

$Ar_2^+$

I-1435

A.P. ( $\text{Ne}^+$ ,  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{NeAr}^+$ ,  $\text{Ar}_2^+$ )

I960

Fuchs R., Kaul W.

Z.Naturforsch., I960, I5a, N 2, I08-II5  
(нем.)

Масс-спектро-метрическое обнаружение  
молекулярного иона  $\text{Ne Ar}^+$

РЖХим., I96I, I4B50

|Bp-1206-III|1960

$Ar_2^+$

I-1436 Kaul W.; Fuchs R.

"Z. Naturforsch.", 1960,

(A.P) 15a, N4, 326-35.

Масс-спектр. исследований.  
ионизации  $Ar$  с  $N_2$  и  $N_2^+$ .

1962

$Ar_2^+$

Binding energy of  $Ar_2^+$  from ion-scattering data. Robert D. Cloney, Edward A. Mason, and Joseph T. Vanderslice (Univ. of Maryland, College Park). *J. Chem. Phys.* 36, 1103-4(1962). Elastic and inelastic scattering measurements of  $Ar^+$  in Ar were made. A binding energy of 0.0035 e.v. is estd. The addn. of dispersion and induction energies as a 2nd-order correction increases this value to 0.056 e.v. The 3-electron-bond energy approxn. does not hold for  $Ar_2^+$ . Henry Leidheiser, Jr.

C. A. 1962. 57. 4

40476c

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>

2Б32. Энергия связи  $\text{Ar}_2^+$  из данных по рассеянию ионов. Cloney Robert D., Mason Edward A., Vanderslice Joseph T. Binding energy of  $\text{Ar}_2^+$  from ion scattering data. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 4, 1103—1104 (англ.)

Упругое и неупругое рассеяние  $\text{Ar}^+$  в  $\text{Ar}$  определяются потенциальными кривыми  $\Phi_u$  и  $\Phi_g$ , соответствующими электронным состояниям  $\text{Ar}_2^+ {}^2\Sigma_u$  и  ${}^2\Sigma_g$ . Оба состояния диссоциируют на продукты в основных состояниях и энергия взаимодействия равна  $\Phi_{u,g} = = De\{\exp 2\alpha[1 - (r/r_e)] + 2\exp \alpha[1 - (r/r_e)]\}$ . При малых расстояниях отличие  $\Phi_u$  от  $\Phi_g$  невелико и обе кривые аппроксимируются выражением  $\Phi_{u,g} = A \exp(-br)$ . Параметры  $A$  и  $b$  определены из поперечных сечений упругого рассеяния и равны  $5,38 \cdot 10^6$  эв и  $5,09 \text{ \AA}^{-1}$  (справедливо от 2,47 до 3,39 А). Обнаружено, что  $Q$  ( $Q$  — поперечное сечение обмена заряда) линейно зависит от  $\lg W$  ( $W$  — энергия пучка ионов). Из этой прямой найдены величины  $\alpha De$  и  $\alpha/r_e$ , так что  $\alpha = 8$ ;  $De = 0,0035$  эв;  $r_e = 4,5 \text{ \AA}$  (справедливо от 3,54 до 5,06 А). При учете дисперсионной и индукционной

2.1963.2.

энергии  $De^-$  повышается до 0,056 эв. Величина  $De$  во много раз меньше предсказанной Полингом для  $A_2^+$  (1,2 эв) на основании идеи трехэлектронной связи, что отвергает представления о трехэлектронной связи.  
М. Дяткина



$Ar_2^+$

Ларин И.К.,  
Мамброзе В.П.

1962

Кин. и кат., 3, 305

Do

"Loaded" новое и термическое равновесие нонизации газов.

● (См.  $H_3^+$ ) I

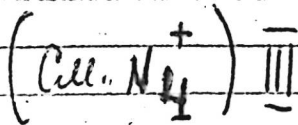
I962

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>

Varney R.N.

Ionization phenomena in gases. Vol I  
p.42-6

The formation and stability of molecular ions.



I-3135

1963

$\text{Ar}_2^+$  ( ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ) расчет

Cloney Robert D., Mason Edward A.,

Vanderslice Joseph T.

Binding energy of  $\text{Ar}_2^+$  from ion  
scattering data. "J. Chem. Phys.",  
1962, 36, N 4, 1103-1104 ( англ. )

РХ., 1963, 2, Б32

10

X1-2062

1963

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>Munson M. S., Franklin J. L.,  
Field F. H.

No

J. Phys. Chem., 1963, 67, n 7, 1542.

Масс-спектрометрич. исследование молекулярных ионо-  
мерных газов с одиона-  
ковыми и разесеченными  
ядрами. (См. III Gl<sub>2</sub><sup>+</sup>)

X. 1964. 6535

Dr. <sup>+</sup> (A.P.)

11

XI 2070

1965

Becker P.M., Lampe F.W.;

J. Chem. Phys., 1965, 42(11), 3857-63.

Mass-spectrometric study of the  
bimolecular formation of diato-  
mic argon ion.

10

CA, 1965, 63, 41, 34c

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

(X1-2166) Niles F. B.,  
Robertson W. W.

1965

и. н.

Do

J. Chem. Phys., 1965, 43, N 3,  
1076.

Преобразование атомных ионов  
в молекулярные в ионизи-  
рованных газах

(ср. Гл.)

1966

24 Б904. Изучение образования двухатомных ионов в аргоне, криптоне и ксеноне методом фотоионизации. Huffman Robert E., Katayama Daniel H. Photoionization study of diatomic-ion formation in argon, krypton, and xenon. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 1, 138—146 (англ.)

С помощью ионизац. камеры измерены зависимости тока фотоионизации (ФИ) газообразных  $X = \text{Ar}$ ,  $\text{Kr}$  и  $\text{Xe}$  от длины волны вакуумного УФ-света (континуум спектра испускания конденсированного электрич. разряда в  $\text{He}$  и  $\text{Ar}$ ;  $\lambda 580—1500 \text{ \AA}$ ). Обнаружено, что эти зависимости имеют максимумы при  $\lambda$ , соответствующих резонансным линиям поглощения газов. Поэтому ФИ приписана процессам типа:  $X + h\nu \rightarrow X^*$  (1);  $X^* + X \rightarrow X_2^+ + e$  (2). По величинам  $\lambda$ , соответствующим максимумам ФИ, идентифицировано  $\sim 20$  возбужденных реагирующих состояний  $X^*$  для каждого газа. Пороги ФИ най-

х. 1967. 24

(+2) 18

дены равными (эв): Ar  $14,710 \pm 0,009$ ; Kr  $13,004 \pm 0,007$ ; Xe  $11,162 \pm 0,005$ , что хорошо согласуется с измерениями потенциалов появления ионов  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$  и  $Xe_2^+$  методом электронного удара. На основании пороговых энергий даны оценки энергий связей  $X_2^+$  (в эв): Ar 1,049; Kr 0,995, Xe 0,967. В случае  $X=Ar$  для процессов  $X^* \rightarrow X' + h\nu'$  (излучательная дезактивация) (3) и  $X^* + X \rightarrow X'' + X$  (4) получено отношение констант скоростей  $k_4/k_2 = 0,13 - 2,5$  (для различных  $\lambda$ ) и  $k_2/k_3 = 3,6 \cdot 10^{-18} - 1,28 \cdot 10^{-16}$  см<sup>3</sup>/атом. При исследованиях  $X=He$ , Ne, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O не удалось обнаружить пиков ФИ, связанных с образованием димерных ионов.

В. Е. Скурат

1966

 $\text{Ar}_2^+$  $\text{Kr}_2^+$  $\text{Xe}_2^+$ 

УД 177. Фотоионизационное исследование образования двухатомного иона в Ar, Kr и Xe. Huffman Robert E., Katayama Daniel H. Photoionization study of diatomic-ion formation in argon, krypton, and xenon. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 1, 138—146 (англ.)

В вакуумной УФ-области наблюдался ионизационный ток при длинах волн дискретных линий поглощения пяти резонансных серий Ar, Kr, Xe. Ионизация обусловлена процессами столкновения атомов, находящихся в электронном возбужденном и основном состоянии, что приводит к образованию двухатомного иона и электрона. Найдено с помощью непрерывных He- и Ar-источников возбуждения, что ионизация наблюдается в каждой линии поглощения при длинах волн меньших некоторого порога ионизации, который равен для Ar, Kr и Xe соот-

7 2

ф. 1967. 52

X

ветственно (в эв):  $14,710 \pm 0,009$ ;  $13,004 \pm 0,007$ ;  $11,162 \pm 0,005$ . Число найденных возбужденных состояний повышено по сравнению с результатами других исследований, а энергетич. значения потенциалов ионизации хорошо согласуются с потенциалами появления. Из порогов ионизации получены следующие нижние пределы для  $D(X_2^+)$ : Ag 1,049; Kr 0,995; Xe 0,967 (в эв). Выход ионизации в линиях поглощения Ag дает величины  $k_4/k_2$  (отношение девозбуждающих столкновений к столкновениям, приводящим к образованию двухатомного иона) от 2,5 до 0,13 и величины  $\tau k_2$  (произведения эффективно-го радиационного времени жизни и константы процесса образования иона) от  $3,6 \cdot 10^{-18}$  до  $1,28 \cdot 10^{-16}$  см<sup>3</sup>атом<sup>-1</sup>. Библ. 36.

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>

(20)

+1

103006u Mass-spectrometric study of ions in Xe, Kr, Ar, Ne at pressures up to 40 torr: termolecular formation of the rare-gas molecular ions. Bond dissociation energy of  $\text{Ar}_2^+$  and  $\text{Ne}_2^+$ . P. Kebarle, R. M. Haynes, and S. K. Searles (Univ. of Alberta, Edmonton, Can.). *J. Chem. Phys.* 47(5), 1684-91(1967)(Eng). The pos. ions obtained from  $\alpha$ -particle irradiation of the rare gases Xe, Kr, Ar, Ne were studied at 5-40 torr. In all cases both the rare-gas mol. ion  $\text{R}_2^+$  and the at. ion  $\text{R}^+$  could be observed. The  $\text{R}_2^+/\text{R}^+$  ratio could be decreased by the addition of gases which react with  $\text{R}_2^+$  and  $\text{R}^+$  through charge transfer. This technique led to a determination of the rate constant for the termolecular reaction  $\text{R}^+ + 2\text{R} \rightarrow \text{R}_2^+ + \text{R}$ . The rate constant for Ar is  $6 \times 10^{-32} \text{ cm}^3 \text{ atom}^{-2} \text{ sec}^{-1}$ . The ratio of Hornbeck-Molnar ionization to direct ionization in Ar was found equal to 0.4.  $\text{Xe}_2^+$  is a major ion in Kr (at 20 torr) containing 10 ppm. Xe. The kinetics of the efficient formation of  $\text{Xe}_2^+$  is examined.  $\text{Xe}_2^+$  is formed by  $\text{Kr}_2^+ + \text{Xe} \rightarrow \text{KrXe}^+ + \text{Kr}$  followed by  $\text{KrXe}^+ + \text{Xe} \rightarrow \text{Xe}_2^+ + \text{Kr}$ . The rate constant for these two reactions are estimated at  $10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ sec}^{-1}$ . Both reactions must be exothermic. A schematic representation of the energies of formation of the Kr and Xe, homo- and heteronuclear ions is given. Changes in the charge-transfer

1987

X1-1262

[X]

C.A. 1987. 67. 22

spectrum of ethylene with change of the concn. ratio of  $R_2^+$  and  $R^+$  are used to derive the ethylene charge-transfer spectrum due to  $R^+$  and  $R_2^+$ . The charge-transfer spectrum with  $R^+$  is in agreement with that obtained from expts. using low pressures and near-thermal velocity  $R^+$ . The charge-transfer spectrum due to  $R_2^+$  is used in conjunction with the breakdown graph of ethylene to obtain the recombination energy, R.E., of  $R_2^+$ . The bond dissoen. energy of  $R_2^+$  is then estd. from  $D(R^+-R) = I.P.(R) - R.E.(R_2^+)$ . Values of 1.5-2 ev. are obtained for the dissoen. energies of  $Ar_2^+$  and  $Ne_2^+$ .

RCJQ

X1- 1262

1967

8 Б75. Масс-спектрометрическое изучение ионов Xe, Kr, Ar, Ne при давлении до 40 мм: термоллекулярное образование молекулярных ионов инертных газов. Энергия диссоциации  $Ar_2^+$  и  $Ne_2^+$ . Кебарле Р., Наупес Р. М., Сearles S. K. Mass-spectrometric study of ions in Xe, Kr, Ar, Ne at pressures up to 40 torr: termolecular formation of the rare — gas molecular ions. Bond dissociation energy of  $Ar_2^+$  and  $Ne_2^+$ . «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 5, 1684—1691 (англ.)

В масс-спектрометре под давл. 5—40 мм изучено взаимодействие  $R^+ + 2R \rightarrow R_2^+ + R$  (I),  $R_2^+ + C_2H_4 \rightarrow 2R + C_2H_4^+$  (где  $R = Xe, Kr, Ar, Ne$ , ионизируемые  $\alpha$ -радиацией).  $Xe_2^+/Xe \sim 20$  (20 мм). Ar и Ne имели примеси, поэтому  $Ar_2^+$  и  $Ar^+$  составляли только 40% от общего ионного тока.  $Ar_2^+/Ar^+ \sim 5$  (20 мм). Константа

X. 1968. 8



р-ции 1 для Ag  $6 \cdot 10^{-32}$  см<sup>3</sup>·атом<sup>-2</sup>·сек<sup>-1</sup>. Xe<sub>2</sub><sup>+</sup> является  
 максимальным ионом при анализе Kr (20 мм), что  
 обусловлено большой примесью Xe; константа скорости  
 предполагаемых двух р-ций  $Kr_2^+ + Xe \rightarrow KrXe^+ + Kr$ ,  
 $KrXe^+ + Xe \rightarrow Xe_2^+ + Kr$  равна  $10^{-10}$  см<sup>3</sup>·моль<sup>-1</sup>·сек<sup>-1</sup>.  
 При различных парциальных давл. C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> спектр переноса  
 заряда R<sub>2</sub><sup>+</sup> (R<sup>+</sup>) + C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> → C<sub>2</sub>H<sub>4</sub><sup>+</sup> + 2R(R) меняется.  
 По этому изменению спектра определена энергия ре-  
 комбинации (ЭР) R<sub>2</sub><sup>+</sup> и энергия диссоциации (ЭД)  
 связи R—R<sup>+</sup> из ур-ния ЭД (R—R<sup>+</sup>) = ПИ(R) — ЭР(R<sub>2</sub><sup>+</sup>),  
 где ПИ — потенциал ионизации. ЭД лежит в пределах  
 1,5—2 эв.

Ю. В. Денисов

1967

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>  
Ar<sub>6</sub><sup>+</sup>

7 Д206. Масс-спектрометрическое обнаружение полимерных соединений аргона в сопловых пучках. I. Общее поведение и равновесные концентрации димеров. Milne Thomas A., Greene Frank T. Mass spectrometric observations of argon clusters in nozzle beams. I. General behavior and equilibrium dimer concentrations. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 10, 4095—4101 (англ.)

Приведены эксперим. данные о кинетике образования и поведения ван-дер-ваальсовых полимерных соединений аргона, наблюдаемых в сопловых пучках. Установка имела три камеры с диффер. откачкой и времяпролетным масс-спектрометром в качестве детектора. Ошибка в определении отношения интенсивностей ионов мономер/димер составляла менее 50%. Распределения полимерных соединений не очень чувствительны к энергии ионизиру-

Ф. 1968. 77

ющих электронов в области 20—50 эв. Кривые эффективности ионизации для  $\text{Ag}_2^+$  и  $\text{Ag}_6^+$  имеют одинаковую форму. Потенциалы появления  $\text{Ag}_2^+$  и  $\text{Ag}_6^+$  примерно на 1 эв меньше, чем у  $\text{Ag}^+$ . Обнаружено, что полимерные соединения рассеиваются из пучка при столкновениях так же, как и мономеры. Исследованы зависимости образования полимерных соединений от величины диаметра сопла и давления в источнике пучка. Исследовано влияние добавок  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$ , Ne,  $\text{D}_2$ , O,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  на образование димера. При этом наблюдалось образование димеров  $(\text{CO}_2)_2^+$ ,  $(\text{N}_2)_2^+$ . Сравнение экспериментально измеренных констант димера с рассчитанными теоретически указывает на равновесную природу образования димеров.

Л. А. Русин

$\text{He}_2^+$ ,  $\text{Ne}_2^+$ ,  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{F}_2^-$ ,  $\text{Cl}_2^-$ ,  $\text{Cl}_2$  (Do, u.n.;  
очн. код. pariem) 1971

Gilbert T.L., Wahl A.C., 2749

J. Chem. Phys., 1971, 55, N11, 5247-5261  
(ann.)

(Calc.  $\text{He}_2^+$ ; III)

Single-configuration wavefunc-  
tions and potential curves  
for low-lying states of  $\text{He}_2^+$ ,  
 $\text{Ne}_2^+$ ,  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{F}_2^-$ ,  $\text{Cl}_2^-$  and the  
ground state of  $\text{Cl}_2$ . 6  
P. H. X. M., 1972, 8526 (17)

1973

$Ar-Ar^+$

Tong, Harry H., et al;

J. Chem. Phys.,

1973, 59(5), 2316-23.

(70)

(crs.  $N_4^+$ ;  $\overline{1}$ )

Ар. Ар<sup>+</sup>

1974.

Ерфеевкова Л. Л.

и др.

параметры

взаимод. «Оптика и спектроскоп»

1974, 36 (1), 67-68

(см. Li-ионит, III)

X1-4931

1974

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>

kb. sec.

fact

138856r Differential elastic scattering measurements of ~~potentials~~ on xenon and argon(+) on argon in the 20-340-eV range. Jones, P. R.; Conklin, G. M.; Lorents, D. C.; Olson, R. E. (Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *Phys. Rev. A* 1974, 10(1), 102-9 (Eng). Relative measurements are reported of the differential cross sections for the elastic scattering of Xe<sup>+</sup> on Xe and Ar<sup>+</sup> on Ar at energies 20-340 eV and lab. angles 1-15°. The data are presented in terms of the reduced cross section  $\rho(\theta) \equiv \theta \sin \theta \sigma(\theta)$  and the reduced angle  $\tau \equiv E \theta$ . The  $\rho$ -vs.- $\tau$  plots for Xe<sup>+</sup> on Xe show complex oscillations which were attributed primarily to phase interference in scattering from 3 coherent pairs of gerade-ungerade potential curves. The 6 states involved are the electronic fine-structure states of Xe<sub>2</sub><sup>+</sup>, 4 of which dissociate to Xe + Xe<sup>+</sup>(<sup>2</sup>P<sub>3/2</sub>), and the other 2 to Xe + Xe<sup>+</sup>(<sup>2</sup>P<sub>1/2</sub>). At larger values of  $\tau$ , the elastic scattering pattern is further complicated by potential-curve crossings and excitation to higher states; at smaller  $\tau$ , potential wells give rise to 2 rainbow peaks. Two difference potentials for Xe<sub>2</sub><sup>+</sup> were detd. from the 2 oscillatory patterns in the data. The Ar<sup>+</sup> on Ar data are in excellent agreement with scattering calcns. based upon ab initio computations of the  $\Pi_u$  and  $\Pi_g$  potentials of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>.

C.A. 1974  
8/24

50416, 1346

Ch, Ph, TC, MGU

30063

(крив.  
пог. жн.)  
 $Ar^+ + Ar$

1975

\* 4-8665

Sidis V. — Barat M., Dhuicq D.

Molecular study of  $Ar^+ + Ar$  collisions.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1975,

8, N3, 474-493

(англ.)

0347 пик

316 320

339

ВИНИТИ

1976

$H_2^+$

Carrington A, et al.

- Mol. Phys., 1976, 32,  
N.1, 297-300.

(лазерн.  
источник)

(all  $H_2^+$ ) III

60306.3723  
Ph, Ch, TC, MGU

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> 42529  
(pomogues)  
1976  
4-14/29

Miller Thomas M., Ling Joyce H., Sa-  
xon Roberta P., Moseley John T.  
Absolute total cross sections for the pho-  
todissociation of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>, Kr<sub>2</sub><sup>+</sup>, Xe<sub>2</sub><sup>+</sup>, KrN<sub>2</sub><sup>+</sup>,  
and KrN<sup>+</sup> from  
665 to 695 nm.  
"Phys. Rev. A: Gen. Phys.", 1976, 13, N 6,  
2171-2177 (SHTA.)

067.8 mmk

646 655 6 7 0

BMHMTA

5 Д227. Фотодиссоциация ионных димеров  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Ne}_2^+$  и  $(\text{CO}_2)_2^+$ . Vestal M. L., Mauclaire G. H. Photodissociation of the dimer ions  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Ne}_2^+$  and  $(\text{CO}_2)_2^+$ . «Chem. Phys. Lett.», 1976, 43, № 3, 499—501. (англ.)

С помощью тандемного квадрупольного фотодиссоциативного масс-спектрометра, описанного авторами ранее (РЖФиз, 1975, 3Д289), изучены реакции фотодиссоциации димеров  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Ne}_2^+$  и  $(\text{CO}_2)_2^+$ . Сечение диссоциации  $\text{Ar}_2^+$  сильно зависит от давления в ионизационной камере, изменяясь от  $2 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup> при 0,1 мм рт. ст. до  $6 \times 10^{-19}$  см<sup>2</sup> при 0,5 мм рт. ст. Этот эффект объясняется зависимостью вероятности перехода со связанного  $^2\Sigma_u^+$ -состояния в диссоциативное  $^2\Pi_g$ -состояние от номера колебательного уровня связанного состояния. Данный переход более вероятен для высоких колебательных уровней, которые, однако, сильнее релаксируют при повышении давления, что и приводит к уменьшению сечения. Обнаружено сильное увеличение сечения фотодиссоциации  $(\text{CO}_2)_2^+$  в области  $\lambda > 620$  нм. Предполагается, что этот процесс может быть важен для ионосфер, богатых  $\text{CO}_2$ , как, например, у Марса.

Е. П. Смирнов

1976

15291-5K

(42)

18

ф.1977 N5

фото-  
диссоц.

$(\text{CO}_2)_2^+$

$\text{Ne}_2^+$

$\text{Ar}_2^+$

1976

$Ar_2^+$   
 $Ne_2^+$   
 $(CO_2)_2^+$

фотодиссо-  
 циация

⊠ (+2)

х. 1977  
 N 9

9 Б933. Фотодиссоциация димерных ионов  $Ar_2^+$ ,  $Ne_2^+$  и  $(CO_2)_2^+$ . Vestal M. L., Mauclaire G. H. Photodissociation of the dimer ions  $Ar_2^+$ ,  $Ne_2^+$  and  $(CO_2)_2^+$ . «Chem. Phys. Lett.», 1976, 43, № 3, 499—501 (англ.)

На установке, состоящей из 3 последовательных квадрупольных масс-спектрометров, изучены спектры фотодиссоциации (ФД) ионов  $Ar_2^+$ ,  $Ne_2^+$  и  $(CO_2)_2^+$  и измерены абс. сечения  $\sigma$  ФД. Для ФД  $Ar_2^+ + h\nu \rightarrow Ar^+ + Ar$  при  $\lambda = 590-620$  нм  $\sigma = (5-25) \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>, уменьшаясь с ростом давл. в ионном источнике от 0,1 до 0,5 мм. Такое влияние давл. объяснено тем, что ФД происходит в основном из колебательно-возбужденных состояний  $Ar_2^+(^2\Sigma_u^+)$ , к-рые дезактивируются соударениями при повышении давл. Для ФД  $Ne_2^+ + h\nu \rightarrow Ne^+ + Ne$   $\sigma = (3-5) \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>, возрастая с уменьшением  $\lambda$  от 620 до 590 нм. Для процесса  $(CO_2)_2^+ + h\nu \rightarrow CO_2^+ + CO_2$  с ростом  $\lambda$  от 305 до 627 нм  $\sigma$  монотонно возрастает от  $(1,8 \pm 0,4) \cdot 10^{-18}$  до  $(25,0 \pm 1,0) \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup>. Сделан вывод, что ФД  $(CO_2)_2^+$  может играть важную роль в ионосферах таких планет как Марс, где  $CO_2$  является одним из главных компонентов.

В. Е. Скурат

15251  
 45.16251

$\text{Ar}_2^+$

1977

Garrington A., Sarre P.J.

Mol. Spectrosc. Proc. 6th,  
Conf. Durham, 1976, London,  
1977, 505-518.

Зеекмп.  
Сеекмп.

  
гем.  $\text{H}_2^+$ ; III )

миса 5688

$Ar_2^+$

потенц.  
Кривые

1978

1 Д359. Фотофрагментарная спектроскопия и потенциальные кривые  $Ar_2^+$ . Moseley J. T., Saxon R. P., Huber B. A., Cosby P. C., Abouaf R., Tadjeddine M. Photofragment spectroscopy and potential curves of  $Ar_2^+$ . «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 4, 1659—1668 (англ.)

Для 14 длин волн в диапазоне 4579—7995 Å получены энергетич. распределения продуктов фотодиссоциации ионов  $Ar_2^+(^2\Sigma_u^+)$ . Измерения выполнены с использованием коаксиальных и перпендикулярных ионного (3 кэВ) и лазерного ( $Ar^+$ - и  $Kr^+$ -лазеры) пучков с поляризацией, соответственно перпендикулярной и параллельной направлению ионного пучка. В исследованной спектральной области наблюдаются переходы в диссоциативные состояния  $^2P_g$  и  $^2\Sigma_g^+$  иона  $Ar_2^+$ . На основании полученных данных с использованием результатов теоретич. расчетов определены потенц. кривые состояний  $^2\Sigma_u^+$ ,  $^2\Sigma_g^+$  и  $^2P_g$ . Обсуждены: влияние спин-орбитального взаимодействия на форму потенциальных кривых, величина и спектральная зависимость сечения фотодиссоциации и угловое распределение фотофрагментов. Библи. 27.

В. С. Иванов

Ф. 1978  
N1

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

оттиски 5688

1977

4 Б1144. Фотофрагментная спектроскопия и потенциальные кривые иона Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>. Moseley J. T., Saxton R. P., Huber V. A., Cosby P. C., Abouaf R., Tadjeddine M. Photofragment spectroscopy and potential curves of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 4, 1659—1668 (англ.)

(%)  
Измерены распределения по кинетич. энергиям продуктов фотодиссоциации  $\text{Ar}_2^+ (^2\Sigma_u^+) + h\nu \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$  (1), происходящей через диссоциативные состояния  $^2\Pi_g$  и  $^2\Sigma_g^+$ , при 14 значениях длины волны в диапазоне от 4579 до 7993 Å. Измерения проводили с пучком ионов Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> с энергией 3 кэВ и излучением лазеров непрерывного действия, направленным в коаксиальном или поперечном направлении относительно ионного пучка и поляризованным соотв. перпендикулярно и параллельно направлению пучка. Получена энергия диссоциации  $D_0(\text{Ar}_2^+) = 1,33 \pm 0,02$  эВ, согласующаяся с известными лит. данными. Полученные данные исполь-

ж. 1978, № 4

зованы для построения потенциальных кривых состояний  $^2\Sigma_u^+$ ,  $^2\Sigma_g$  и  $^2\Pi_g^+$  иона  $\text{Ag}_2^+$ . Обсуждается влияние спин-орбитального взаимодействия на потенциальные кривые. Получены расчетные зависимости сечений фотодиссоциации от длины волны (максимум  $6 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$  достигается при 300 нм для перехода  $\text{Ag}_2^+(^2\Sigma_u^+, v=0) + h\nu \rightarrow \text{Ag}_2^+(^2\Sigma_g^+) \rightarrow \text{Ag}^+ + \text{Ag}$ ) и угловые распределения фотопродуктов.

В. Е. Скурат



Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

cm muck 5688

1977

nominal  
p-441

87:159445s Photofragment spectroscopy and potential curves of diatomic argon(+). Moseley, J. T.; Saxon, R. P.; Huber, B. A.; Cosby, P. C.; Abouaf, R.; Tadjeddine, M. (Mol. Phys. Cent., Stanford Res. Inst., Menlo Park, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(4), 1659-68 (Eng). Photofragment energy distributions were measured for the process  $\text{Ar}_2^+(^2\Sigma_u^+) + h\nu \rightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar}$  using a 3 keV ion beam and cw lasers both coaxial and crossed with the ion beam, polarized, resp., perpendicular and parallel to the ion beam direction. Measurements were made at 14 wavelengths between 4579 and 7993 Å. Transitions to the dissociative states  $^2\Pi_g$  and  $^2\Sigma_g^+$  are obsd., as are the effects of the spin-orbit interaction in  $\text{Ar}_2^+$ . The exptl. results are used along with theor. calcs. to det. the  $^2\Sigma^+$ ,  $^2\Sigma_g^+$ , and  $^2\Pi_g$  potentials. The effects of the spin-orbit interaction on the potential curves, the magnitude and wavelength dependence of the photodissocn. cross section, and the angular distributions of the photofragments are considered.

C.A. 1977, 87, N20

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>

Ng C.Y.

1977

Report 1976, LBL-5439, 185 pp.  
Avail. NTIS. From ERDA  
Energy Res. Abstr. 1977,  
2(7), Abstr. No. 18523.

No.



(cur. NO) III

Оттиски 5782

1977

5 Б129. Теоретическое определение диссоциативных сечений поглощения в  $\text{Ar}_2^+$ . Stevens Walter J., Gardner Maureen, Kato Arnold, Juliennne Paul. Theoretical determination of bound-free absorption cross sections in  $\text{Ar}_2^+$ . «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 5, 2860—2867 (англ.)

В базисе слейтеровских функций проведены неэмпирич. расчеты кривых потенциальной энергии и моментов переходов в состояния  $^2\Sigma_u^+$ ,  $^2\Pi_g$ ,  $^2\Pi_u$  и  $^2\Sigma_g^+$  иона  $\text{Ar}_2^+$ , связанных с ион-атомной асимптотой  $^2P+^1S$ . Полученные данные использованы для теор. расчета диссоциативных сечений поглощения, соотв-щих переходам из связанного основного  $^2\Sigma_u^+$ -состояния в отталкивательные  $^2\Pi_g$ - и  $^2\Sigma_g^+$ -состояния. Для перехода  $^2\Sigma_u^+ \rightarrow ^2\Pi_g$  получено значение максимума сечения поглощения  $2,6 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$  ( $\lambda = 716 \text{ нм}$ , полуширина  $185 \text{ нм}$  при комн. т-ре). Переход  $^2\Sigma_u^+ \rightarrow ^2\Sigma_g^+$  более интенсивен ( $\sigma_{\text{макс}} = 0,5 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ ,  $\lambda = 300 \text{ нм}$ , полуширина  $75 \text{ нм}$  при комн. т-ре). Полученные данные сравнены с имеющимися в лит-ре и отмечено, что расчетные сечения в  $\sim 3$  раза превышают эксперим. значения.

С. Б. Осин

$\text{Ar}_2^+$

расчет  
кривых  
потенциальной  
энергии

Х, № 5, 1978

Страница 5782

1977

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

4 Д149. Теоретический расчет сечения поглощения для связанно-свободных переходов в Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>. Stevens Walter J., Gardner Maureen., Като Arnold., Julianne Paul. Theoretical determination of bound-free absorption cross sections in Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>. «J. Chem. Phys.», 1977, 67, № 6, 2860—2867 (англ.)

исслед.  
кривые

эмпирическим методом ССН МО ЛКАО в базисе слэтеровых орбиталей выполнен расчет кривых потенц. энергии электронных состояний  $^2\Sigma_u^+$ ,  $^2\Pi_g$ ,  $^2\Pi_u$  и  $^2\Sigma_g^+$  иона Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> для значений межъядерного расстояния от 3 до 20 бор. Полученные потенц. кривые с учетом спин-орбитального взаимодействия использованы для расчета дипольных моментов и сечения поглощения переходов  $^2\Sigma_u^+ \rightarrow ^2\Pi_g$ ,  $^2\Sigma_u^+ \rightarrow ^2\Sigma_g^+$ ,  $^2\Pi_u \rightarrow ^2\Pi_g$  и  $^2\Pi_u \rightarrow ^2\Sigma_g^+$  Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>. Вычисленное значение сечения поглощения для полосы с центром при 716 нм ( $^2\Sigma_u^+ \rightarrow ^2\Pi_g$ ) ( $2,6 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>) в 3 раза больше эксперим. значения. Предсказано интенсивное поглощение на переходе  $^2\Sigma_u^+ \rightarrow ^2\Sigma_g^+$  ( $\sigma \sim 0,5 \cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup>) с максимумом при 300 нм и шириной 75 нм.

М. Р. Алиев

Ф. Н. Ч. 1978

$Ar_2^+$

omnibus 5782

1977

87: 175302y Theoretical determination of bound-free absorption cross sections in diatomic argon(+). Stevens, Walter J.; Gardner, Maureen; Karo, Arnold; Julianne, Paul (Laser Phys. Sect. 277.05, Natl. Bur. Stand., Boulder, Colo.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(6), 2860-7 (Eng). Ab initio calcs. were carried out for the potential energy curves and transition moments of the  $2\Sigma_u^+$ ,  $2\Pi_u$ , and  $2\Sigma_g^+$  states of  $Ar_2^+$  which arise from the  $+P + 1S$  ion-atom asymptote. These data were used in a theor. calcn. of the dissociative absorption cross sections from the bound  $2\Sigma_u^+$  state to the repulsive  $2\Pi_g$  and  $2\Sigma_g^+$  states. The  $2\Sigma_u^+ \rightarrow 2\Pi_g$  transition, which is dominated by spin-orbit effects, has a max. absorption cross section of  $2.6 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$  centered at 716 nm with a full width at half-max. of 185 nm at room temp. The  $2\Sigma_u^+ \rightarrow 2\Sigma_g^+$  transition is much stronger with a max. cross section of  $0.5 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$  centered at 300 nm with a full width at half-max. of 75 nm at room temp.

nb. all  
fact

C.A. 1977. 87. v 22

$Ar_2^+$

выпущен 6087

1977

6 Д508. Теоретические спектры поглощения  $Ne_2^+$ ,  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$  и  $Xe_2^+$  в ближней УФ-области спектра. Wadt Willard R., Cartwright David C., Cohen James S. Theoretical absorption spectra for  $Ne_2^+$ ,  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$ , and  $Xe_2^+$  in the near ultraviolet. «Appl. Phys. Lett.», 1977, 31, № 10, 672—674 (англ.)

Неэмпирическим методом с учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны спектры поглощения ионов  $Ne_2^+$ ,  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$  и  $Xe_2^+$  (переходы  $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ ) для т-р газа 100, 300 и 600° К. Полученные спектры имеют близкую форму, differing only by a shift of the absorption maximum from  $\approx 260$  nm у  $Ne_2^+$  до  $\approx 380$  nm у  $Xe_2^+$ . Рассчитанные энергии диссоциации для  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$  и  $Xe_2^+$  равны 1,19; 1,05 и 0,79 эв, что отличается на 0,1—0,2 эв от значений, измеренных фотоионизационным методом. Приведены данные расчета сечений поглощения ионами излучения  $KrF$  (248 nm)-,  $XeBr$

спектр  
поглощения

(+2) □

ф. 1978, №

надо (+2)  $Kr_2^+$   $Xe_2^+$

(282 нм)-,  $\text{XeCl}$  (308 нм)- и  $\text{XeF}$  (352 нм)-лазеров. Отмечена сильная зависимость сечений от т-ры газа. На основе полученных данных сделан вывод о целесообразности использования в  $\text{XeF}$ -лазере в качестве буферного газа  $\text{Ne}$  вместо  $\text{Ar}$  поскольку поглощение  $\text{Ne}_2^+$  при  $\lambda=352$  нм на порядок меньше, чем у  $\text{Ar}_2^+$ . Показано также, что концентрация  $\text{Xe}_2^+$  в плазме разряда в  $\text{XeF}$ -лазере должна быть достаточно мала для оптимальной работы последнего. Библ. 37. С. Л.

$Ar_2$ ;  $(Ar_2^+)$

$Kr_2$

$Kr_2^+$

$E_i$ ;  $\nu_i$

(43)

2. 1979  
N 2

оттиски 6522 1978

С 2 Б150. Фотоэлектронные спектры  $Ar_2$  и  $Kr_2$  и энергии диссоциации ионов димеров инертных газов. Dehmer P. M., Dehmer J. L. Photoelectron spectra of  $Ar_2$  and  $Kr_2$  and dissociation energies of the rare gas dimer ions. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 125—133. (англ.)

С разрешением  $\sim 20$  мэв измерены возбуждаемые источником He-I фотоэлектронные спектры (ФЭС) молекул  $Ar_2$  и  $Kr_2$ , образующихся в сверхзвуковом молекулярном пучке. Наблюдаемые в ФЭС  $Ar_2$  полосы 15,55; 15,67; 15,87 и 15,99 эв отнесены к переходам  $Ar_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow Ar_2^+(A^2\Sigma_{(1/2)u}^+, B^2\Pi_{(3/2)g}, C^2\Pi_{(1/2)u})$  и  $D^2\Sigma_{(1/2)g}^+$ ; предполагается, что последнее состояние чисто отталкивательное). К аналогичным переходам отнесены полосы 13,76; 13,90; 14,57 эв в ФЭС  $Kr_2$  (4-я полоса перекрывается с интенсивным атомным пиком  $Kr^+2P_{1/2}$ ). Определены энергии диссоциации  $Ar_2^+$  и  $Kr_2^+$  в указанных состояниях 1,33; 0,14; 0,10 эв и 1,15; 0,16; 0,4 эв соотв. Значения  $D(B^2\Pi_{(3/2)g})$  и  $D(C^2\Pi_{(1/2)u})$  выше рассчитанных ранее методом КВ на 30%, а

$D(A^2\Sigma_{(1/2)u})$  на 10%. Путём согласования вычисленных факторов Франка—Кондона для переходов  $Ag_2(Kr_2)-X^1\Sigma_g^+ \rightarrow Ag_2^+(Kr_2^+)A^2\Sigma_{(1/2)u}^+$  с наблюдаемыми полосами ФЭС, рассчитаны кривые потенциальной энергии  $Ag_2^+$  и  $Kr_2^+$  в состоянии  $A^2\Sigma_{(1/2)u}^+$ . Показано, что при больших межъядерных расстояниях ф-ция Морзе плохо описывает потенциальные кривые  $Ag_2^+$  и  $Kr_2^+$  в основном электронном состоянии. Полученные результаты сопоставляются с данными по ФЭС  $He_2$ . В. М. Ковба

$Ar_2^+$

1978

Michels H. H. et al

рекур.  
символ.

Int. J. Quantum Chem.,  
1978, Quantum Biol. Symp.,  
v12, 257-269



rec.  $Ne_2^+$ ; III )

$Ar_2^+$

1978

Michels H.H. et al

J. Chem. Phys., 1978, 69 (4),  
5151-62.

оригинал  
номериз.  
журнал.



(см.  $Ne_2^+$ ; III)

1978

$Ar_2^+$   
 $Kr_2^+$   
 $Ne_2^+$

Электр.  
спектр.  
и потенц.  
кривые

(+2)  $\boxtimes$

11 F25. Электронное строение ионов димеров благородных газов. I. Кривые потенциальной энергии и спектроскопические постоянные. Michels H. H., Hobbs R. H., Wright L. A. Electronic structure of the noble gas dimer ions. I. Potential energy curves and spectroscopic constants. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 11, 5151—5162 (англ.)

Методом ССП- $X_\alpha$  рассеянных волн в модели перекрывающихся атомных сфер рассчитано электронное строение и потенциальные кривые основного и ряда возбужденных связанных и несвязанных состояний ионов ( $Ne_2^+$ )  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$  и  $He_2^+$ . Для каждого состояния каждого из ионов проводилась оптимизация как степени перекрывания сфер, так и обменного параметра  $\alpha$ . Для сравнения потенциальные кривые ряда состояний  $Ar_2^+$  рассчитаны неэмпирич. методом взаимодействия валентных конфигураций. Для каждого из связанных состояний исследованных ионов были вычислены спектроскопич. постоянные. Эффекты спин-орбитального взаимодействия учитывали в рамках  $\Lambda$ -S-связи. В ряду  $Ne_2^+ - He_2^+$  наблюдается определенная связь между

Х. 1979, 111

изменениями значений энергий диссоциации и значениями равновесных межъядерных расстояний для основных состояний  $A^2\Sigma^{+}_{1/2u}$ . Энергии диссоциации в ряду  $Ne_2^+ - Xe_2^+$  убывают от 1,31 до 1,0 эв. При этом межъядерные расстояния возрастают от 1,7 до 3,2 А. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия энергии диссоциации для всех ионов имеют примерно одинаковое значение  $1,38 \pm 0,02$  эв. Потенциальные кривые, рассчитанные  $X_\alpha$ -методом, сопоставлены с данными различных неэмпирич. расчетов. Качественно потенциальные кривые в различных расчетах согласуются между собой. В колич. отношении отличия между потенциальными кривыми в неэмпирич. расчетах и  $X_\alpha$ -методом возрастают при уменьшении межъядерных расстояний.

И. А. Тополь



$Ar_2^+$

1978

Schmidt H.M. et al

publ.  
revers.

Chem. Phys. 1978, 29,  
N1-2, 219-30 (ans)

ex. He $_2^+$  - III

$Ar^+ - Ar$

сечение  
столкнов.

Ф. 1978  
N 11

11 Д113. Измерения в скрещенных пучках дифференциальных сечений упругого рассеяния и перезарядки при столкновениях  $Ar^+ - Ar$  с низкой энергией. Vestal M. L., Blakley C. R., Futrell J. H. Crossed-beam measurements of differential cross sections for elastic scattering and charge exchange in low-energy  $Ar^+ - Ar$  collisions. «Phys. Rev.», 1978, A17, № 4, 1337—1342 (англ.)

Измерены диффер. сечения столкновений  $Ar^+ - Ar$  при четырех значениях энергии в Л-системе в диапазоне 2,7—20 эв и углах рассеяния 2—90° с помощью установки со скрещенными пучками. Пучок нейтральных атомов Ar создавался путем сверхзвукового истечения смеси  $H_2$  и 7,8% Ar. Данные представлены в виде абс. диффер. сечений в Ц-системе в зависимости от относительной поступательной энергии движения частиц и от угла рассеяния в Ц-системе. Авторы отмечают, что представленные ими результаты и использование итерационной методики обращения позволили бы более точно, чем до сих пор, определить дальнедействующую часть потенциала  $Ar^+ - Ar$  для существенного диапазона межъядерных расстояний. Предварительная интерпретация данных по радужному рассеянию дала для энергии диссоциации  $D_e$  состояния  $^2\Sigma_u^+$  иона  $Ar_2^+$  значение  $1,40 \pm 0,05$  эв.

Б. В. А.

1978

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> (De)

1978

89: 31111d Crossed-beam measurements of differential cross sections for elastic scattering and charge exchange in low-energy argon(+)-argon collisions. Vestal, M. L.; Blakley, C. R.; Futrell, J. H. (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, Utah). *Phys. Rev. A* 1978, 17(4), 1337-42 (Eng). Differential cross sections for Ar<sup>+</sup>-Ar collisions were measured at 4 lab. energies in the range 2.7-20 eV and lab. scattering angles from 2 to 90° using a crossed-beam app. Data are presented as abs. differential cross sections in the center-of-mass coordinate system as functions of relative translational energy and center-of-mass scattering angle. The data presented should be sufficient to allow rather precise detn. of the long-range portion of the Ar<sup>+</sup>-Ar interaction potentials. Preliminary interpretation of the rainbow scattering data gives a dissocn. energy  $D_e$  for the  ${}^2\Sigma_u^+$  state of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> of  $1.40 \pm 0.05$  eV.

C. A., 1978, 89, N4

1978

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>М. Н. Е.  
расчет  
потенц.  
кривых

(72) 14

16 Б38. Электронные состояния  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Kr}_2^+$ ,  $\text{Xe}_2^+$ . I. Потенциальные кривые с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия. Wadt Willard R. The electronic states of  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Kr}_2^+$ ,  $\text{Xe}_2^+$ . I. Potential curves with and without spin-orbit coupling. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 2, 402—414 (англ.)

• Методом ССП в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций с учетом поляризац. d ф-ций проведен расчет потенциальных кривых основных состояний молекул  $\text{X}_2$  и низколежащих состояний типа  $^2\Sigma_{g,u}^+$  и  $^2\Pi_{g,u}$  ионов  $\text{X}_2^+$ , где  $\text{X} = \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$ . Результаты расчета нейтр. молекул сопоставлены с результатами применения модели электронного газа. Указанные молек. ионы рассчитаны также методом configuraц. взаимодействия (КВ) в различных базисах МО с полным учетом одно- и двукратно возбужденных конфигураций, а также упрощенным вариантом метода КВ, в к-ром учитываются одно- и двукратно возбужденные конфигурации, отвечающие возбуждению с верхних занятых МО и с замещением на виртуальные орбитали не более одной занятой МО. Сравнение результатов показало, что ис-

X, 1978, N16

пользование этого варианта метода КВ допустимо для правильного описания низколежащих возбужденных состояний молекул. Этот же подход был использован для расчета потенциальных кривых систем  $X_2^+$  с учетом спин-орбитального взаимодействия по схеме метода атомов в молекуле, что практически свелось к добавлению к диагональным элементам матрицы гамильтониана небольших поправок, рассчитанных по эксперим. данным для атомов. Подробно обсуждены изменения потенциальных кривых при учете релятивистских поправок, закономерности изменения положений и глубины потенциальных ям, а также значения энергии диссоциации. Оценены интенсивности основных электронных переходов. Рассмотрены закономерности в спектрах указанных систем. Подчеркнута важность полученных результатов для развития лазерной техники.

В. И. Пупышев



1978

$Ar_2^+$   
 $Kr_2^+$   
 $Xe_2^+$

Кривые  
потенц.  
энергии

9 Д107. Электронные состояния  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$ ,  $Xe_2^+$ .  
Ч. I. Кривые потенциальной энергии, рассчитанные с  
учетом и без учета спин-орбитальной связи. Wad t  
Willard R. The electronic states of  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$ ,  $Xe_2^+$ .  
I. Potential curves with and without spin-orbit coupling.  
«J. Chem. Phys.»; 1978, 68, № 2, 402—414 (англ.)  
Методом конфигурац. взаимодействия с учетом и без  
учета спин-орбитального взаимодействия рассчитаны  
кривые потенц. энергии нижних состояний молекул  
 $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$  и  $Xe_2^+$ . Спин-орбитальное взаимодействие  
учитывалось методом атомов в молекулах. Рассчитан-  
ные энергии диссоциации основного  $1(1/2)_u$  состояния  
 $Ar_2^+$  и  $Kr_2^+$  отличались от эксперим. значения на 10%,  
для  $Xe_2^+$  согласие оказалось несколько хуже и ошибка



(+2) ☒  
ар. 1978, № 9

составляла 20%. Оказалось, что глубина потенц. ямы уменьшается от 1,19 эв для  $\text{Ag}_2^+$  до 0,79 эв для  $\text{Xe}_2^+$  в основном из-за эффектов, связанных со спин-орбитальным взаимодействием, а рассчитанная длина связи возрастает от  $\text{Ag}_2^+$  к  $\text{Xe}_2^+$  вследствие увеличения размера атомов. Первое возбужденное  $I(3/2)_g$  состояние для всех димеров обладает небольшой ямой при больших (3—4 Å) межатомных расстояниях. Более высоколежащие возбужденные состояния оказались все отталкивательными. В этой системе термов имеются три дипольно разрешенных перехода: переход  $I(1/2)_u \rightarrow I(3/2)_g$  является очень слабым, интенсивность перехода  $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$  сильно возрастает в ряду  $\text{Ag}_2^+ \rightarrow \text{Xe}_2^+$  из-за спин-орбитальных эффектов, переход  $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$  является очень сильным с некоторым уменьшением интенсивности при переходе к более тяжелым димерам. Определены также максимумы сечений поглощения, которые в целом хорошо согласуются с экспериментальными.

А. Зембеков

1978

 $Ar_2^+$  $Kr_2^+$  $Xe_2^+$ 

Кв. вес.

раств

мг/мл

Д.А. Евстафьев

(+2)  $\boxtimes$ 

С.А. 1988, 88, 11

88: 112637m The electronic states of diatomic argon(+), diatomic krypton(+), diatomic xenon(+). I. Potential curves with and without spin-orbit coupling. Wadt, Willard R. (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(2), 402-14 (Eng). The low-lying states of  $Ar_2^+$ ,  $Kr_2^+$ , and  $Xe_2^+$  were investigated using the POL CI method. Spin-orbit coupling was included with a simple atoms-in-mol. approach. The calcd. dissocn. energies for the ground  $I(1/2)$ , states of  $Ar_2^+$  and  $Kr_2^+$  are in good agreement (10% error) with expt., while the agreement is slightly worse (20% error) for  $Xe_2^+$ . The well depth decreased from 1.19 eV in  $Ar_2^+$  to 0.79 eV in  $Xe_2^+$  mainly because of spin-orbit effects. As expected, the calcd. bond distances increase from  $Ar_2^+$  to  $Xe_2^+$  as the atoms increase in size. The 1st excited state,  $I(3/2)$ , possesses a small well (0.13 eV) at larger distances (3-4 Å) in all the rare gas dimer ions. The higher excited states arising from the lowest asymptote are more repulsive. There are 3 dipole-allowed transitions from the ground state. The  $I(1/2)_u \rightarrow I(3/2)_g$  transition, which occurs in the near IR, is very weak in accordance with propensity rules based on changes in  $\Omega$ . The  $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$  transition occurs between 700-800 nm and grows dramatically in intensity from  $Ar_2^+$  to  $Xe_2^+$  because of spin-orbit effects. The predicted increase in intensity is in excellent agreement with expt. Finally, the  $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$

transition is very strong with the intensity decreasing slightly for the heavier rare gas dimer ions. The absorption max. are predicted at 319, 339, and 375 nm for  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Kr}_2^+$ , and  $\text{Xe}_2^+$ , resp., which are to be compared with the exptl. values of 292 and 325 nm for  $\text{Ar}_2^+$  and  $\text{Kr}_2^+$ , resp. The theor. values for the peak absorption cross sections are in good agreement with expt. for  $\text{Ar}_2^+$  and  $\text{Kr}_2^+$ . Thus, although the calcd. wavelengths for the peak absorption are too long by 20-30 nm, the size and shape of the calcd. absorption bands should be in good agreement with expt. Finally, a comparison is made between the ab initio SCF potentials for the  $^1\Sigma_g^+$  state of  $\text{Ar}_2$ ,  $\text{Kr}_2$ , and  $\text{Xe}_2$  with the potentials predicted by the electron gas model.

$Ar_2^+$

omnueu 7765

1979

nomerus.  
krubel

Janča J; Talsni A  
Czechoslovak J Phys.  
1979, B29 (3) 329-37

1979

91: 96997h Electron-impact ionization of diatomic argon, argon-krypton, diatomic krypton, krypton-xenon, and diatomic xenon. Helm, H.; Stephan, K.; Maerk, T. D. (Inst. Theor. Phys., Univ. Innsbruck, Innsbruck, Austria). *Phys. Rev. A* 1979, 19(6), 2154-60 (Eng). Relative cross sections for electron-impact ionization of the rare-gas van der Waals dimers  $\text{Ar}_2$ ,  $\text{ArKr}$ ,  $\text{Kr}_2$ ,  $\text{KrXe}$ , and  $\text{Xe}_2$  were measured with a mass spectrometer in the electron energy range from threshold to 180 eV. The appearance potentials for direct ionization from the corresponding neutral dimers were (in eV):  $\text{Ar}_2^+$  ( $15.2 \pm 0.2$ ),  $\text{ArKr}^+$  ( $14.0 \pm 0.2$ ),  $\text{Kr}_2^+$  ( $13.45 \pm 0.3$ ),  $\text{KrXe}^+$  ( $12.2 \pm 0.2$ ), and  $\text{Xe}_2^+$  ( $11.75 \pm 0.3$ ). These values agree with those obtained in recent photoelectron studies. The appearance potential of  $\text{Ar}_2^+$  formation via associative ionization of Ar atoms is  $14.6 \pm 0.2$  eV.

(A.P.)

(44) ☒

©.A., 1979, 91, N/2

$Ar_2^+$

1979

Michels H. H. et al

дл. спектры

J. Chem. Phys., 1979, 41(12),  
5053-62.

(см.  $Ne_2^+$ ; III)

$Ar_2^+$

1978

Moseley J. T.

Proc. Int. Conf Lasers 1978

(Pub. 1979), 207-14.

gomo-  
guccos.

ex.  $O_2^+ - \text{II}$

$Ar_2^+$

номер 7881 [1979]

Radier K., et al

орто-  
нормализован,  
нормировано  
ссылка

J. Chem. Phys., 1979,  
70 (1), 221-27

$Ar_2^+$

1979

12 Д193. Преддиссоциация колебательно возбужденных  $Ar_2^+$ , образованных путем ассоциативной ионизации. Røse T. L., Katayama D. H., Welsh J. A., Paulson J. F. Photodissociation of vibrationally excited  $Ar_2^+$  formed by associative ionization. «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 10, 4542—4551 (англ.)

Экспериментально определены сечения фотодиссоциа-

прото —

диссоциации

д.

ор. 1049/112

ции  $\text{Ag}_2^+$  в ионном пучке при длинах волн 265—715 нм. Ионы  $\text{Ag}_2^+$  получались путем ассоциативной ионизации в ионном источнике. Обнаружено, что сечение фотодиссоциации, которая происходит в результате фотовозбуждения  $\text{Ag}_2^+$  с основного терма  $^2\Sigma_u^+$  на отталкивательный  $^2\Sigma_g^+$ -терм, зависит от условий в ионном источнике. При низких давлениях ( $\sim 0,01$  мм рт. ст.) в ионном источнике сечение практически не менялось при изменении длины волны излучения и оставалось  $\sim 10^{-17}$  см<sup>2</sup>. При увеличении давления до 0,1 мм рт. ст. наблюдался пик при  $\lambda = 300$  нм. Изменение поведения сечения от  $\lambda$  при увеличении давления объясняется наличием столкновительной диссоциации и колебательной релаксации молекул в основном электронном состоянии. Расчет (с использованием имеющихся теоретич. сечений фотодиссоциации из каждого колебательного уровня основного электронного состояния) подтвердил наличие колебательной релаксации при больших давлениях, причем даже при давлении 0,1 мм рт. ст. распределение заселенностей колебательных уровней остается неравновесным. А. И. Шушин.

1979

90: 212067f Ultraviolet absorption by diatomic rare gas ions in e-beam excited plasmas. West, John B.; Long, William H., Jr. (Northrop Res. Technol. Cent., Palos Verdes Peninsula, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1979, 70(7), 3457-61 (Eng). Absorption was measured at 295 and 320 nm in electron-beam excited mixts. of Ar, Kr, and F. The absorbing species are identified as the diat. rare gas ions  $Ar_2^+$ ,  $ArKr^+$ , and  $Kr_2^+$ . By using kinetic models to calc. ion no. densities in the absence of F, absorption cross sections are detd. for these species. At 295 nm, they are  $5.8 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$  for  $Ar_2^+$ ,  $1 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$  for  $ArKr^+$ , and  $2.6 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$  for  $Kr_2^+$ . At 320 nm, the cross sections are  $5.4 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ ,  $2.5 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ , and  $3.1 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ , resp. Errors of  $\pm 18\%$  are estd. for these values. Absorption in mixts. contg. F is higher, and the presence of addnl. absorbing species is indicated. The most likely candidates are the triat. excimers  $Ar_2F$ ,  $Kr_2F$ , and possibly  $ArKrF$ .

$Ar_2^+$   
 $ArKr^+$   
 $Kr^+$   
 $Ar_2F^+$   
 $ArKrF^+$   
 $Kr_2F^+$

(chemical nomenclature)

(+3) ☒

C.A. 1979, 90, N226

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

[Dunn 10819]

1980

Wadt W.R.

Закр.

Состояние,  
энерг.  
нормы.

J. Chem. Phys., 1980,  
73, 3915 - 26.

● (Ar Ne<sub>2</sub><sup>+</sup>)<sup>III</sup>

1981

5 Д57. Сравнение экспериментальных и теоретических потенциальных кривых для нижних состояний  $\text{Ar}_2^*$ . Comparison between experimentally and theoretically determined potential curves of the  $\text{Ar}_2^*$  lowest states. Castex M. C., Morlais M., Spiegelmann F., Malrieu J. P. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 10, 5006—5018 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия с использованием широкого базисного набора, пригодного для описания валентных и ридберговских состояний, рассчитаны кривые потенц. энергии эксимера  $\text{Ar}_2^*$ , сходящиеся к диссоциационному пределу  $\text{Ar}^*(3p^5 4s) + \text{Ar}$ . Особое внимание было уделено нижним  $0_u^+$  и  $1_u$  состояниям на средних и больших расстояниях. В работе кроме теоретической имеется и эксперим. часть, в которой измерены спектры поглощения синхротронного излучения и температурная зависимость крыльев первых двух резонансных линий. Анализ формы этих крыльев в рамках

ф. 1982, 18, NS.

М.П.,  
расчет

$\text{Ar}_2^*$

квазистатич. теории, основанной на Франк-Кондоновском приближении, позволяет получить сведения о кривых потенц. энергии эксимера. Найдено, что в целом результаты расчета и эксперимента качественно согласуются, однако количеств. расхождение довольно заметное.

А. Зембеков

$\text{Ar}_2^+$

1981

Christiansen P. A.,  
et al.

расчет  
потенц.  
кривых.

J. Chem. Phys., 1981,  
75, N 11, 5410-5415.

●  
(см.  $\text{Ar}_2$  ; III)

$Ar_2^+$

Оммуек 12901

1981

Collier F., et al.,

фотоиониза-  
ция,

поперек-  
сечение

J. Chem. Phys., 1981, 74(8),  
4372 - 4379.

$Ar_2^+$

Do; J.

$Ar_2$

фотоионизация

ф. 1981. № 6

1981  
6 Д546. Фотоионизация димеров  $Ar_2$ . Photoionization of the  $Ar_2$  dimer. Dehmer P. M., Poliakoff E. D. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 77, № 2, 326-330 (англ.)

Измерены относит. сечения фотоионизации димеров  $Ar_2$  в спектральной области 820—860 Å с разрешением 0,30 Å. Димеры  $Ar_2$  в конц-ии 0,3% получали при истечении Ar в вакуум через отверстие диаметром 5 мм при давл. 4 атм. В области у первого ионизационного порога  $Ar_2$  на сечении фотоионизации наблюдается интенсивная автоионизационная структура. Из-за сильного различия в равновесных межъядерных расстояниях  $Ar_2$  и  $Ar_2^+$  прямой фотоионизационный переход маловероятен. Определен потенциал появления ионов  $Ar_2^+$ , равный  $(856,5 \pm 1,5)$  Å. Оценено снизу значение энергии диссоциации иона  $Ar_2^+$  ( $1,30 \pm 0,002$  эв). Библ. - 18. Ю. В. Чижов

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

Ommuck 12914

1981

Orth R., Zonkman H.T.,  
et al.,

Chemp

J. Amer. Chem. Soc. 1981,  
103, 6026-6030

$\text{Ar}_2^+$

1982

Dehmer P. L., Pratt S. T.

J. Chem. Phys., 1982, 77,  
N10, 4804-4817.

Do;

(cor. Ar Kr; III)

$Ar_2^+$

1982

16 Б1180. Изучение фотоионизации  $Ar_2$  при высоком разрешении. Dehmer P. M. Photoionization of  $Ar_2$  at high resolution. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 3, 1263—1272 (англ.)

На фотоионизац. квадрупольном масс-спектрометре, включающем высокоинтенсивную лампу, дающую континуумное излучение He, с монохроматором и источником свободного (не ограниченного скиммером) сверхзвукового молек. пучка, при разрешении 0,07 Å измерены относит. сечения фотоионизации  $Ar_2$  в области длин волн 800—850 Å. Спектр фотоионизации  $Ar_2$  обнаруживает крайне сложную автоионизац. структуру близких расположенных полос, анализ к-рой проведен лишь частично. Процесс фотоионизации  $Ar_2$  определяется автоионизацией молек. ридберговских состояний, а диффузность спектра обусловлена эффектами автоионизации и преддиссоциации. Спектр мало похож на соотв-щий спектр атомов Ar, показывая тем самым, что молек. спектр

М.П.

(+)

X. 1982, 19, N 16.  $Ar_2$

нельзя считать просто возмущенным атомным спектром, или же на спектр молек. поглощения при больших длинах волн. Регулярные, колебательные последовательности, обнаруживаемые при больших длинах волн, отсутствуют выше первого потенциала ионизации. Детальный спектроскопич. анализ удалось провести лишь для малой доли наблюдавшихся полос. Однако величина колебат. интервалов  $50-100 \text{ см}^{-1}$  показывает, что часть ридберговских состояний сходится к возбужденному ионному состоянию  $\text{Ag}_2^+ (B^2\Pi_{3/2g})$ . Сравнение спектров поглощения и фотоионизации показывает, что наряду с автоионизацией протекают также процессы преддиссоциации и диссоциативной ионизации.

В. Е. Скурат



$Ar_2^+$

13636

1982

7 Д523. Фотоионизация кластеров аргона. Photoionization of argon clusters. Dehmer P. M., Pratt S. T. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 2, 843—853 (англ.)

С использованием сверхзвуковой струи получены кривые эффективности фотоионизации кластеров аргона в области от порога до 700 Å. Установлено, что за образование  $Ar_3^+$  ответственны в основном процессы диссоциативной фотоионизации тяжелых кластеров, даже при условиях, когда интенсивность пика  $Ar_4^+$  во много раз меньше интенсивности  $Ar_3^+$ . В условиях отсутствия тяжелых кластеров в струе получена кривая эффективности фотоионизации с образованием  $Ar_3^+$ . Несколько широких полос в спектре в области у порога сходны с полосами, наблюдаемыми в спектре фо-

потенциал  
появления  
А.Р.

(+3)

90 1982, 18, № 7.

$Ar_3^+$

$Ar_4^+, Ar_5^+, Ar_6^+$   
(А.Р., До) → АР

тоионизации димеров аргона. Кривые эффективности фотоионизации с образованием  $\text{Ag}_3^+ \div \text{Ag}_6^+$  при наличии в струе тяжелых кластеров сходны между собой. В этих спектрах наблюдаются два широких максимума, похожих на наблюдаемые в твердом аргоне. Кривые эффективности в области у порога очень пологи, что не позволяет точно определить потенциалы появления соответствующих ионов. Для потенциалов появления ионов  $\text{Ag}_2^+$  и  $\text{Ag}_3^+$  получены значения  $(855,0 \pm 1,5) \text{ \AA}$  и  $(865,0 \pm 1,5) \text{ \AA}$  соответственно, что дает значение энергии диссоциации  $\text{Ag}_3^+$ , равное  $(0,18 \pm 0,05) \text{ эв}$ . Потенциалы появления тяжелых кластеров  $\text{Ag}_4^+ \div \text{Ag}_6^+$  практически не отличаются друг от друга и равны  $(870 \pm 2) \text{ \AA}$ . Библ. 80.

В. С. Иванов

$Ar_2^+$

1982

19 Б1153. Исследование свойств кластеров методом ионизации электронным ударом. Cluster properties studied by electron impact ionization. Märk T. D., Stephan K., Helm H., Futrell J. H., Märk J. H., Peterson K. I., Castleman A. W., Djuric N., Stamatovic A. «SASP'82: Symp. Atom. and Surface Phys., Maria Alm, Calzburg, 7—13 Febr., 1982. Contrib.» Innsbruck, s. a., 7—18 (англ.)

На установке, состоящей из формирователя сверхзвукового пучка, ионизац. камеры и масс-спектрометра с двойной фокусировкой, исследованы кластеры инертных газов и малоатомных молекул. Измерены кривые эффективности ионизации (КЭИ) электронами атомных кластеров  $Ar_2^+$ ,  $ArKr$ ,  $Kr_2$ ,  $KrXe$ ,  $Xe_2$  для энергий элек-

кривые  
эффективности  
ионизации

(74) ☒

X. 1984, 19, N 19

тронов от порога до 180 эВ. Установлено, что КЭИ кластеров подобны КЭИ мономеров, а сечения ионизации аддитивны. Измерены Пт появления кластеров из  $\text{CO}_2$ ,  $\text{AgCO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$  и  $\text{AgN}_2$ . Зарегистрированы долгоживущие кластеры  $\text{AgXe}^{2+}$  и  $\text{NeKr}^{2+}$  и определены их энергии рекомбинации. Исследован метастабильный и активированный столкновениями распад кластеров  $(\text{NH}_3)_n^+$  ( $n=1-3$ ),  $\text{H}^+(\text{NH}_3)_m$  ( $m=1-3$ ) и  $(\text{CO}_2)_2^+$ . Выявлен доминирующий канал для кластеров каждого типа.

Е. Н. Николаев

$Ar_2^+$

1983

Marchenko V. S.

Zh. Eksp. Teor. Fiz.

Sovetskoye. 1983, 85(2), 500-10.

( $\bullet$   $Ar_2^+$ ; III)

$Ar_2^+$

1983

10 B1121. Метастабильная и индуцированная столкновениями фрагментация небольших кластерных ионов:  $Ar_2^+$ ,  $Ar_3^+$ ,  $ArN_2^+$  и  $N_4^+$ . Metastable and collision induced fragmentation of some small cluster ions:  $Ar_2^+$ ,  $Ar_3^+$ ,  $ArN_2^+$  and  $N_4^+$ . Illies Andreas J., Bowers Michael T. «Org. Mass. Spectrom.», 1983, 18, № 12, 553—560 (англ.)

фрагментация

На масс-спектрометре с двойной фокусировкой и обращенной геометрией, снабженном комбинированным ионным источником ВД (ионизация электронным ударом и хим. ионизация, энергия электронов 250 эВ, давл. 0,01—0,10 Торр, т-ра 160 К), исследована индуцированная столкновениями фрагментация ионов-продуктов ионно-молек. р-ций  $Ar_2^+$ ,  $Ar_3^+$ ,  $ArN_2^+$  и  $N_4^+$  и проанализированы распределения кинетич. энергий фрагментных ионов, а также зависимости их интенсивностей от давления газа (He) в камере столкновений. Ни для одного из перечисленных исходных ионов метастабильные рас-

(43) X

X. 1984, 19, N 10

пады не обнаружены. Из анализа распределений кинетич. энергий фрагментных ионов и сопоставления их с результатами расчетов потенциальных кривых исходных ионов сделаны выводы о возможных путях фрагментации (имеется несколько таких путей для каждого из фрагментных ионов).

Д. В. Чеховской

$\text{Ar}_2^+$

1983

Pitzer K. S.

Relativistic Eff. Atoms,  
Mol., and Solids. Proc.

Percrem  
et. 12.

NATO Adv. Study Inst., Van-  
couver, 10-21 Aug., 1981. New  
York; London, 1983, 403-  
-420.

● (ev.  $F_2$ ; III)

$A_{32}^+$

[Am. 18189]

1983

Stephan K., Stamatovic A.,  
et al;

негугуирван.  
гуссозуанз.

Phys. Rev. A: Gen. Phys.  
1983, 28, N 5, 3105-3108

$\text{Ar}_2^+$

1984

Шуркуч А. А., Ракаускас  
Р. И. и др.

Майский гос. пед. ун-т.  
Майский, 1984. Ис. Библиогр.  
и. п. 9 произв. (Рукопись деп. в Лит  
НИИТИ 28 марта 1984 г.,  
N 1213 Лу-84 деп.)

(сер.  $\text{He}_2 \text{F}^+$ ; III)

Ar<sub>2</sub>

1984

101: 45582m Theoretical calculations in  $\Lambda$ - $\Sigma$  coupling of the electronic spectrum of dimeric argon (Ar<sub>2</sub>) and krypton (Kr<sub>2</sub>) excimers correlated to the  $np^5(n+1)s$  and  $np^5(n+1)p$  atomic configurations. Spiegelmann, F.; Gadea, F. X. (Lab. Phys. Quant., Univ. Paul-Sabatier, 31062 Toulouse, Fr.). *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 1984, 45(6), 1003-23 (Fr). Adiabatic potential curves for Ar( $3p^6\ ^1S_0$ ) + Ar\* ( $3p^5\ 4s, 3p^5\ 4p$ ) and Kr ( $4p^6\ ^1S_0$ ) + Kr\* ( $4p^5\ 5s, 4p^5\ 5p$ ) were detd. in the  $\Lambda$  representation, from ab initio CI calcns. by using nonempirical pseudopotentials and extensive orbital basis sets. Avoided crossings with states correlated to higher excited configurations, e.g.  $5s, 5p$ , and  $3d$  for Ar<sub>2</sub>\* and  $6s, 6p$ , and  $4d$  for Kr<sub>2</sub>\* were also taken into account. The structure of the electronic spectrum of both excimers is interpreted; analyzing the nature of the Rydberg MO's and the multiconfigurational wave functions makes possible the understanding of the character of avoided crossing between Rydberg states of homonuclear rare gases.

Fr. Chem.

nomeris.

Krypton

Ar<sub>2</sub>  
C.A. 1984, 101, N 6

1985

 $Ar_2^+$ 

8 Б1164. Метод связанных уравнений для многофотонных процессов в молекулах. 2. Когерентное-антистоксово комбинационное рассеяние континуумом в двухатомных молекулах: слабые и сильные поля. Coupled equations approach to multiphoton processes in molecules. 2. Coherent anti-stokes Raman scattering by a continuum in diatomics: weak and strong fields. Badrauk A. D., Giroux M., Turcotte G. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 21, 4473—4479 (англ.)

Методом связанных уравнений рассчитаны спектры КАРС молекулы  $Ar_2^+$  для различных интенсивностей лазерного излучения. Изучена природа резонансных состояний, индуцированных лазерным излучением, и рассмотрена их роль в процессе прямой фотодиссоциации. Обсуждены перспективы использования спектров КАРС для изучения св-в молек. состояний в присутствии излучения.

В. Б. Павлов-Веревкин

спектры

КАРС, расчет

X. 1986, 19, № 8

$Ar_2^+$

1985

2 Д332. Метастабильная диссоциация ионов  $Ar_2^+$ , образованных при ассоциативной ионизации. Metastable dissociation of  $Ar_2^+$  produced by associative ionization. Stephan K., Märk T. D. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1985, 32, № 3, 1447—1450 (англ.)

Исследована метастабильная диссоциация ионов  $Ar_2^+$ , образованных при ассоциативной ионизации:  $Ar + e \rightarrow Ar^* + e$ ,  $Ar^* + Ar \rightarrow Ar_2^+ + e$ . Обнаружено, что при энергиях электронов 20—70 эВ число метастабильных переходов возрастает с энергией электронов и становится больше, чем число метастабильных переходов, наблюдаемых для  $Ar_2^+$ , образованных при электронной ионизации нейтральных Ar-кластеров;  $Ar_n + e \rightarrow Ar_2^+ + Ar_{n-2} + 2e$ . Метастабильная фрагментация ионов  $Ar_2^+$  исследовалась на масс-спектрометре с двойной фокусировкой. Найдено, что число метастабильных переходов, наблюдаемых за время измерений (3,1—7,9 мкс после образования иона), возрастает с возрастанием энергии электронов в ионном источнике и в  $\sim 100$  раз.

метастабильная  
диссоциация

ср. 1986, 18, № 2

больше, чем число метастабильных переходов, ранее наблюдавшихся для  $\text{Ag}_2^+$ , образованных при электронной ионизации  $\text{Ag}_2$ . Представлены возможные пути диссоциации, согласующиеся с неэмпирическими потенц. диаграммами.

Н. В. В.



Ar<sub>2</sub>

1986

Saverbrey R.

Eizenhöfer M., et al.

J. Phys. B: Atom. and

mol. n.

Mol. Phys., 1986, 19,

N 15, 2279-2289.

(see Ne<sub>2</sub> ; III)

Ar<sup>+2</sup>

1987

2 8 Д49. Уточненный анализ спектра Ar III. A revised analysis of the spectrum of Ar III. Hansen Jorgen E., Persson Willy. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1987, 20, № 4, 693—706 (англ.)

Приведена подробная табличная информация об энергиях уровней, соответствующих  $3s^23p^4$ ,  $3s3p^5$ ,  $3s^03p^6$ ,  $3s^23p^3$  ( $4s$ ,  $4p$ ,  $3d$ ) — конфигурациям Ar III, идентифицированных по данным эксперим. наблюдений и среднеквадратичным параметрич. интерполяциям. Особое внимание уделено эффекту наложения конфигураций в спектрах ионов Ar III. Для этой цели в таблицах статьи наряду со значениями энергий уровней приведены статистич. веса конфигураций, вклад которых превышает 1%. Отдельно выделены синглетные термы, представляющие практический интерес для спектроскопии оже-переходов.

В. Г. Пальчиков

Si;

ср. 1987, 18, №8

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

1987

MacDonald R. G., et al.,

Chem. Phys. Lett.,

u.n. 1987, 140, N 5, 476-482.

(all.



Ar<sub>2</sub>; III)

$\text{Ar}_2^+$

1988

Levinger N. E., Ray D.  
et al.

et al.

J. Chem. Phys. 1988,  
89, N 1. C. 71-74.

(  $\text{Ar}_3^+$  ;  $\text{III}$ )

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

1989

(9)

/ 110: 84686d Photoelectron spectroscopy of small argon clusters using an electron-ion coincidence measurement. Mitsuke, Koichiro; Ohno, Koichi. (Coll. Arts Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *J. Phys. Chem.* 1989, 93(2), 501-3 (Eng). UPS of neutral Ar<sub>n</sub> ( $2 \leq n \leq 4$ ) clusters were obtained by using PEPICO. The vertical ionization potentials are reported for 6 ionic states of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> ( $A^2\Sigma_{1/2u}^+$ ,  $B^2\Pi_{3/2d}$ ,  $C^2\Pi_{3/2u}$ ,  $B^2\Pi_{1/2g}$ ,  $C^2\Pi_{1/2u}$ , and  $D^2\Sigma_{1/2g}^+$ ). The PEPICO spectrum of Ar<sub>3</sub> showed 2 broad bands resulting from vertical transitions to the  $^2E'$  and  $^2A_2'$  states of Ar<sub>3</sub><sup>+</sup> in equilateral triangular geometry. Presumably the ionic ground state, Ar<sub>3</sub><sup>+</sup>( $^2E'$ ), does not dissociate so exclusively as the other excited states of Ar<sub>3</sub><sup>+</sup>.

C.A. 1989, 110, N10

$\text{Ar}_2^+$

1989  
Norwood K., Geo J. H.  
et al.

(y) J. Chem. Phys. 1989,  
90(6), 2998-3003.

(all.  $\text{Ar}_n$ ; III)

$Ar_2^+$  Hvistendani Georg, 1990  
Saastad Ole W. et al.

Heppner Int. J. Mass Spectrom.  
Chen, and Ion Process. 1990. 98,  
Ap, N2, C. 167-177.

mic.  
pacem

(cer.   $ArH^+$ ; III)

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

[Om 34659]

1990

Whitaker B.J., Wood-  
ward C.A., et al.,

J. Chem. Phys. 1990,  
93, N1, 376-383

On the origin of metastable

decay in  $Ar_2^+$

1991

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

20 Б1236. Колебательная структура основного состояния Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> по данным метода пороговых фотоэлектрон-ионных совпадений. Vibrational structure of the ground state of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> by the threshold photoelectron-ion coincidence technique / Morioka Y., Ogawa M., Matsumoto T., Ito K., Tanaka K., Hayaishi T. // J. Phys. B. — 1991. — 24, № 4. — С. 791—795. — Англ.

Методом пороговых фотоэлектрон-ионных совпадений исследован процесс ионизации молекул Ar<sub>2</sub> в сверхзвуковом пучке под действием излучения синхротронного источника (79,0—85,5 нм). Из анализа наблюдаемой колебат. структуры перехода Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> ( $\nu=3-17, 25-29$ ) Ar<sub>2</sub> определены энергии колебат. термов основного электронного состояния иона,  $E(\nu) = 116432(\pm 18) + 317,2(\pm 1,6)(\nu + 1/2) - 2,5(\pm 0,3)(\nu + 1/2)^2$  см<sup>-1</sup> (относительно уровня  $\nu=0$  основного электронного состояния Ar<sub>2</sub>).

В. М. Ковба

М.П.

X. 1991, N 20

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

1991

9 Д88. Колебательная структура основного состояния Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>, полученная с помощью техники совпадений пороговый фотоэлектрон—ион. Vibrational structure of the ground state of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> by the threshold photoelectron—ion coincidence technique / Morioka Y., Ogawa M., Matsumoto T., Ito K., Tanaka K., Hayaishi T. // J. Phys. B.— 1991.— 24, № 4.— С. 791—795.— Англ.

Впервые экспериментально изучены колебательные уровни Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>. В качестве источника света применялось синхротронное излучение в диапазоне 790—855 Å. Анализ пороговых электронов проводился комбинацией стерadianного и электрич. анализаторов. Ионы Ar<sup>+</sup> и Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> разделялись по времяпролетному методу. Кластеры Ar<sub>2</sub> получались в газодинамическом молекулярном пучке. Энергии ионных состояний Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> (в см<sup>-1</sup>) определяются ф-лой:  $E = 116432 + 317,2 (v + 1/2) - 2,5 (v + 1/2)^2$ . Энергия отсчитывается от нулевого колебательного уровня Ar<sub>2</sub>. Приводится сравнение с имеющимися данными других авторов. Г. К.

М.П.

ср. 1991, № 9

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

1991

114: 195447d Vibrational structure of the ground state of the argon diatomic monocation by the threshold photoelectron-ion coincidence technique. Morioka, Y.; Ogawa, M.; Matsumoto, T.; Ito, K.; Tanaka, K.; Hayashi, T. (Inst. Phys., Univ. Tsukuba, Tsukuba, Japan 305). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1991, 24(4),

791-5 (Eng). The coincidence between threshold electrons and ions from Ar<sub>2</sub> was taken to sep. the monomer ions and the dimer ions between 790 and 855 Å using synchrotron radiation as a light source. The vibrational structure of the ground state of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> ion was clearly obsd. The energy of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> ionic state is detd. to be 116432 + 317.2(v + 1/2) - 2.5(v + 1/2)<sup>2</sup>(cm<sup>-1</sup>) from the zero vibrational state of Ar<sub>2</sub>.

констан  
но энергии  
и окрестности  
состояния

С. А. 1991, 114, N 20

Ar<sup>2+</sup>  
Ar<sub>2</sub>

1991

ab initio  
numerical. Quib.  
M.N.

116: 94458u Radiative decay of the argon diatomic ion(2+)  
(Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup>) excimer: an ab initio study. Zaitsevskii, A. V.; Dement'ev,  
A. I. (Chem. Dep., Moscow State Univ., 119899 Moscow, USSR).  
Opt. Commun. 1991, 86(6), 461-4 (Eng). The radiative decay of  
bound excited charge-transfer electronic states of Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup> was studied  
via ab initio effective operator QDPT calcs. of potential energy and  
transition dipole moment curves. The assignment of the third  
continuum in the emission spectrum of the Ar plasma to bound-repulsive  
transitions of Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup> is supported.

C.A. 1992, 116, N 10

$Ar_2^{2+}$

1992

v 116: 242281y Theoretical study of the electronic structure of the argon diatomic dipositive ion. Cachoncinlle, C.; Pouvesle, J. M.; Durand, G.; Spiegelmann, F. (GREMI, Univ. Orleans, 45067 Orleans, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(8), 6085-92 (Eng). The electronic states of the ionic excimer  $Ar_2^{2+}$  are calcd. using ab initio multireference CI and effective core pseudopotentials. Among states disassoc. into  $Ar^+(^2P) + Ar^+(^2P)$ , all are found to be repulsive, except the ground state, which occurs to be quasibound near  $R_e = 4.1a_0$  with a well depth of  $\geq 230 \text{ cm}^{-1}$ . All states originating from  $Ar^{++}(^3P, ^1D, ^1S) + Ar$  are bound with dissocn. energies in the range  $3200-4500 \text{ cm}^{-1}$  and equil. distances between  $5.6a_0$  and  $6a_0$ . Simulation emission spectra from bound excited states are derived from the calcd. potentials and the possible contribution of the  $Ar_2^{2+}$  ion to the third continuum fluorescence is discussed.

M. com.,  
prop. param,  
Do, re

C.A. 1992, 116, n24

1992

10Д143. Теоретическое исследование электронного строения  $\text{Ar}_2^{2+}$ . Theoretical study of the electronic structure of  $\text{Ar}_2^{2+}$  / Cachoncinle C., Pouvesle J. M., Durand G., Spiegelmann F. // J. Chem. Phys.. — 1992. — 96, № 8. — С. 6085—6092. — Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом корреляции электронов методами конфигурационного взаимодействия и полного активного пространства в базисе гауссовых ф-ций  $7s7p2d/5s5p2d$  с использованием псевдопотенциала исследовано электронное строение эксимера  $\text{Ar}_2^{2+}$  (I) в 24 состояниях, диссоциирующих по разным каналам. Обнаружено, что среди состояний, диссоциирующих на  $2\text{Ar}^+(^2P)$ , все отталкивательные, кроме основного, являющегося квазисвязанным при длине связи  $R$  около 4,1 ат. ед. и глубине потенциальной ямы не менее  $230 \text{ см}^{-1}$ . Состояния, полученные из  $\text{Ar}^{2+}(^3P, ^1D, ^1S) + \text{Ar}$ , являются связанными с энергиями диссоциации в диапазоне  $3200—4500 \text{ см}^{-1}$  и  $R=5,6—6,0$  ат. ед. Проведено моделирование эмиссионных спектров связанных возбужденных состояний и обсужден вклад I во флуоресценцию.

СР 1993, № 10

Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup>

1992

8 Б1017. Теоретическое исследование электронной структуры Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup>. Theoretical study of the electronic structure of Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup> / Cachoncinlle C., Pouvesle J. M., Durand G., Spiegelmann F. // J. Chem. Phys. — 1992. — 96, № 8. — С. 6085—6092. — Англ.

Рассчитаны потенциальные кривые дикатиона Ar<sub>2</sub><sup>2+</sup>, коррелирующие с диссоциац. пределами Ar<sup>+</sup>(3p<sup>5</sup>, <sup>2</sup>P) + Ar<sup>+</sup>(3p<sup>5</sup>, <sup>2</sup>P), Ar<sup>2+</sup>(3p<sup>4</sup>, <sup>3</sup>P) + Ar(<sup>1</sup>S), Ar<sup>2+</sup>(3p<sup>4</sup>, <sup>1</sup>D) + Ar(<sup>1</sup>S), Ar<sup>2+</sup>(3p<sup>4</sup>, <sup>1</sup>S) + Ar(<sup>1</sup>S). Использованы многоконфигурац. приближения для волновых ф-ций с псевдопотенциальным представлением остовных электронов. Найдено, что состояния, диссоциирующие на Ar<sup>+</sup> + Ar<sup>+</sup>, являются отталкиват. за исключением основного состояния <sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>, для к-рого получен минимум при R<sub>e</sub> вблизи 4,1 ат. ед. глубиной 230 см<sup>-1</sup>, отделенный барьером от диссоциац. предела. Все состояния, диссоциирующие на Ar<sup>2+</sup> + Ar, являются связанными с энергиями связи в области 3200—4500 см<sup>-1</sup> и равновесными межъядер-

потенц.  
кривые,  
теор. расчет

X. 1993, № 8.

ными расстояниями от 5,6 до 6,0 ат. ед. Отмечено, что переходы из связанных состояний  $\text{Ag}_2^{2+}$  в отталкиват. могут приводить к флуоресценции в области 183—200 нм, частично совпадающей с исследованной экспериментально. Библ. 53.

А. В. Немухин



$Ar_2^+$

1992

№ 8 Б1018. Теоретическое исследование ридберговых возбужденных электронных состояний  $Ar_2^+$ . Theoretical study of the Rydberg excited electronic states of  $Ar_2^+$  / Ca-choncinlle G., Pouvesle J. M., Durand G., Spiegelmann F. // J. Chem. Phys. — 1992. — 96, № 8. — С. 6093—6103. — Англ.

М.А.  
Рассчитаны потенциальные кривые возбужденных состояний молек. катиона  $Ar_2^+$  коррелирующие с диссоциац. пределами  $Ar^+(3p^5, ^2P) + Ar(3p^5 4s, ^3, ^1P)$ . Использованы многоконфигурац. приближения для волновых ф-ций с псевдопотенциальным представлением остовных электронов. Базисные наборы для описания валентных МО содержат ф-ции  $(7s7p2d)/[5s5p2d]$ . Проанализированы вклады в энергию вз-вия на больших и малых межъядерных расстояниях. Отмечено, что при малых расстояниях электронная структура катиона м. б. представлена рид-

Х. 1993, № 8

берговыми сериями электрона в поле остова  $\text{Ag}^{2+}$ . Для связанных состояний приведены вычисленные молек. постоянные. Совместно с результатами расчетов дикатиона (см. пред. реф.) полученные данные использованы для интерпретации эксперим. спектра флуоресценции, однако сформулировать однозначные заключения о природе спектра оказалось невозможным. А. В. Немухин

$Ar_2^+$

1992

10Д144. Теоретическое исследование ридберговских электронных возбужденных состояний  $Ar_2^+$ . Theoretical study of the Rydberg excited electronic states of  $Ar_2^+$  / Cachoncinlle G., Pouvesle J. M., Durand G., Spiegelmann F. // J. Chem. Phys.. — 1992. — 96, № 8. — С. 6093—6103. — Англ.

М.А.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом корреляции электронов в тех же приближениях, что и в пред. работе (см. пред. реф.), исследовано электронное строение  $Ar_2^+$  в первых ридберговских состояниях (РС), диссоциирующих на  $Ar^+(3p^5, ^2P) + Ar^*(3p^5 4s, ^3^1P)$ , а также в некоторых валентных состояниях. Обнаружено, что некоторые РС являются связанными или квазисвязанными на коротких расстояниях около 4,0 ат. ед. Они характеризуются остовом  $Ar_2^{2+}$  в основном состоянии и внешним ридберговским электроном, частично экранирующим кулоновское отталкивание, что, видимо, обеспечивает ква-

Ф. 1993, N 10

зисвязанный характер ридберговского состояния. На больших расстояниях электронное строение РС определяется резонансным взаимодействием и величиной ридберговского интеграла переноса электрона, что приводит к энергиям диссоциации 0,6—0,8 эВ при расстояниях около 9,0 ат. ед. Проведено моделирование спектров флуоресценции этих состояний.



Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>

1992

116: 242149m Theoretical study of the Rydberg excited electronic states of the argon diatomic monpositive ion. Cachoncinlle, G.; Pouvesle, J. M.; Durand, G.; Spiegelmann, F. (GREMI, Univ. Orleans, 45067 Orleans, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(8), 6093-103 (Eng). The first Rydberg states of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> mol. ion dissociate into Ar<sup>+</sup>(3p<sup>5</sup>,<sup>2</sup>P) + Ar<sup>+</sup>(3p<sup>5</sup>4s,<sup>3,1</sup>P) are calcd. using multireference CI and effective core pseudopotentials. At long internuclear distance, their electronic structure is shown to be detd. by resonance interaction and the magnitude of the Rydberg electron-transfer integral, inducing long-distance wells with *D<sub>e</sub>* in the range 0.6-0.8 eV around *R<sub>e</sub>* ≈ 9.0a<sub>0</sub>. In the short distance range, the electronic structure can be understood as resulting from an ionic Ar<sup>++</sup> core with an outer Rydberg electron, and bound or quasibound Rydberg states are obtained around *R<sub>e</sub>* ~ 4a<sub>0</sub>. The fluorescence spectra of those states are simulated and the possible intervention of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> system in the third continuum spectrum is considered.

Rydberg-electron

C. A. 1992, 116, N24

Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>

exp. 4

7

Rev

1992

OM 37091

118: 89978a Threshold photoelectron and TOF photoelectron spectra of the argon and krypton diatomic monocationic ions. Morioka, Y.; Masuda, H.; Lu, Y.; Tanaka, K.; Hayaishi, T. (Inst. Phys., Univ. Tsukuba, Tsukuba City, Japan 305). *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 1992, 25(24), 5343-52 (Eng). The threshold electron spectra of Ar<sub>2</sub> and Kr<sub>2</sub> were measured using synchrotron radiation. The vibrational structures of the ground states of Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> and Kr<sub>2</sub><sup>+</sup> ions were obsd. The present results for the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup> ionic state confirmed the previous ones. For the Kr<sub>2</sub> ionic state, the vibrational term values are  $(103,695 \pm 8) + (188 \pm 1) \times (\nu + 1/2) - (0.9 \pm 0.03)(\nu + 1/2)^2$  (cm<sup>-1</sup>) from the zero vibrational state of Kr<sub>2</sub>. The time-of-flight photoelectron spectra of Ar<sub>2</sub> and Kr<sub>2</sub> were measured at several wavelengths of autoionizing states of Ar<sub>2</sub> and Kr<sub>2</sub>, using pulsed photons from a synchrotron. In the photoelectron spectra, several vibrational levels were recognized to support the vibrational anal. of the threshold electron spectra.

We

(41) ~~2~~



Kr<sub>2</sub><sup>+</sup>

C.A. 1993, 118, N10

$Ar_2^{2+}$

1993

$X^1\Sigma_g^+$ , numerous  
gs-ue,  
meperm-  
paeem

119: 15500n A CI study of the quasibound argon diatomic dipositive ion. Ackermann, J.; Hogreve, H. (Konrad-Zuse-Zent. Berlin, W-1000 Berlin, 31 Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 202(1-2), 23-32 (Eng). The potential energy curve of the electronic ground state  $^1\Sigma_g^+$  of the mol. system  $Ar_2^{2+}$  is investigated by CI calcns. employing large Gaussian basis sets. The dication is found to be quasi-bound due to a local min. of the potential energy current at  $R_e = 2.05\text{\AA}$  and a resulting (local) well sufficiently deep to support a series of vibronic resonance levels. The lifetime of the lowest of these resonances is long enough to render  $Ar_2^{2+}$  practically stable.

C-A. 1993, 119, N 2

As<sup>2+</sup><sub>2</sub>

cm. 37270

1993

Daskalopoulos M.,  
Peyriemhoff S.D.,

интерметт.  
состоят.

теор. расчет Mol. Phys., 1993, 79, N5,  
985-994

$Az_2^+$

1993

Олейников И. И.,  
Кузнецов Н. И.

Хим. физ. 1993. 12,  
N 10. С. 1339 - 1358.

И. И.

(  $Az_2$ ; III)

1994

 $\text{Ar}_2^+$ 

121: 190180w Infrared vibrational photodissociation spectra of  $\text{Ar}_2^+$  ions. Duffy, Liam M.; Feinberg, Thomas N.; Baer, Tomas (Chem. Dep., Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC 27599-3290 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(4), 2793-9 (Eng). The IR photodissocn. spectra of Ar dimer ions have been obtained at several wavelengths with a line tunable  $\text{CO}_2$  laser. The dimer ions were produced by high energy electron impact ionization near or at the nozzle orifice of a supersonic expansion. When the electron beam is focused several millimeters from the nozzle, and the laser polarization is parallel to the dimer ion beam, the product  $\text{Ar}^+$  kinetic energy spectra exhibit structure, with a spacing of  $117 \text{ cm}^{-1}$ . However, when the ions are produced by focusing the electron beam directly onto the nozzle, the structure largely disappears. Anal. of the results indicates that the transition is a bound to continuum transition, and that the obsd. spacing is assocd. with vibrational levels of the first excited  $\text{Ar}_2^+ \text{I}(3/2)_g$  state.

(lek creep)

C.A. 1994, 121, N16

$\text{ArAr}^+$

1995

López G. E.

a.n.,  
Do

J. Comput. Chem.  
1995, 16, N G. C. 758-  
767.

(  $\text{HeHe}^+$ ; III)

1996

125: 233209q A pseudopotential hole-particle treatment of neutral rare gas excimer systems. II. The Rydberg states of the  $\text{Ar}_2^+$  dimer. Duplaa, P.; Spiegelmann, F. (Lab. Phys. quantique, Univ. Paul Sabatier, F31462 Toulouse, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(4), 1500-1515 (Eng). A pseudopotential hole-particle model (corresponding to the formalism introduced in paper I) is applied to the detn. of the Rydberg states of the  $\text{Ar}_2^+$  excimer with and without spin-orbit coupling. All the  $\Delta$ - $\Sigma$  Rydberg states (without spin-orbit coupling) adiabatically dissocg. into  $\text{Ar} + \text{Ar}^*$  (4s, 4p, 3d, 5s, 5p, 4d), are studied and all  $\Omega$  states adiabatically dissocg. into  $\text{Ar} + \text{Ar}^*$  (4s, 4p) were detd. including spin-orbit coupling. The calcn. also includes at short distance attractive mol. configurations diabatically correlated with higher at. asymptotes. The nature of the  $\Lambda$ - $\Sigma$  states is analyzed and assigned with ref. to the Rydberg orbitals of the  $\text{Kr}^+$  united atom limit. Extensive comparison with previous calcns. and expts. is carried on. For the lowest ungerade states  $(1)1_u$ ,  $0_u^-$ ,  $(1)0_u^+$ , and  $(2)0_u^+$ , good quant. agreement is found with exptl. high resolu. studies. Several members of Rydberg series are calcd. and assigned, yielding intra-Rydberg transition energies  $(1)^3\Sigma_u^+((1)1_u, 0_u^-) \rightarrow m\ ^3\Pi_g$  or  $m\ ^3\Sigma_g^+$  in good correspondence with recent intra-Rydberg spectroscopy expts. In particular the present calcn. provides a likely interpretation of the IR spectra of  $\text{Ar}_2^+$  as due to  $(1)^3\Sigma_u^+ \rightarrow (1)^3\Sigma_g^+$  transitions with an upper corresponding  $\Omega$  state  $(1)1_g, 0_g^-$  contg. quasi-bound vibrational levels.

Ar<sup>+</sup><sub>2</sub>Rydberg.  
correlated

CA 1996, 125, w18

$Ar_2^+$

1996

ab initio  
paper  
M.A.

125: 309473u Ab initio calculations for  $Ar_2^+$ ,  $He_2^+$ , and  $He_3^+$ , of interest for the modeling of ionic rare gas clusters. Gadea, Florent Xavier; Paidarova, Ivana (Laboratoire de Physique Quantique, IRSAMC, Universite Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, F-31062 Toulouse, Fr.). *Chem. Phys.* 1996, 209(2,3), 281-290 (Eng). Large CI ab-initio calcs. are performed for  $Ar_2^+$ ,  $He_2^+$ , and  $He_3^+$ . For both ionic dimers a complete set of accurate data is detd., including the various electronic states and the transition moments to be used for spectroscopical studies and for modeling larger ionic rare gas clusters. Spectroscopic consts. for  $Ar_2^+$  are in remarkable agreement with the exptl. results. The study for  $He_3^+$  confirms the failure of the minimal DIM model for helium ions.

C.A. 1996, 125, N 24

$Ar_2^+$

1996

24Б153. Неэмпирический расчет  $Ar_2^+$ ,  $He_2^+$  и  $He_3^+$ , представляющий интерес для моделирования ионных кластеров инертных газов. Ab initio calculations for  $Ar_2^+$ ,  $He_2^+$  and  $He_3^+$ , of interest for the modelling of ionic rare-gas clusters / Gadea Florent Xavier, Paidarová Ivana // Chem. Phys.— 1996.— 209, № 2-3.— С. 281-290.— Англ.

М.П.



Х. 1997, № 24

$\text{Ar}_2^+$

1997

Archirel P.

(энергия  
связи)

Chem. Phys. 1997, 221  
(3), 237-252.

теор.

расчет



(ан.  $\text{He}_2^+$ ; III)

Ar<sub>2</sub>\*

1997

CNEMF

128: 81454n Spectroscopic properties of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(5p) excimer states. Kunz, T.; Neeser, S.; Langhoff, H. (Physikalisches Institut der Universität Würzburg, D-97074 Würzburg, Germany). *Z. Phys. D: At., Mol. Clusters* 1997, 42(2), 101-104 (Eng), Springer-Verlag. The transitions between Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(5p) and Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(4sΣ<sub>u</sub>) have studied by absorption spectrometry. The fine structure of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(5p<sub>3/2</sub>) was attributed to a predominantly Hund's case a coupling. A spin orbit coupling const. of  $A = (9.8 \pm 0.3) \text{ cm}^{-1}$  results. Absorption by the singlet system allows one to det. the triplet/singlet splitting between the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(4sΣ<sub>u</sub>) states to be  $(540 \pm 100) \text{ cm}^{-1}$ . The transition probabilities of the Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(5p) and Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>(6p) levels were detd. by satn. spectrometry yielding values between  $(0.2-2.5) \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ .

C-A. 1998, 128, N7

$\text{Ar}_2^+$

1998

Chen, Edward C.M; et al.,

Chem. Phys. Lett. 1998,

( $D_0, \bar{D}_0, r_e$ ) 293 (5, 6), 491-498.

(an.  $\text{Ne}_2^+$ ;  III)