень заселяется гл. обр. в результате флуоресценции из состояния A и одновременно является нижним уровнем для возбуждения серий I и II.

В. М. Ковба

Li₂

Om. 15080

1982

98: 9685h Coupled laser-induced fluorescence series (CLIFS) in diatomic lithium-7. Verma, K. K.; Stwalley, W. C. (Iowa Laser Facil., Univ. Iowa, Iowa City, IA 52242 USA). *Opt. Commun.* 1982, 43(3), 185-8 (Eng). The enhancement was demonstrated of a fluorescence series by simultaneous pumping of a 2nd coupled series at the same frequency. By using a Kr⁺ laser (568.2 nm) and ⁷Li₂ mols. 4 fluorescence series and enhanced emission were obsd. from B¹Π_u(v' = 9, J' = 25). This enhancement results from the coupling of an A-X series and a B-X series through the level S¹Σ_g⁺(v'' = 16, J'' = 25). This level is populated primarily through the A-X fluorescence and at the same time is the lower level for the excitation of the B-X series.

A-X

B-X

лазер. возб.
флуорес.

C.A. 1983, 98, N2.

Li₂

От. 15080 1982

3 Д850. Индуцированные лазером связанные флуоресцентные серии (CLIFS) в молекулах ${}^7\text{Li}_2$. Coupled laser-induced fluorescence series (CLIFS) in ${}^7\text{Li}_2$. Verma K. K., Stwalley W. C. «Opt. Commun.», 1982, 43, № 3, 185—188 (англ.)

В области 460—900 нм исследованы спектры флуоресценции (ФЛ) молекул ${}^7\text{Li}_2$ в газовой фазе при возбуждении переходов $X \rightarrow B [v''=16, J''=25 \rightarrow v'=9, J'=25 \text{ (I)}; v''=16, J''=31 \rightarrow v'=9, J'=32 \text{ (II)}]$ и $X \rightarrow A [v''=5, J''=23 \rightarrow v'=25, J'=24 \text{ (III)}]$ излучением Кг⁺-лазера (568,2 нм). Установлено, что отношение интенсивности ФЛ I/ФЛ II в 1,7 раза превышает теоретич. значение, вычисленное в предположении равновесного заселения уровней нижнего состояния $X^1\Sigma_g^+$. Предположено, что причиной наблюдаемого усиления ФЛ I является дополнительное заселение нижнего уровня перехода I за счет ФЛ III. Отмечена возможность достижения высокого коэф. усиления и получения лазерной генерации при переходах с $\lambda=694,33$ нм ($A^1\Sigma_u^+, v'=25, J'=24 \rightarrow X^1\Sigma_g^+, v''=16, J''=25$) в молекулах ${}^7\text{Li}_2$ при оптической накачке излучением Кг⁺-лазера.

С. Литке

М.П.

90.1983, 18,
N3

h₂

1982

5 Д380. Триплетная сателлитная полоса в дальней области голубого крыла самоуширенной резонансной линии лития. Triplet satellite band in the very far blue wing of the self-broadened lithium resonance line. Veză D., Milošević S., Pichler G. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, № 4, 401—405 (англ.)

В диапазоне 570—680 нм исследован спектр поглощения молекулярного лития и в дальней области голубого крыла самоуширенной первой резонансной линии лития. Обнаружено широкое слабое плечо, интерпретированное как сателлитная триплетная полоса $^3\Pi_g \rightarrow ^3\Sigma_u^+$. При интерпретации использованы результаты ab initio расчетов потенц. кривых состояний $^3\Sigma_u^+$ и $^3\Pi_g$ молекулы лития.

спектр,
линии
кривые

ф. 1983, 18, N 5

Li₂

1982

9 Б165. Триплетная сателлитная полоса в очень далекой части голубого крыла самоуширенной резонансной линии лития. Triplet satellite band in the very far blue wing of the self-broadened lithium resonance line. Veză D., Milošević S., Pichler G. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 93, № 4, 401—405 (англ.)

Измерены спектры поглощения нагретых паров лития ($T \sim 1150-1250$ K) в области голубого крыла самоуширенной первой резонансной линии лития (670,8 нм). Наблюдаемое одновременно с системой $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ Li₂ широкое плечо в области 580—650 нм связано с переходом $^3\Pi_g - ^3\Sigma_u^+ + \text{Li}_2$, существование которого ранее предсказывалось на основании теор. расчетов («J. Phys. Chem.», 1982, 86, 1099; «J. Chem. Phys.» 1980, 72, 2612).

В. М. Ковба

) М. П.

X. 1983, 19, N 9

Liz

1982

11 Д67. Потенциальные кривые для димеров щелочных металлов и их катионов. Новое спектроскопическое правило и его предсказания. Potential curves for the alkali dimers and their cations: a new spectroscopic rule and its predictions. Von Szentpály László. «Chem. Phys. Lett.» 1982, 88, № 3, 321—324 (англ.)

Для димеров щелочных металлов и их ионов обнаружена эмпирич. закономерность, заключающаяся в том, что основные характеристики возбужденного электронного термина $A^1\Sigma^+$ димера A_2 практически совпадают с характеристиками основного состояния $X^2\Sigma^+$ иона A_2^- . Таковыми являются энергии диссоциации, равновесные расстояния, частоты колебаний и вращательные постоянные. Эта закономерность не следует из простой картины МО и требует для своего объяснения точного учета электронной корреляции. На основе этой закономерности предсказаны некоторые неизвестные спектроскопич. константы состояний $A^1\Sigma^+$ и $X^2\Sigma^+$. А. Воронин

расчет
м.п.

⊠
(79)

Фр. 1982, 18, № 11

$\text{Na}_2, \text{K}_2, \text{Rb}_2, \text{Cs}_2, \text{Na}_2^+, \text{K}_2^+,$
 $\text{Rb}_2^+, \text{Cs}_2^+$

