

BaH⁺



BaH⁺

1973

Gaspar R., Tamassy-Lentei I. 1973

"Acta phys. Acad. sci. hung.", 1973,

33, N^o 3-4, 387-398.

(cm. CuH, III)

(cm. CuH; III)

BaH⁺

эммеа 8738

1979

Кб. исх.
фракт.

Гулько Р.

E; $\bar{Ue}$, до
сис. ност.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1979, p 1256-76

(сис. LeH⁺; III)

BaD^+

1980

(80)

④ $Ba (H^+)$



X. 1980

N 23

23 Б900. Экспериментальное и теоретическое исследование реакции $Ba^+(D_2, D)BaD^+$. Последовательная импульсная модель эндотермических реакций. Argenteau P. B., Beauchamp J. L. Experimental and theoretical studies of the reaction $Ba^+(D_2, D)BaD^+$: sequential impulse model for endothermic reactions. «Chem. Phys.», 1980, 48, № 3, 315—320 (англ.)

Путем селективного измерения интенсивности Ba^+ и BaD^+ после прохождения пучка Ba^+ через газовую мишень D_2 определялось сечение эндотермич. ионо-молек. р-ции $Ba^+(D_2, D)BaD^+$ как функция энергии столкновения. Последовательная импульсная модель прямых р-ций (Mahan B. H., и др., «J. Chem. Phys.», 1976, 65, 3888) распространена на эндотермич. р-ции. Рассматривается пример р-ции тяжелого атома с легкой гомоядерной двухатомной молекулой. Теоретически определенная функция возбуждения хорошо описывает эксперим. данные, что позволило оценить энергию диссоциации BaD^+ ($2,5 \pm 0,1$ эВ) и энергию сродства к протону для Ba^+ (250 ± 3 ккал/моль).

А. И. Маергойз

BaH^+

расчет,
длины
связей
спектр

077. 12599

1981

3 Д63. О влиянии d -орбиталей на релятивистское сокращение длин связей. On the effect of d orbitals on relativistic bond-length contractions. Pyykkö P., Snijders J. G., Baerends E. J. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 83, № 3, 432—437 (англ.)

Пертурбационный метод Хартри—Фока в одноцентровом разложении и пертурбационный метод Хартри—Фока—Слэтера применены к изучению длины связей десяти молекул от BaH^+ и CsH до $ZrCl_4$ и $HfCl_4$ с целью установления влияния d -АО на релятив. сокращение длин связей. Учет d -АО в CsH и BaH^+ вызывает укорачивание связи на 16 и 19 пм соответственно, улучшая согласие с экспериментом. Установлена важность $5d$ -АО для BaH^+ по сравнению с $6s$ -АО, что объясняет укорачивание BaH^+ на 36 пм по сравнению с CsH . Рассмотрены релятив. эффекты в BaH^+ и CsH , а также химич. подобность Zr и Hf . Указано, что большее релятив. сокращение в HfX_4 (« $X=H, Cl$ ») по сравнению с ZrX_4 компенсирует расширение оболочечной структуры.

А. Б. Болотин

(+g) X

ср. 1982, 18, N 3.

BaH^{2+}

1986

11 Д97. Молекулярные Σ -состояния для $(BaX)^{2+}$, где $X=H, Li, Na, K$ или Rb . Σ molecular states for $(BaX)^{2+}$ where $X=H, Li, Na, K$ or Rb . Valance A., Bernier A., Bergeron H. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 6, 857—871 (англ.).

С использованием одноэлектронной модели гамильтониана в диапазоне межъядерных расстояний $4 \div 20$ ат. ед. рассчитаны энергии Σ -состояний молекулярных ионов BaX^{2+} , где $X=H, Li, Na, K$ или Rb . Для описания взаимодействия электрона с ионным остовом использован метод псевдопотенциала. Предсказаны стабильные состояния иона BaX^{2+} в основном электронном состоянии с глубиной потенциальной ямы, равной 1,46; 0,35; 0,3; 0,55 и 0,55 эВ соответственно для $X=H, Li, Na, K$ и Rb . Для возбужденного состояния BaX^{2+} , коррелирующего с $Ba^+(6S) + X^+$, глубина потенциальной ямы равна 0,1; 0,6; 0,3, 0,1 эВ для $X=H, Li, Na, K$.
Б. Ф. Горднеев

л.л.

(+11) 

ср. 1986, 18, N11

$BaLi^{2+}$, $BaNa^{2+}$,
 BaK^{2+}

$(BaX)^{2+}$

1986

22 Б1037. Молекулярные Σ -состояния для $(BaX)^{2+}$, где $X=H, Li, Na, K$ или Rb . Σ -molecular states for $(BaX)^{2+}$ where $X=H, Li, Na, K$ or Pb . Valance A., Bernier A., Bergeron H. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 6, 857—871 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые Σ -состояний ионов BaX^{2+} , где $X=H, Li, Na, K$ и Rb . Использованы локальные псевдо-Пт для Na, K и Rb и модельный Пт для Li . Для описания взаимодействия электрона с остовом Ba^{2+} предложен «псевдомодельный» Пт, включающий независимый от l псевдо-Пт и модельный Пт с ограниченным числом остовных состояний. Одноэлектронный модельный гамильтониан диагонализирован в базисе водородоподобных ф-ций $1s, 2s, 3s, 2p, 3p, 4p, 4d, 4f$ на каждом центре. Для потенциальных кривых состояний, диссоциирующих на $Ba^{2+}+X$ в основных состояниях, глубина потенциальной ямы составила 1,46; 0,35; 0,3; 0,55 и 0,55 эВ для $X=H, Li, Na, K$ и Rb соответственно.

А. А. Сафонов

М. А.

(74)

X: 1986, 19, № 22

$(BaLi)^{2+}, (BaNa)^{2+},$
 $(BaK)^{2+}, (BaRb)^{2+}$

BaH²⁺

OM 24173

1986

105: 214230k Σ molecular states for (BaX)²⁺ where X = H, Li, Na, K or Rb. Valance, A.; Bernier, A.; Bergeron, H. (LURE, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1986, 19(6), 857-71 (Eng). Mol. Σ states of BaX²⁺ with X = H, Li, Na, K, or Rb was calcd. by using a 1-electron Hamiltonian model. The active electron was described for the Li atom by a model potential, and for Na, K and Rb atoms by a local pseudopotential; whereas for the Ba⁺ ions, a new approach was used that involves both these methods. Stable states were predicted for states that dissociate into Ba²⁺ + X (ground state), with well depths of 1.46, 0.35, 0.3, 0.55, and 0.55 eV for X = H, Li, Na, K, and Rb, resp. Long-lived states were predicted for Ba⁺(6s) + X⁺, with well depths of 0.1, 0.6, 0.3, and 0.1 eV for X⁺ = H⁺, Li⁺, Na⁺, and K⁺, resp.

теорет.
расчет
номеров.
критерия

(74)



BaLi²⁺



BaNa²⁺

BaK²⁺

BaRb²⁺

C. A. 1986, 105, N 24

ВАН⁺

(DM. 29806) 1987

Fuentealba P., Reyes O.,

Результ
основн.
состоян.,
колебан.
частоты,
Do

Mol. Phys., 1987, 62,
N 6, 1291-1296.

BaH⁺ [Dm. 34017] 1990

Charessian E., Brusch M.
et. al.,

meopem
pacem

J. Amer. Chem. Soc. 1990,

112, 7179 - 7189

Theoretical Study 20

Transition - Metal Hydrides.

5. HfH^+ through HgH^+ ,
 BaH^+ , and ZnH^+ .

Ball

1992

✓ 12 Б1097. Инфракрасные спектры высокого разрешения BaH, BiH и BiD. The high resolution infrared spectra of BaH, BiH and BiD. /Walker K. A., Hedderich H. G., Bernath P. F. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992.—Columbus (Ohio) 1992.—С. 69.—Англ.

М.Н.

Измерены (фурье-спектрометр) ИК-спектры испускания высокого разрешения молекул BaH и BiH и BiD, получающихся при вз-вии нагретых паров металлов с водородом или дейтерием. Получены наборы параметров Данхема (Y_{ij}) и приведенных по массе параметров Данхема (U_{ij}). В. М. Ковба



X. 1993, N 12

BaH⁺

1993

118 241275d Theoretical study of the low-lying electronic states of the hydrobarium(1+) (BaH⁺) molecular ion. Allouche, A. R.; Spiegelmann, F.; Aubert-Frecon, M. (Lab. Spectrom. Ionique et Mol., Univ. Lyon I, Batim. 205, 43 Blvd. du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 204(3-4), 343-9 (Eng). A theor. study was made of the electronic structures of all the mol. states of BaH⁺ dissociating into the three lowest asymptotes Ba⁺ + H. The method used was basically the same as that previously used (A. R. A., et al., 1992) with success to describe the mol. BaH. Values are given for spectroscopic constants for previously unknown ^{1,2}A⁽⁺⁾ and ¹⁰A⁽⁺⁾ bound states.

Аллуше А.
Спигельманн
Ф. Ауберт-Фрекон

C.A. 1993, 118, N24