

He Ht

(Кен)⁺
основное
состояние

Zvetz A.A.

1956

J. Chem. Phys. 24, 150-52

Основное состояние иона
изрида галлия (Кен)⁺.

HeH⁺

Karl W. 1961
Lanterbach et al.

"Z. Naturforsch."

1961, 16, 624-25

No. 7;

Bp - 5538-1

HeH⁺

кв. метр.
расчет

6 Д139. Основное состояние молекулярного иона HeH⁺. Anex Basil G. Ground state of the HeH⁺ molecule ion. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 7, 1651—1662 (англ.)

Вариационным методом произведен расчет энергии и электронной волн. ф-ции молекулярного иона HeH⁺ при четырех значениях межатомного расстояния $R=1,0; 1,4; 1,8; 2,2$ ат. ед. Вариац. ф-ция представлена в виде ряда, подобного волн. ф-ции Джеймса и Кулиджа для H₂ (без членов, содержащих межэлектронные расстояния). Расчет произведен с различным числом N членов разложения, вплоть до $N=35$. Помимо этого энергия минимизирована по двум нелинейным параметрам. Обсуждается способ оптимального выбора базисной системы ф-ций. Найденные значения равновесного расстояния (1,446 ат. ед.), энергии диссоциации (1,727 эв), энергии нулевых колебаний (0,204 эв) и частот норм. колебаний ($\nu_i=1643, 4654, 7299, 9577$ см⁻¹) слабо отличаются от результатов менее строгого расчета Эвьетта (РЖФиз, 1956, № 11, 31338); эксперим. значения неизвестны. Вычислена также электронная волн. ф-ция первого возбужденного ¹Σ⁺-состояния HeH⁺. С. Ветчинкин

ф. 1364.615

HeK⁺

Алекс В. Г.

(X1-2078) 1913

D₀

J. Chem. Phys., 1963, 38, 1651 (N:7)

Основное состояние молекулярного
иона HeK⁺.

Радиус гаса $r = 1,446$ а.е.,

$D_0 = 1,427$ эв и колебательные

уровни в см⁻¹ $\nu_0 = 1643$, $\nu_1 = 4654$,

$\nu_2 = 7299$, $\nu_3 = 9574$.

HeH⁺

расчет
молекулярной

23 Б17. Основное состояние молекулярного иона HeH⁺. Anex Basil G. Ground state — of the HeH⁺ molecule ion. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 7, 1651—1662 (англ.)

Вариационным методом МО с учетом взаимодействия конфигураций рассчитана потенциальная кривая основного состояния иона HeH⁺ в интервале межъядерных расстояний 1—2,2 Å. В качестве МО использовались вариационные функции вида $\varphi = \exp(-\alpha\xi) \cdot \exp(-\beta\eta) \xi^n \eta^j [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{m/2} \exp(im\Theta)$, записанные в эллиптических координатах. Поскольку в двухэлектронной задаче спиновая часть отделяется, общая функция с учетом взаимодействия конфигураций записывалась в виде линейной комбинации симметризованного произведения двух МО. Варьирование проведено для различного набора функций, что дало возможность оценить сходимость ряда. Во всех случаях решалась задача на самосогласование. Рассчитанные с функцией вида $8\sigma\text{-МО} + 3\pi\text{-МО} + 2\delta\text{-МО}$ молекулярные константы HeH⁺ равны: равновесное межъядер-

См. ИФФ.

х. 1963. 23

ное расстояние 1,446 ат. ед., энергия диссоциации 1,727 эв, четыре первых колебательных уровня 1643, 4654, 7299 и 9577 см^{-1} , центр отрицательного заряда находится на расстоянии 0,4642 А от ядра He. Исследование второго корня энергетич. матрицы показывает что возбужденное состояние HeH^+ является разрыхляющим по крайней мере в интервале 2—3,27 А.

Е. Никитин

HeH⁺

pacres
rev.

ab-

29418 GROUND STATE OF THE HeH⁺ MOLECULE
ION. Basil G. Anex (Indiana Univ., Bloomington) and
Yale Univ., New Haven). J. Chem. Phys., 38: 1651-62
(Apr. 1, 1963).

Configuration interaction calculations were carried out
for the system HeH⁺ using one-electron basis functions
in confocal elliptical coordinates. Four internuclear
separations, $R = 1.00, 1.40, 1.80,$ and 2.20 bohrs (B) were
studied rather intensively. One of these, $R = 1.40$ B, lies
very close to the equilibrium R and the energies found in
this region represent the lowest thus far reported for HeH⁺.
Self-consistent field calculations were also made and in
combination with the configuration interaction results lead
to an estimation of correlation energies. The binding
energy, the equilibrium internuclear separation, and the
first few vibrational energies for the system were also
estimated. The center of negative charge, which is closely
related to the dipole moment, was studied as a function of
 R and of the size of the one-electron basis. (auth)

1963

NSA-1963-17-17

1963

He H⁺

9 Д76 Д. Одноцентровая волновая функция для основного состояния молекулярного иона HeH⁺. Stuart Joe Don. A single-center wave function for the ground state of the HeH⁺ molecular ion. Doct. diss. Univ. Texas, 1963, 99 pp. Ref. «Dissert. Abstrs»; 1963, 24, № 5, 2088 (англ.)

Методом Ритца вычислена энергия и волн. ф-ция основного состояния молекулярного иона HeH⁺ при различных значениях межатомного расстояния $0 \leq R < \infty$. В качестве базисных ф-ций использовано тридцать ф-ций Слейтера атома He. Согласно оценке, погрешность вычисления энергии ΔE в любой точке R потенц. кривой не превышает 0,16 эв; при $R = \infty$ (атом He) ΔE составляет 0,06 эв; при $R = 0$ (ион Li⁺) $\Delta E = 0,08$ эв. С. Ветчинкин

ф. 1965. 99

HeH⁺ Ргелль Н. [ВФР-3626-X] 1964г.

"Mol. Phys." 9 13, 233-251

Потенциальные кривые ^(ион) $^3\Sigma^-$ -и $^3\Sigma^-$ -состояний двухатомных систем с двумя электронами

(см. III H₂⁺)

He H⁺

1964

Квант
мех

4 Д46. Одноцентровые волновые функции для основного состояния молекулярного иона HeH⁺. Stuart J. D., Matsen F. A. One-center wavefunction for the ground state of the HeH⁺ molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 6, 1646—1650 (англ.)

Подчеркивается, что для молекул типа MH⁺, где М — атом с ионизационным потенциалом, превышающим 13,6 эв (потенциал ионизации Н), в обоих предельных случаях (при $R=0$ и при $R=\infty$) реализуются существенно одноцентровые электронные системы. Это показывает, что разложение молекулярных электронных волн. функций вблизи одного центра М может быть полезным в широком интервале межатомных расстояний. В качестве иллюстрации рассмотрена простейшая система HeH⁺. Полная электронная волн. функция представлена в виде линейной комбинации произведений слейтеровских АО основного и высших электронных состояний

ф. 1965. 4Д

(вплоть до АО с $n=10$ и $l=9$). Коэф. разложения и орбитальные экспоненты были найдены путем численной минимизации полной энергии. Расчеты выполнены для 12 межатомных расстояний от 0,1 до 5,0 ат. ед. Потенц. кривая получена в аналитич. виде с помощью интерполяционного полинома 6-й степени, с которым и были определены спектроскопич. постоянные. Полная энергия при равновесном расстоянии равна — 2,9691 ат. ед. (наинищее теоретич. значение равно — 2,9742), однако для расстояний $R > 2,2$ Å найденные в этой работе энергии оказываются наинищими. Полученные данные, показывают, кроме того, что поляризационная асимптота для потенц. кривой ($-1,3741/2R^4$ ат. ед.) практически совпадает с рассчитанной потенц. кривой при $R > 4$ ат. ед.

В. Быховский

1964

HeH⁺

20 Б32. Одноцентровые волновые функции для основного состояния молекулярного иона HeH⁺. Stuart J. D., Matsen F. A. One-center wavelunneion for the ground state of the HeH⁺ molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1964, 41, № 6, 1646—1650 (англ.)

Рассчитана полная электронная энергия основного состояния мол. иона HeH⁺ (¹Σ⁺), а также спектроскопические константы ω_e и ω_ex_e с помощью одноцентральной волновой функции, содержащей 30 членов. Результаты сопоставлены с расчетами HeH⁺ с использованием функции типа Джемса—Кулиджа и функции двухцентрального типа. Указано, что двухцентровая функция дает лучшее значение энергии для равновесного межъядерного расстояния, однако для R > 2,2 Å лучшее значение энергии получается с одноцентральной функцией, причем энергии взаимодействия [E(R) — E(∞)] очень близки к классич. энергиям поляризации. Е. Шусторович

X1-2368

2. 1965. 20

HeH⁺

(ub. nep.
paere)

XI - 2368

1964

One-center wave function for the ground state of the HeH⁺ molecular ion. J. D. Stuart and F. A. Matsen (Univ. of Texas, Austin). *J. Chem. Phys.* 41(6), 1646-50(1964). The HeH⁺ mol. ion is a member of that class of diat. hydride mol. ions which are 1-center systems at $R = 0$ and at $R = \infty$. The total electronic energy of the ground state of HeH⁺ was calcd. over a wide range of R with a 30-term orbital product wave function centered on the He nucleus. The results are compared with a James and Coolidge-type calcn. and with a 2-center orbital product calcn. The results in the order Evett (CA 50, 5392d), Anex (CA 58, 10921b), and present calcn. are $R_e = 1.432, 1.446, 1.464$ a.u.; $\omega_e = 3600, 3378, 3184$ cm.⁻¹; and $E(R = 1.4 \text{ a.u.}) = -2.9730, -2.9742, -2.9691$ a.u. The energy of the present calcn. is the lowest for R greater than about 2 a.u. and is lower than the classical polarization energy for $2 < R < 4$ a.u. For $R > 4$ a.u. the 1-center interaction energies [$E(R) - E(\infty)$] lie quite close to the classical polarization energies.

RCJO

C.A. 1964. 61. 11

12657 de

1965

H_2, HeH^+

Numerical calculation of H_2 and HeH^+ wavefunctions. Jerry Goodisman (Univ. of Illinois, Urbana). *J. Chem. Phys.* 43 (9), 3037-49(1965)(Eng). Use of purely numerical techniques to evaluate integrals allows for greater flexibility in the trial functions used for variational calcs. For 2-electron problems, crossed Gauss quadratures in 4 dimensions were used. Accuracy can be assessed in terms of the effect of increasing the no. of integration points were used. Previously given formulas are modified, for singular integrands, so that results are monotonic with the no. of points in any dimension, and the new formulas are tested on H_2 and on the HeH^+ ground state. The meaning of linear dependence of basis functions in the framework of Gauss integration is discussed. The 1st excited $^1\Sigma_g^+$ state of HeH^+ was investigated, and found to be nonbonding. The basis functions used here were James-Coolidge functions (CA 28, 705¹) modified to include polar character. Another example of the flexibility of the numerical method is the use of correlation functions of simple anal. form. This is illustrated with the Gaussian $\exp(\gamma r_{12}^2)$, while formulas are given for calcn. with any correlation function expressible as a power series in r_{12} . RCJQ

C.A. 1966. 64. 1

31cd

HeH⁺

1965

Molecular orbital studies of the ground and low-lying excited states of the HeH⁺ molecular ion. H. H. Michels (Res. Labs., United Aircraft Corp., East Hartford, Conn.). *J. Chem. Phys.* 44(10), 3834-50(1965)(Eng). The mol. ion HeH⁺ has been examd. by using a method of mol. orbital calcn. in which the total wave function is taken as a linear combination of configurations, each a properly antisymmetrized product of flexible, elliptic functions. The ground ¹Σ state and 14 excited states of ¹Σ, ³Σ, ¹Π, and ³Π symmetry were examd. Including the ground

C.A. 1966.65.2
1583 h

state, there are a total of 7 bound mol. states for this system, all arising from at. states with principal quantum number of 2 or less. All higher mol. states are indicated to be repulsive. Contrary to previous investigations, the first excited $^1\Sigma$ state is bound weakly and can support several vibrational levels. An extensive analysis of the final optimized wave functions has been made and, in addn. to the potential curves, spectroscopic constants, values of the radiative transition moments, and certain other mol. quantities were evaluated. An analysis of exptl. studies which require a detailed knowledge of the electronic properties of this mol. ion is given.

RCJQ

34167

HARTREE-FOCK-ROOTHAAN WAVEFUNCTIONS, POTENTIAL CURVES, AND CHARGE-DENSITY CONTOURS FOR THE $\text{HeH}^+(\text{X}^1\Sigma^+)$ AND $\text{NeH}^+(\text{X}^1\Sigma^+)$ MOLECULE IONS. Peyerimhoff, Sigrid (Univ. of Chicago). J. Chem. Phys., 43: 998-1010(Aug. 1, 1965).

Hartree-Fock-Roothaan wavefunctions for the ground state of the HeH^+ ion and the NeH^+ ion are reported. The potential curves for HeH^+ and NeH^+ were calculated using wavefunctions, which were optimized at the equilibrium distance and also at each internuclear distance. Their relative behavior is discussed. The Hellmann-Feynman forces on the nuclei were studied as a function of the internuclear distance with regard to the size of the basis set and optimization of the wavefunction. Spectroscopic data were calculated in different ways, a dissociation energy of 1.74 ev for HeH^+ and 2.03 ev for NeH^+ was computed, and calculations made to find the center of negative

charge for every internuclear separation. Electron-density maps were plotted for several internuclear distances in HeH^+ and for the total wavefunction and the individual molecular orbitals of NeH^+ at the equilibrium distance.

(auth)

NSA-1965-19-18

He H

+

XI-2198

1965

He H⁺

1 Д101. Волновые функции Хартри — Фока — Рутана, потенциальные кривые и контуры зарядовой плотности для молекулярных ионов HeH^+ ($X^1\Sigma^+$) и NeH^+ ($X^1\Sigma^+$). Peyerimhoff Sigrid. Hartree — Fock — Roothaan wavefunctions, potential curves, and charge-density contours for the $\text{HeH}^+(X^1\Sigma^+)$ and $\text{NeH}^+(X^1\Sigma^+)$ molecule ions. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 3, 998—1010 (англ.)

Получены волн. ф-ции Хартри — Фока — Рутана для основных состояний молекулярных ионов HeH^+ и NeH^+ . Выбор базисных наборов ф-ций и процедура оптимизации их экспонент подробно обсуждаются. В предположении, что энергия корреляции не зависит от межъядерного расстояния, рассчитаны потенц. кривые для обоих

ф. 1966.

12

понов. Изучена зависимость геллман-фейнмановских сил от межъядерных расстояний, размеров базисных наборов и способа оптимизации волн. ф-ций. Вычислены различные спектроскопич. константы, в том числе энергии диссоциации (1,74 эв для HeH^+ и 2,03 эв для NeH^+). Построены контуры электронной плотности для нескольких межъядерных расстояний (от 1 до 3,5 ат. ед.) в HeH^+ и для полной волн. ф-ции и индивидуальных МО NeH^+ на равновесном расстоянии (1,83 ат. ед.). Полученные результаты сравниваются с известными литературными данными. Е. Шусторович

1965

 He H^+ He H^{2+}

6 Д96. Применение одноцентровой модели к расчету основного и возбужденного состояний малых молекул в гетерополярном газе. Tamásy Lentei I. Application of the one-center model to the ground and excited states of small molecules in the heteropolar case. «Acta Univ. debrecen. Ser. phys. et chim.», 1965, 11, 5—12 (англ.; рез. венг., русск.)

В рамках модели объединенного атома изучены молекулы HeH^+ и HeH^{2+} . Энергии ридберговских состояний $1s\sigma n1\lambda$ молекулы HeH^+ определяются вариационным методом с помощью водородоподобных одноцентровых волн. функций, центрированных на атоме He. При расчете энергий молекулы HeH^{2+} в состояниях $1s\sigma$ и $2p\pi$ орбитали приходится центрировать в различных точках, не совпадающих с положением атома He.

ф. 1966: 69

Физ. 10

539.2

Trumbore F. A., Thomas D. G.

New pair spectra in gallium phosphide.
Phys. Rev., 1965, 137, N 3A, 1030—1033.

Новые спектры пар в GaP.

He H⁺

X1-2453

1965

1 Д100. Вариационный расчет иона HeH⁺ и β -распад в молекуле HT. Wolniewicz L. Variational treatment of the HeH⁺ ion and the β -decay in HT. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 4, 1087—1091 (англ.)

Вариационным методом Ритца рассчитана энергия иона HeH⁺ в основном и первом возбужденном $^1\Sigma^+$ -состоянии. В качестве пробной волн. ф-ции использована ф-ция типа Джеймса — Кулиджа, содержащая 64 члена. Для энергии связи получено значение $D_e = 16448,3$ см⁻¹ при равновесном расстоянии между ядрами $R_e = 1,46324$ ат. ед. В возбужденном состоянии в согласии с результатами других работ связи не получено. Результаты расчета применены для количеств. сравнения теории β -распада в молекуле HT с экспериментом. Рассчи-

$$\left\{ \begin{array}{l} D_e = \\ = 16448,3 \\ \text{см}^{-1} \end{array} \right.$$

ф. 1966.

12

таны вероятности перехода в результате β -распада из основного $^1\Sigma_g^+$ -состояния молекулы НТ в основное или первое возбужденное $^1\Sigma^+$ -состояние иона HeH^+ . Вероятность перехода в возбужденное (отталкивательное) состояние, определяющая вероятность диссоциации молекулы при β -распаде, получается равной 17,8%. Эксперимент дает $6,8 \pm 1,9\%$. Расхождение, по мнению автора, не может быть объяснено неточностью волн. функций.

Л. Лабзовский

1966

He H⁺

1 Д83. Расчет энергии HeH⁺ по методу самосогласованного поля. Gallup G. A., McKnight M. S. Self-consistent-field calculation of the energy of HeH⁺. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 1, 364—366 (англ.)

расчет

По методу Рутана рассчитана энергия иона HeH⁺. В качестве базисных ф-ций брались точные одноэлектронные двухцентровые ф-ции. Расчет проведен для различных межъядерных расстояний и при учете различного числа базисных ф-ций. Наилучшая энергия, полученная в работе, равна —3,345 ат. ед. при межъядерном расстоянии 1,40 a_0 (учитывались $1s\sigma$, $2s\sigma$, $2p\sigma$ - и $3s\sigma$ -орбиты). Авторы заключают, что использованные ими базисные ф-ции дают не очень хорошее описание HeH⁺, причем главной трудностью является необходимость учета состояний непрерывного спектра.

С. Христенко

ф. 1966. 17

HeH⁺

1966

Self-consistent-field calculation of the energy of HeH⁺.
G. A. Gallup and M. S. McKnight (Univ. of Nebraska, Lincoln).
J. Chem. Phys. 45(1), 364-6 (1966) (Eng). The use of the exact
solutions of the 1-electron-2-nucleus problem as a basis set of
functions for S.C.F. calcns. is investigated for the HeH⁺ ion.
The calcns. are made with both scaled and non-scaled functions.
The best energy obtained is -3.345 a.u. at an internuclear distance
of 1.40 a.u. These functions form an only moderately good basis
set for such calcns. Their conditioning to the problem can only
partially overcome their lack of completeness when continuum states
are omitted. RCJQ

C.A. 1966. 65.6 (8014 c)

HeH⁺

XI-1774

1966

Potential curve for HeH⁺. Frank E. Harris (Stanford Univ., Stanford, Calif.). *J. Chem. Phys.* 44(9), 3636-7(1966)(Eng). The interaction potential for the lowest energy ¹Σ⁺ state of HeH⁺ was calcd. by using ellipsoidal wave functions, and the calcd. energy values are tabulated. The equil. internuclear distance and dissocn. energy of ⁴HeH⁺ as detd. from these results are 1.44 Bohr and 1.53 ev., resp.

N. Francis Cerulli

not. repub

C.A. 1966. 65. 6

81856

HeH⁺

XI-1774

1966

между-
ядер-
расст-е
энергия
диссоциации

10 Д64. Кривая потенциальной энергии для HeH⁺.
Harris Frank E. Potential curve for HeH⁺. «J. Chem.
Phys.», 1966, 44, № 9, 3636—3637 (англ.)

Значения потенц. энергии E основного состояния $^1\Sigma^+$ молекулы HeH⁺ для межъядерных расстояний R от 0,8 до 8,0 бора и для бесконечно удаленных ядер были получены в одно- (1) и двуконфигурационном (2) приближениях с помощью волн. ф-ций (ВФ), заданных в эллипч. координатах $(\xi_1, \eta_1, \varphi_1)$ и $(\xi_2, \eta_2, \varphi_2)$. В 1 была использована пространственная ВФ $\sigma\sigma'$ вида $\exp(-\delta\xi_1 - \zeta\eta_1 - \delta'\xi_2 - \zeta'\eta_2)$, в 2, кроме ВФ $\sigma\sigma'$, — пространственная ВФ $\pi\pi^*$, где π относится к $[(\xi^2 - 1)(1 -$

ф. 1966. 109

$-\eta^2)]^{1/2} \cdot \exp(-\delta\xi - \zeta\eta + i\phi)$. В обоих приближениях показатели степени были оптимизированы. Понижение E в 2, по сравнению с 1, практически не зависело от R в исследованном интервале. Исходя из рассчитанных значений E , получены величины равновесного R ($R_{\text{равн}} = 1,44$ бора) и энергии диссоциации ($D = 1,53$ эв). Результаты расчета хорошо согласуются с работами, опубликованными ранее.

В. Хрустов

He H⁺

1966

З Д83. Разности энергий по интегральной формуле Геллмана—Фейнмана. Приложение к HeH⁺. Hayes Edward F., Parr Robert G. Energy differences from the integral Hellmann—Feynman formula: application o HeH⁺. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 12, 4650—4651 (англ.)

С помощью интегр. ф-лы Геллмана—Фейнмана рассчитаны разности энергий для различных межъядерных расстояний системы HeH⁺. Показано, что расчет разностей энергий с приближенными волн. ф-циями по ф-ле Геллмана—Фейнмана дает для больших изменений межъядерного расстояния гораздо более точные результаты, чем простое вычитание полных энергий системы при двух межъядерных расстояниях. Указано, что при расчете разностей энергий на основании ф-лы Геллмана—Фейнмана не выполняется закон сохранения энергии,

т. е. сумма разностей энергии при переходах по замкнутому циклу $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A$ не равна нулю. С. Христенко

ф. 1967. 3Я

He H⁺

X1-1296

1966

✓ 3 Д82. Изучение методом молекулярных орбиталей основного и низколежащих возмужденных состояний молекулярного иона HeH⁺. Michels H. H. Molecular orbital studies of the ground and low-lying excited states of the HeH⁺ molecular ion. «J. Chem. Phys.», 1966, 44, № 10, 3834—3850 (англ.)

спектроск.
константы

Для описания иона HeH⁺ волн. ф-ция берется в виде линейной комбинации конфигураций, каждая из которых является антисимметризованным произведением эллиптич. ф-ций. Исследованы основное и 14 возбужденных состояний. Вместе с основным имеется всего 7 связанных молекулярных состояний. Первое возбужденное $^1\Sigma$ -состояние слабо связывающее и может нести несколько колебательных уровней. Рассчитаны спектроскопич. константы и другие молекулярные свойства. Проведен анализ эксперим. данных. М. Долгушин

ф. 1967. 3Д

Ne H⁺

1967

11 Д130. Исследование в рамках одноцентрового приближения ионов гидридов инертных газов NeH⁺ и ArH⁺. Banyard K. E., Sutton A. One-center study of the rare-gas hydride ions NeH⁺ and ArH⁺. «J. Chem. Phys. 1967, 46, № 6, 2143—2146 (англ.)

В одноцентровом приближении рассчитаны волн. ф-ции и энерг. осн. состояний ионов NeH⁺ и ArH⁺. Рассчитаны также длины связей, силовые постоянные и диамагн. часть молярной магн. восприимчивости для этих ионов. Полученные результаты сравниваются с результатами расчета этих ионов другими методами.

С. В. Христенко

силовые
пост.;

энерг.
осн. сост.;

длины связей

09.1967. 11 Д

8

HeH⁺

1967

2 Д102. Исправления к статье: «Основное состояние молекулярного иона HeH⁺». Christakis Eleni S., Anex Basil G. Erratum: Ground state of the HeH⁺ molecule ion. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 5, 1882 (англ.)

См. РЖФиз, 1964, 6Д139.

08. 1968. 28

1967

Ze (He_2 , He_2^+ , HeH^+ , H_3^+ , H_4^{2+} , HeH^- ,
 LiH , BeH^+)

9 10

IX.102

Frost A.A.

J. Chem. Phys, 1967, 47, 10, 3714-3716/Jan.

Fluctuating spherical Gaussian orbital
 model of molecular structure.

II One and two-electron-pair systems

Physica, 1968, 236-13

10

12

HeH⁺

X1-1241

1967

2 Д101. Одно- и двухцентровые расчеты наиболее низколежащих П-состояний HeH⁺. Hoyland James R. One- and two-center calculations on the lowest-lying Π states of HeH⁺. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 1, 49—54 (англ.)

Проводится расчет синглетного и триплетного состояний HeH⁺ двумя различными методами. В I ч. осуществляется расчет с двухцентровыми волн. ф-циями. При этом в качестве базисной совокупности используются одноэлектронные ф-ции с тремя варьируемыми параметрами, одним из которых является квантовое число n . Первый расчет проводился с двумя конфигурациями, минимизация осуществлялась по отношению к 9 параметрам при различных значениях R . Результаты табулированы. Проводился также расчет с 8 и 9 конфигурациями, при целочисленных значениях n и учете угловой

9. 1968. 2A

корреляции. Табулированы данные по зависимости энергии от R отдельно для синглетного и триплетного состояний, а также значения параметров, минимизирующие энергию при $R=8,05 a_0$ для синглетного и $R=7,67 a_0$ для триплетного состояний, указаны весовые множители используемых конфигураций. Приводятся рассчитанные величины спектроскопич. констант. Во второй части приводятся результаты одноцентровых расчетов. В качестве базисной совокупности использованы орбитали слеитеровского типа с n вплоть до 40. Осуществлялась минимизация показателей экспонент и n , отдельно для синглетного и триплетного состояний при $R=8,05 a_0$ и $R=7,67 a_0$ соответственно. Использовались волн. ф-ции, включающие 32 конфигурации, весовые множители табулированы. Табулированы собственные значения различных операторов при равновесных расстояниях, указаны оценки энергии диссоциации.

А. Медвинский

HeH⁺

XI-1241

1967

4 Б42. Одно- и двухцентровые расчеты низших Π -состояний HeH⁺. Hoyland James R. One- and two-center calculations on the lowest-lying Π states of HeH. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 1, 49—54 (англ.)

Выполнены расчеты, синглетного и триплетного состояний системы HeH⁺ двумя различными методами. В части первой осуществляется расчет с двухцентровыми волновыми функциями. При этом в качестве базисной совокупности используются одноэлектронные функции с тремя варьируемыми параметрами, одним из которых является квантовое число n . Первый расчет проводился с двумя конфигурациями, минимизация осуществлялась по отношению к 9 параметрам при различных значениях R . Результаты табулированы. Приведен также расчет с 8- и 9-ю конфигурациями, при целочисленных

X. 1968. 4

значениях n и учете угловой корреляции. Табулированы данные по зависимости энергии от R и значения параметров, минимизирующие энергию при $R=8,05 \cdot a_0$ для синглетного и $R=7,67 \cdot a_0$ для триплетного состояний, а также указаны весовые множители используемых конфигураций. Приводятся рассчитанные величины спектроскопических констант. Во второй части приводятся результаты одноцентровых расчетов. В качестве базисной совокупности использованы орбитали слейтеровского типа с n вплоть до 40. Осуществлялась минимизация показателей экспонент n , отдельно для синглетного и триплетного состояний при $R=8,05 \cdot a_0$ и $R=7,67 \cdot a_0$, соответственно. Использовались волновые функции, включающие 32 конфигурации. Вычислены средние значения различных операторов при равновесных расстояниях.

1968

 HeH^+ ab. seen.
parren

~~40722p~~ One-center calculation for HeH^+ using orbitals with angularly dependent effective nuclear charges. Banyard, Kenneth E.; Hayns, M. R. (Univ. Leicester, Leicester, Engl.). *Mol. Phys.* 1968, 15(6), 615-19 (Eng). Wave functions possessing effective nuclear charges which are explicitly angularly dependent have been used as a simple minimal basis set for a one-center study of HeH^+ . Correlation effects were introduced by using spatially different orbitals for electrons of opposite spin. Although the basis functions are of considerable interest, the values obtained for the mol. energy and the theoretical bond length were somewhat disappointing. RCFS

C.A. 1969. 40. 10

HeH⁺

кв.-мех.
расчет

11 Б21. Расчет HeH⁺ по методу теории возмущений. Bartolotti Libero John, Goodisman Jerry. Bare-nucleus perturbation treatment of HeH. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 9, 4237—4239 (англ.)

1968

По методу теории возмущений, в к-ром в кач-ве возмущения рассматривается полное межэлектронное взаимодействие, исследован молек. ион HeH⁺. Волновая функция первого приближения, согласно Синаноглу (РЖХим, 1961, 24Б43), представляется в виде суммы членов, соотв-щих различным парам электронов; каждая из парных функций удовлетворяет ур-ниям, к-рые описывают различные состояния соотв-щей двухэлектронной системы. В кач-ве волновой функции нулевого приближения используется заполненная двумя электронами низшая орбита системы HeH⁺. Энергия молек. иона HeH⁺ рассчитана с помощью вариационного метода Хиллерааса—Бете—Салпитера с точностью до третьего порядка, обычной теории возмущений Рэлея—Шредингера.
Е. Л. Розенберг

х. 1969. 11

1968

HeH⁺23005q Bare-nucleus perturbation treatment of HeH⁺.Bartolotti, Libero J.; Goodisman, Jerry (Univ. of Illinois, Urbana, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(9), 4237-9 (Eng).

The 1st-order wavefunction and energy through 3rd order of Rayleigh-Schroedinger perturbation theory were calcd. for the simplest heteropolar 2-electron system, HeH⁺, by using the Hylleraas-Bethe-Salpeter variation principle (H. S. Bethe and E. E. Salpeter, 1937). The results are compared with previous work and are in good agreement.

CJJN

ub. uen.

Hylleraas

mod - 1

C. A. 1969. 70. 6

He H⁺

D₀

III

50581f Photoionization study of ion-molecule reactions in mixtures of hydrogen and rare gases. Chupka, William A.; Russell, Morley E. (Argonne Nat. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(12), 5426-37 (Eng). The reactions producing HeH⁺, NeH⁺, and ArH⁺ in mixts. of H₂ with rare gases were studied by photoionization mass spectrometry. The HeH⁺ and NeH⁺ ions are produced by vibrationally excited H₂⁺ ions; the thresholds for reaction were very near the $v = 3$ and $v = 2$ states of H₂⁺, resp. Above the vibrational threshold the reaction cross section increases with vibrational quantum no. and there is no evidence for a kinetic-energy threshold for these states. When accelerated to sufficient kinetic energy, H₂⁺ ions in vibrational states below threshold react with a cross section which increases as the deficit in vibrational energy decreases. The rate const. for reaction of those vibrational states that are near or about the reaction threshold and that contribute most to the observed reaction becomes nearly const. at low repeller voltages. The threshold for the reaction producing HeH⁺ can be made consistent with a theoretical value for the disson.

1968

C. A. 1969 . 70 . 12



(+2)

17

energy $D_0(\text{HeH}^+) = 1.835$ ev. The difference $D_0(\text{NeH}^+) - D_0(\text{HeH}^+)$ is 0.25 ± 0.03 ev. This yields $D_0(\text{NeH}^+) = 2.085$ ev. In Ar-H₂ mixts., the ArH⁺ is formed by an exothermic reaction of H₂⁺ in all vibrational states with Ar and also by reaction of Ar⁺ ions in the $^3P_{3/2}$ ground state and (with $\sim 30\%$ larger cross section) of Ar⁺ in the $^3P_{1/2}$ excited state with H₂. The cross section has little or no dependence on vibrational energy. Chemi-ionization processes leading to the formation of ArH⁺ by excited H* and Ar* atoms were observed. The dissocn. energy of ArH⁺ was certainly > 2.647 ev. and, from a tentative interpretation of the chemi-ionization processes, probably > 3.397 ev.

RCJQ

1968

He H⁺He H⁺⁺

22 Б12. Одноцентровые молекулярные орбитали с варьируемым началом для HeH⁺⁺ и HeH⁺. Combs L. L., Runnels L. K. One — center molecular orbitals for HeH⁺⁺ and HeH with variable origin. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 9, 4216—4218 (англ.)

Процедура перемещения начала разложения в одноцентровых расчетах (РЖХим, 1967, 20Б7) применена к расчету основных состояний гелий-водородных ионов HeH⁺⁺ и HeH⁺. Показано, что только для простейших одноконфигурац. волновых функций типа 1s или (1s1s) перемещение центра разложения в пределах размеров объединенного атома эффективно; на расстояниях порядка длины связи более эффективно увеличивать размер базисного набора.

Г. И. Каган

2. 1969. 22

He H⁺

расчет
основного
сост.

Lowe Y.P.,
Mazzioti A.

1968

J. Chem. Phys.
48, N2, 877

Локальные энергии, ин-
тегральный метод Гел-
мана-Фейнмана и
разложение матрицы
ана. ● (См. H₂) III

HeH⁺

Wu A.A., Ellison F.O.

1968

J. Chem. Phys., 48, 1103

New scaled atoms-in-molecules theory for predicting diatomic potential energy curves.

II. Studies of the calibration technique and applications to HeH⁺, HeH, He₂⁺, He₂⁻, He₂

(Cal. He₂) III

He H⁺

кв. - ссх.
(расчет)
осн. сост.

1969

Keeper J. A.,
Su. F. J. K., Belford R. L.

J. Chem. Phys., 50 (1), 160.

(see. Lill) III

He II⁺

O' Malley Th. F.

1969

J. Chem. Phys., 51(1), 322

кв. - лев.
расст

Некоторые квадрупольные
резонансы (квадрупольно
карные) состояния
малых двухатомных
систем - проециро-
ванные атомные ор-
битали. (см. H₂) III

$C_2H_4, CH_4, LiH, CH_3^+, OH^-, NH_3, C_2H_2,$
 $C_2HF, C_2HCl, C_2, C_3, C_4, BeHBe^+, BeHBe^-$
 $BeH^+, BeF_3, HF, FHF, H_2O, HeH^+,$
 $F(H_2O)_n (n=1,2,3), HeHHe^+, F_2, LiF, NaF, HCl, HCl.$

$\left(\begin{array}{l} \Delta H_f \\ D_0 \\ Y_{-400} \end{array} \right) \begin{array}{l} 9 \\ 11014 \\ \text{в.кв.-мех. прот.} \end{array}$

Preuss H.; Janoschek R. 15 813 C_2H_4
 J. Mol. Struct. 1969, 3(4-5), 423-8 C_2H_4

Wave-mechanical calculations on the
 molecules taking all electrons into
 account.

ЕСТЬ Ф. Р.

CH, 1969, 71, N12, 537668

HeH⁺

Schopman, Barua, Los

1969.

Phys. Lett., 29a, 112

Collision-induced dissociation
of (HeH)⁺.

HeH⁺

1870

3 Б18. Образование молекулы и электронная корреляция в HeH⁺. Banyard K. E., Baker C. C. Molecular formation and electron correlation in HeH⁺. «Int. J. Quant. Chem.», 1970, 4, № 4, 431—450 (англ.)

образование;

Исследовано образование связи в ионе HeH⁺ для межъядерных расстояний $0,1 < R < 5,0$ ат. ед. с использованием одноцентровых функций. С помощью карт разностной плотности для различных R рассмотрено возмущение электронного облака He протоном. Даны радиальные распределения электронной плотности (относительно He). Проведено сравнение с соотв-щими результатами для He ($R = \infty$) и Li⁺ ($R = 0$). Исследовано влияние электронной корреляции на плотность заряда и средние значения.

А. Резников

Х. 1874. 3

HeH⁺

1970

Hayns M.R., Banyard K.

J.Chem.Phys., 52, 1609

Wavefunctions with angularly
dependent orbital exponents for
HeH⁺.

HeH⁺

1970

диссоц.
ионов

У 7 Б23. Индукцированная столкновениями диссоциация (HeH)⁺. Schorman J., Barua A. K., Los J. Collision-induced dissociation of (HeH)⁺. «Recent Develop. Mass Spectroscopy. Proc. Int. Conf. Mass Spectroscopy, Kyoto, 1969». Tokyo, 1970, 888—896. Discuss., 896 (англ.)

Методом молек. пучков исследована индуцированная столкновениями диссоциация ионов HeH⁺. Пучок ионов, образованных в плазменном ионном источнике из смеси He—H₂ при давл. 0,2 мм; ускорялся, затем попадал в р-сионную камеру, где ионы претерпевали столкновения с атомами гелия, после чего продукты диссоциации вместе с непрореагировавшими ионами по-

ж. 1975. №7

падали в коллиматор и в детектор. Получен спектр энергий ионов H^+ , образованных в результате диссоциации HeH^+ . Обсуждены возможные механизмы диссоциации: 1) механизм прямой диссоциации, к-рый связан с передачей большой энергии и поэтому считается маловероятным; 2) диссоциация через образование возбужденных электронных состояний молек. иона; 3) адиабатич. искажение электронного облака иона вследствие взаимодействия с нейтр. мишенью, что приводит к искажению терма иона и вытеснению стабильных состояний в непрерывный спектр. Обсуждены также возможные механизмы образования ионов HeH^+ в ионном источнике и сопутствующие реакц А. Зембеков

(HeH)⁺

Д₀

оп. 1971. 20

1970

2 Д265. Диссоциация молекулярных ионов (HeH)⁺ с энергией 10 кэв. Schorpan J., Los J. The dissociation of 10 keV (HeH)⁺ molecular ions. I. Proton fragments. «Physica», 1970, 48, № 2, 190—216 (англ.)

Экспериментально изучена диссоциация молекулярных ионов (HeH)⁺ с энергией 10 кэв, при столкновении с нейтральными атомами. Ионы образуются в плазмотроне, где находится смесь водорода и гелия при давлении ~0,15 мм рт.ст. Выведенные из плазмотрона и ускоренные до 10 кэв ионы (HeH)⁺ попадают затем в камеру, где при столкновении с атомами газа А происходит диссоциация: (HeH)⁺ + А → He + H⁺ + А. Проведено измерение распределения по скоростям ионов H⁺, получающихся при диссоциации. Скорости этих ионов оказались

небольшими, лежащими в узком интервале. Из этого факта авторы делают вывод о малой эффективности двух механизмов диссоциации: вследствие вращательно-колебательного возбуждения молекулярного иона при сильных столкновениях его с атомами и вследствие возбуждения иона на отталкивающий электронный терм с последующим распадом. Авторы считают, что ответственным за диссоциацию является взаимодействие диполя молекулярного иона и наведенного диполя атома. Предсказанная для этого случая теоретич. зависимость сечения диссоциации от поляризуемости атома A подтверждается экспериментально. Б. Ф. Горднец

HeH⁺

потеря.
потенц.
энергии

Zetlik D.,
Poshusta R. D.

1970

J. Chem. Phys., 1970,
52, 9, 4920.

(Ces. HeH₂⁺⁺)_{III}

HeH⁺

XI-2628

1971

3 Б19. Теория возмущений для обменного взаимодействия и ион HeH⁺. Certain Phillip R. Exchange perturbation theory and the HeH⁺ ion. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 6, 3045—3046 (англ.)

рассеи
8i

Рассмотрено расщепление ΔE между возбужденными термами $a^3\Sigma$ и $A^1\Sigma$ молек. иона HeH⁺, коррелирующими с He⁺ ($1s, ^2S$) и H ($1s, ^2S$) при бесконечном разведении атомов. Показано, что ΔE , вычисленное в приближении Гайтлера — Лондона при $R=6$ ат. ед. не согласуется с результатом точного вариационного расчета ни по знаку, ни по величине. Однако, это расхождение почти полностью устраняется при учете взаимодействия состояния $A^1\Sigma$ с основным состоянием $X^1\Sigma$ во втором порядке теории возмущений.

С. Я. Уманский

2, 1972, 3.

(HeH)⁺

1971

(79867x) Dissociation of 10 keV (HeH)⁺ molecular ions. III. Influence of excited states. Schopman, J.; Los, Johannes (FOM-Inst. Atoom- Molecuulfys., Amsterdam, Neth.). *Physica (Utrecht)* 1971, 51(1), 132-45 (Eng). Certain aspects of the velocity distribution of the He⁺ fragments caused by the collision-induced dissocn. of HeH⁺, only could be explained by assuming that the primary beam contains a fraction of mols. in the 1st excited singlet or triplet state. The assumption has been verified by performing inelastic loss measurements for HeH⁺ colliding on noble gas target atoms. Moreover, these excited mols. upon collision with a target atom give rise to dissocn. into a He atom and

C. A. 1971. 74. 16

a proton with energies barely above the dissocn. limit. Interference effects lead to resonances in the cross section for those fragments flying off parallel to the beam. This result explains the fine structure in the obsd. proton spectrum of dissocg. HeH^+ . The same spectrum obsd. in the dissocn. of HeH^+ without gas in the collision chamber also might be due to induced de-excitation of these excited mols. The dissocn. of NeH^+ and NeD^+ , being mols. very similar to HeH^+ , might be expected to exhibit the same features. This result indeed was obsd. The existence of stable HeH could be verified by charge exchanging the HeH^+ beam. RCPH

1971

HeH⁺

(39698c) Franck-Condon factors for bound state-continuum transitions in HeH⁺. Sizun, Muriel; Durup, Jean (Lab. Collisions Electron., Orsay, Fr.). *Mol. Phys.* 1971, 22(3), 459-63 (Eng). Franck-Condon factors for transitions from bound levels of the $\tilde{A}^1\Sigma^+$ and $\tilde{a}^3\Sigma^+$ states to the continuum of the $\tilde{X}^1\Sigma^+$ state of HeH⁺, calcd. as functions of the energy of the latter level, show damped oscillations and in some cases a resonance due to the presence of quasi-bound levels.

Galano/100
1. K.

C.A. 1972. 76.8

HeH⁺

m.n.

kb. mex

parent

XI-3106

1972

94814h Influence of electron correlation on vibrational and rotational constants for HeH⁺. Banyard, K. E.; Dixon, M.; Tait, A. D. (Dep. Phys., Univ. Leicester, Leicester, Engl.). *J. Phys. B* 1972, 5(8), L160-L163 (Eng). Recently, extensive 1-center configuration-interaction wave functions for HeH⁺ at

$0.1 \leq R \leq 5.0$ at. units were reformulated as a natural expansion. Using the fact that the 1st natural configuration is energetically indistinguishable from a Hartree-Fock result enables one to construct noncorrelated and correlated $E(R)$ curves within the same basis set. Spectroscopic and mol. const. were derived from each $E(R)$ curve; a comparison allowed one to discuss the influence of electron correlation.

C.A. 1972. 47.14

XI - 3035

1972

HeH⁺

20 Б12. Изучение метода взаимодействия конфигураций с помощью техники приведенного разбиения. I. Основное состояние. Bartlett Rodney J., Brändas Erkki J. Reduced partitioning procedure in configuration interaction studies. I. Ground states. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 11, 5467—5477 (англ.)

М.П.

Предлагается метод приближенного решения уравнения Шредингера, понижающий порядок вековой задачи в методе взаимодействия конфигураций (ВК) за счет выбора усеченного базиса в виде линейных комбинаций детерминантов Слэтера, образующих поправки к волновой функции в первых порядках теории возмущений (ТВ). В случае конечного орбитального базиса при учете достаточно больших порядков ТВ метод совпадает с методом ВК. Указывается тесная связь с методом наискорейшего спуска. Уравнения метода позволяют использовать правила сумм в случае ТВ Релея — Шредин-

X. 1972. 20

гера и теорему Бриллюена, если начальное приближение найдено методом ССП. Приводимые данные расчета молекулы HeH^+ (базис слэтеровских орбиталей, 7 — для атома He, 5 — для H) при учете 8 порядков ТВ (начальное приближение найдено методом ССП МО ЛКАО) показывают расхождение с полным методом ВК не более чем в 10^{-4} ат. ед. на всех межъядерных расстояниях. В молекулах H_2 и HeH^+ учет уже 3-го порядка ТВ дает более 90% корреляционной энергии. Полученные спектроскопич. параметры молекулы HeH^+ в состоянии $X^1\Sigma^+$ сравниваются с лит. данными.

В. Пульшев

HeH⁺

Ne; Be

kb. max.
parameter

C.A. 1972

77. v 16

105748t Realistic single-function potential model for the noble hydride ions. Helbig, H. F.; Ferguson, W. E., Jr. (Dep. Phys., Clarkson Coll. Technol., Potsdam, N.Y.). *Phys. Rev. A* 1972, 6(1), 519-21 (Eng). Accurate Born-Oppenheimer energies for the noble-gas hydride ions were found only for HeH⁺, but only over the small range 1.1-1.8 bohr, and with less accuracy in the range 0.1-6 bohr. Approx. calcns. have been made for NeH⁺ in the range 1.35-4.5 bohr. For the heavier systems, such as ArH⁺, KrH⁺ and XeH⁺, only crude approxns. for the quantities γ_m (the equil. sepn.), D_e (the potential-well depth), and k (the force const.) exist. In view of this sparsity of information and current interest, it would be useful to have math. models for their interaction energies which coordinate whatever facts are at hand. The function $V(\gamma, A, B, C)$, which has already proved a useful representation for the HeH⁺ system, can provide such a model for the entire family. The results with HeH⁺ and NeH⁺ show that the function provides a good model of the interaction energy in the vicinity of the energy well when the consts. A , B , and C are fixed using the information D_e and K at the single point γ_m . Unfortunately, the only system for which the test can be made, H₂⁺, has a peculiarity which makes the test perhaps unduly severe; i.e. because of the symmetry between the 2 nuclear sites, the energy of H₂⁺ yields very slowly to its asymptotic behavior at large γ . The results for the hydride ions of Ar, Kr, and Xe cannot presently be checked. A table lists the parameters describing the interaction energy for H₂⁺ and the noble gas hydride ions.

P. A. Larssen

1972.

(+3)

111



H_2 , He_2^{2+} , HeH^+ (cum. nocm. kv. mex. pācēm) 1972
XI 3197

(Cum H_2 ; III)
Macias A;
J. Chem. Phys., 1972, 57, N3, 1364-5
(anul.)
X

Ab initio calculation of harmonic force constants. VII.
Results from some two-electron SCF wave functions.
10 (P) CA, 1972, 77, N12, 81554h

20829.3626

Ph. Ch 17304
67-17304 H_2 , HHe^+ , LiH (и
парей)
49587

Pouzard Guy, Pujol Louis. Energie des
systemes H_2 , HHe^+ et LiH . "Theor.
chim. acta", 1972, 26, N 2, 187-193

(франц., рез.англ.)

10

(см H_2 , 14)
0693

677 680 68 6

ВИНИТИ

HeH⁺

XI-3170

1972

22 Б14. Электронная структура основного состояния молекулы HeH⁺. Yamada Toshiko, Sato Hiroshi, Ishiguro Eiichi, Takezawa Terashi. The electronic structure of the ground state of the HeH⁺ molecule. «J. Phys. Soc. Jap.», 1972, 32, № 6, 1595—1604 (англ.)

Вариационным методом рассчитана потенциальная кривая основного электронного состояния молекулы HeH⁺. В кач-ве пробной волновой функции использовалась трехпараметрическая функция, построенная из произведений слейтеровских 1s-орбиталей He и H таким образом, чтобы учитывались радиальные корреля-

Эл. спектр-ра
осн. сост.

X. 1972. 22

ции в He, где локализована основная часть электронной плотности. Это достигается введением двух $1s$ -орбиталей He с независимо варьируемыми орбитальными экспонентами. Значения энергии при равновесном межъядерном расстоянии рассчитаны также с тремя другими более сложными пробными функциями. Результаты сравниваются с более точными расчетами других авторов.

С. Я. Уманский

HeH⁺

XI-3170

1972

(ze,)
(wi)
(De)

52506d Electronic structure of the ground state of the HeH⁺ molecule. Yamada, Toshiko; Sato, Hiroshi; Ishiguro, Eiichi; Takezawa, Terashi (Fac. Sci., Ochanomizu Univ., Tokyo, Japan). *J. Phys. Soc. Jap.* 1972, 32(6), 1595-604 (Eng). The total electronic energy of HeH⁺ was calcd. with the wave functions in which the "in-out correlation" is included by using 2 different 1s Slater type AO's of He. The conclusion is that the effect of the in-out correlation of electrons in the vicinity of the He nucleus is considerable in HeH⁺, though it is somewhat smaller than that in the He atom. Among the 4 wave functions employed here, the simplest one can give the qual. explanation of the electronic structure of this system. The results computed with the simplest wave function are $E(R_e) = -2.935026999$ at. units, $R_e = 1.46663$ at. units, $\omega_e = 3.1 \times 10^3$ cm⁻¹ and $D_e = 1.62$ eV. The best values of $E(R_e)$ and R_e , calcd. by use of the most flexible wave function, amt. to -2.93819775 and 1.4648 at. units, resp.

CA, 1972, 77, 8

HeH⁺

1973

Б23. Применение процедуры приведенных разбиений к методу конфигурационного взаимодействия. II. Возбужденные состояния. Bartlett Rodney J., Brändas Erkki J. Reduced partitioning procedure in configuration interaction studies. II. Excited states. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 4, 2032—2042 (англ.)

X 1974. N3



Техника приведенных разбиений в теории возмущений, примененная ранее для построения оценок энергии основного состояния (см. сообщ. I, РЖХим, 1972, 20Б12) использована для получения сходящейся последовательности оценок энергий нескольких возбужденных состояний одновременно. В качестве начального приближения выбираются m функций, после чего применением техники приведенной резольвенты, основанной на представлении гамильтониана в форме $H = H_0 + V$ и порождением этим представлением разложения резольвенты в ряд по степеням V , задача сводится к определению в нелинейном итерационном процессе m оценок для энергий возбужденных состояний в $k+1$ -ом порядке по оценкам k -ого порядка. Кроме того, получены приближенные выражения, позволяющие найти поправку след. порядка для выделенного состояния. Оба приближения реализованы вместе с полным расчетом методом конфигурац. взаимодействия для молекулы $\text{HeH}^+ (^1\Sigma^+)$ в базисе 18 слэитеровских орбиталей. Найдено, что учет поправок первого порядка для нижних пяти состояний позволяет учесть примерно 60% корреляц. поправки при всех исследуемых межъядерных расстояниях (от 2 до 12 ат. ед.), а поправки 8-го порядка — не менее чем на 99,9%. Приведены зависимости оценок энергии для всех состояний от межъядерного расстояния.

HeH⁺

1973

2 Д123. Приведенная процедура разделения в исследованиях конфигурационного взаимодействия. II. Возбужденные состояния. Bartlett Rodney J., Brandas Erkki J. Reduced partitioning procedure in configuration interaction studies. II. Excited states. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 4, 2032—2042 (англ.)

Разработанная в ч. I процедура исследования конфигурационного взаимодействия (КВ), основанная на теории возмущений и развитая применительно к основному состоянию молекулы, обобщена на возбужденные состояния. Предложены 2 варианта вычислительной схемы, обладающие быстрой сходимостью. Энергия 1-го ($A^1\Sigma^+$), 2-го ($B^1\Sigma^+$) и 3-го ($D^1\Sigma^+$) возбужденных состояний иона HeH^+ вычислена при межатомных расстояниях от 4 до 12 ат. ед. Уже в 1-м приближении энергия всех трех состояний при всех расстояниях понижается на ~60% полной энергии КВ, во 2-м — на 90% и не более 8 итераций нужны для учета 99,9% энергии КВ. Ч. I см. РЖФиз, 1972, 10Д83. Ю. Е. Эйзнер

IX

(1973)

ф. 1974

№ 2

HeH^+

He_2^+

ommene 1505

XI-3971

1973

нотену,
клуб.

7139n Model potential calculations on open-shell molecules. Botcher, C. (Dep. Theor. Phys., Univ. Manchester, Manchester, Engl.). *J. Phys. B* 1973, 6(11), 2368-76 (Eng). The model potential techniques used for systems with closed-shell cores can be extended to open-shell cores without difficulty. The method is applied to calc. potential energy curves for the mols. HeH^+ and He_2^+ . The results are in good agreement with ab initio calcs. Some interesting long-range curve crossings in HeH^+ are discussed.

C.A. 1974. 80. N2



40507.4638

38240

02

1973

MGU, Ph, Te

HeH⁺

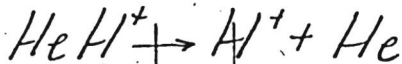
2106

Cade Paul E., Huo Winifred. Hartree-Fock-
-roothaan wavefunctions for diatomic mo-
lecules. I. First- and second-row hydri-
des AH, AH⁺, and AH. "Atom. Data and
Nucl. Data Tables", 1973, 12, N 5, 415-466
(англ.)

0 0 7 5 5 5 1

083 084

ВИНИТИ



≡

Fournier Paul G.

"Colloq. int CNRS" 1974

N 217, 169-176 (pp pub. annex)

продвижение

колеб. вращ.

соед. и др.

(see HeH^+ ; III)

x 1975. N 1

HeH⁺

2 Б22. Полулокализованные орбитали для основного состояния HeH⁺. Kelkar V. K., Bhalla K. C., Khubchandani P. G. Semi-localized orbitals for the ground state of HeH⁺. «Mol. Phys.», 1973, 26, № 1, 221—224 (англ.)

Выполнен вариационный расчет энергии и некоторых ср. значений одноэлектронных операторов для основного состояния системы HeH⁺. Волновая функция представлена в одnodетерминантном виде. Пространственные части спин-орбиталей в эллиптических координатах представлены линейными комбинациями двух орбиталей вида $\exp[-R(\alpha\zeta + \beta\eta)]$, где R — межъядерное расстояние, α и β — вариационные параметры. Отмечается большая гибкость подобной формы орбиталей и возможность перейти к др. приближениям, если на α , β и коэф. определяющие разложение по базису наложить дополнительные ограничения. Высказано мнение, что орбитали такой формы удобны для построения волновых функций сложных молекул с помощью данных о простых молекулах.

В. И. Пупышев

геометр

х. 1974

№2

1973

2558-1X

✱ (41) Емобу

HeH⁺

XI-3552

1973

1 Д117. Полулокализованные орбитали для основного состояния молекулы HeH⁺. Kelkar V. K., Bhalla K. S., Khubchandani P. G. Semi-localized orbitals for the ground state of HeH⁺. «Mol. Phys.», 1973, 26, № 1, 221—224 (англ.)

Волновая ф-ция неограниченного метода Хартри—Фока для молекулы HeH строится из полулокализованных орбиталей, предложенных ранее для гетероядерных молекул, и выраженных в эллиптич. координатах. Рассматриваемая ф-ция имеет более общий вид, чем использованные ранее в расчетах HeH⁺. На основе выполненного расчета получено равновесное расстояние, молекулярного иона гидрида гелия (1,4 ат. ед.) и электронная энергия связи (2,04 эв).

Э. Р. А.

ф. 1974 N 1

HeH⁺

XI-3552

1973

97186g Semilocalized orbitals for the ground state of helium hydride(+) ion. Kelkar, V. K.; Bhalla, K. C.; Khubchandani, P. G. (Chem. Div., Bhabha At. Res. Cent., Bombay, India). *Mol. Phys.* 1973, 26(1), 221-4 (Eng). Previous work (V. K. K., et al., 1972) was extended to obtain an unrestricted-Hartree-Fock-type mol. wave function for HeH⁺ comprised of semilocalized-type orbitals (Mueller, C. R.; Eyring, H.; 1951). The equil. internuclear distance calcd. for HeH⁺ is 1.4 bohr, and the electronic binding energy is 2.04 eV.

u. n.

kb. mex

pacem

C. D. 1973 79 N16

40124.4567

Ph, ~~101~~ E, ChHeH⁺
40892

1973

x 43162

McLaughlin Donald R., Thompson Donald L.

Ab initio dynamics: $\text{HeH}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{He} + \text{H}_3^+$ (C_{2v}) classical trajectories using a quantum mechanical potential-energy surface.

"J. Chem. Phys."; 1973, 59, N 8, 4393-

-1405

(англ.)

015 016

0 22

0020-444

ВИНИТИ

HeH⁺

1973

7 Д242. Диссоциация молекулярных ионов HeH⁺ с энергией 10 кэв. Ч. IV. Вращательная преддиссоциация из состояния X¹Σ. Schorpan J., Fournier P. G., Los J. The dissociation of 10 keV HeH⁺ molecular ions. IV. Rotational predissociation of the X¹Σ state. «Physica», 1973, 63, № 3, 518—526 (англ.)

Экспериментально, по измерению скорости ионов H⁺ и D⁺, являющихся продуктом диссоциации, исследована спонтанная, а также вызванная столкновениями диссоциация изотопич. молекул ⁴HeH⁺, ³HeH⁺, ⁴HeD⁺ и ³HeO⁺. Ионы, получаемые с помощью

0545-14

фр. 1973 N 7

плазмотронного ионного источника, ускорялись до энергии 10 кэв и поступали в столкновительную камеру, где осуществлялась их диссоциация. Найдено, что распад ионов носит характер преддиссоциации из квазисвязанных возбужденных колебательно-вращательных состояний. Дана грубая оценка времени этого распада. Ч. III см. РЖФиз, 1971, 7Д239.

Б. Ф. Горднец

HeH⁺

15 Б105) Диссоциация молекулярных ионов HeH⁺ с энергией 10 кэв. IV. Вращательная преддиссоциация состояния X¹Σ. Schorman J., Fournier P. G., Los J. The dissociation of 10 keV MeH⁺ molecular ions. IV. Rotational predissociation of the X¹Σ state. «Physica», 1973, 63, № 3, 518—526 (англ.)

преддиссоц

На масс-спектрометре зарегистрированы распределения по импульсам ионов H⁺ и D⁺, возникающих при спонтанной или индуцированной столкновениями диссоциации ионов He⁴H⁺, He³H⁺, He⁴D⁺ и He³D⁺. Во всех случаях обнаруживаются резкие максимумы (менее резкие для He³D⁺), к-рые не могут быть приписаны вращательным сериям, принадлежащих квазирезонансному уровню в континууме основного состояния X¹Σ. Макси-

мумы приписаны вращательной преддиссоциации ионов из квазисвязанных состояний, к-рые образуются в ионизационной камере при изучении спонтанной диссоциации или путем возбуждения из стабильных низколежащих состояний при диссоциации, индуцированной столкновениями. Часть III см. РЖХим, 1971, 12Б105. В. Е. Скурат

Х. 1973 №15

1973

Х1-3440

HeH⁺

XI-3440

1973

+ 88726k Dissociation of 10 keV helium hydride (1+) molecular ions. IV. Rotational predissociation of the X¹Σ state. Schopman, J.; Fournier, P. G.; Los, J. (FOM-Inst. Atoom-Molecuulfys., Amsterdam, Neth.). *Physica (Utrecht)* 1973, 63(3), 518-26 (Eng). Measurements of the spontaneous and collision-induced dissocn. are presented for the isotopic mols. ⁴HeH⁺, ³HeH⁺, ⁴HeD⁺, and ³HeD⁺. In all cases, however, though less developed in ³HeD⁺, sharp peaks are obsd. in agreement with earlier observations in ⁴HeH⁺. These peaks are attributed to rotational predissocn. of the mol. The quasibound states are formed in the ionization chamber in the case of spontaneous dissocn. and by excitation from stable lower-lying state for the collision-induced contributions.

(Do)

C.A. 1973. 78, N 14

HeH⁺

1974

Aubert M

Bessis N et al.

(ϵ_i , τ_e , c.m.n. Phys. Rev. A: Gen phys, 1974,
nucrum) 10, N1, 61-70 (annu)

(c.m. H₂; III)

HeH⁺

ХЗ-4597

ХЗ-4027974

(м.п.)

8 Д159. HeH⁺: спектр квазисвязанных состояний, экспериментально определенные спектроскопические постоянные и эффективность вращательного возбуждения при столкновениях. Bernstein Richard B. HeH⁺: quasibound state spectrum, experimentally-derived spectroscopic constants, and propensity for rotational excitation via collision. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 1, 1—8 (англ.)

Экспериментальные данные (РЖФиз, 1973, 7Д242) о спектре поступательной энергии протонов, испущенных в результате мономолекулярного и индуцированного столкновениями распада иона HeH⁺, проанализированы с точки зрения получения сведений о потенциале взаимодействия He и H⁺. Использовался известный метод Данхема. Проведено отнесение наблюдаемых резонансов к квазисвязанным состояниям, вычислены энергии этих состояний при различных значениях колебательных и вращательных чисел для ⁴HeH⁺ и ³HeH⁺. М.С.

В. А. Морозов

Ф.1974. N8

HeH⁺

ХУ-4597

XI-4027 1974

19 Б125. HeH⁺: спектр квазисвязанного состояния, экспериментально определенные спектроскопические постоянные и склонность к вращательному возбуждению, через столкновение. Bernstein Richard B. HeH⁺: quasibound state spectrum, experimentally-derived spectroscopic constants, and propensity for rotational excitation via collision. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 1, 1—8 (англ.)

(м.и.)

Проведен анализ колебательно-вращательной структуры резонансов молекулы HeH⁺ (I), наблюдавшихся в виде пиков в трансляц. спектре испущенных вперед протонов из молек. пучков I при мономолек. и вызванных столкновениями распадах I. Приведено отнесение наблюдавшихся квазисвязанных состояний ($0 \leq V \leq 6$; $15 \leq J \leq 27$) I-He⁴ и I-He³. Анализ колебательно-вращательной структуры резонансов проводился методом наименьших

Х. 1974. N 19

квадратов с использованием ф-лы Дэнхема отдельно для $I\text{-He}^4$ и $I\text{-He}^3$, а также совместно для $I\text{-He}^4$ и $I\text{-He}^3$ с использованием ф-лы Стволлея $E(\eta, \epsilon) = -D + \sum_{i,j}^3 Z_{ij} \eta^i \epsilon^j$, где $D = 0,074928$ ат. ед. — лит. значение, полученное из эмпирич. расчетов энергии связи I , Z_{ij} — коэф. Стволлея-Дэнхема, $\eta = (V + 1/2) \mu^{-1/2}$ и $\epsilon = (J^2 + J) \mu^{-1}$ суть приведенные по массе колебательные и вращательные квантовые числа соотв. Приведены определенные значения коэф. Стволлея-Дэнхема Z_{ij} и коэф. Дэнхема Y_{ij} ($0 \leq i, j \leq 3$) для $I\text{-He}^4$ и $I\text{-He}^3$. С использованием ф-лы Стволлея вычислены и сопоставлены с эксперим. значениями энергии квазисвязанных состояний He^4D^+ ($0 \leq V \leq 5$, $23 \leq J \leq 34$) и He^3D^+ ($5 \leq V \leq 9$, $12 \leq J \leq 21$). Заключено, что наведенные столкновениями квазисвязанные состояния I возникают в основном в результате переходов $\Delta J = +1$ и в незначит. степени в результате переходов $\Delta J = +2$.

А. П. Александров

XI- 4192

40917.1262

Ph, Ch, TC

38526

HeH *

02

1974

*

4-6275

Chisholm C.D.H., Lodge K.B. An expansion method for calculating molecular properties. IV. Energies of some excited sigma states of one-electron and two-electron molecular systems.

"Mol. Phys.", 1974, 28, N1, 249-271
(англ.)

157 1501 0 2

0 091 533 ВИННИТИ

41.105.3674

Ch, Ph, TC, MGU

HeH⁺ 0063

02

1974

X4-7209

Colbourn E.A., Coulson C.A.

A. 1/Z-expansion analysis of singlet-triplet differences in the lowest $1, 3\Pi$ states of H_2 , HeH⁺, and LiH. (см. $H_2; III$)

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1974, 7, N 12, 1574-1581 (англ.)

0228 пик

205 208

0220

ВИНИТИ

18787
X-

1974

 HeH^+ N_2^+

1 B131. Спектроскопия колебательно-вращательных молекулярных состояний преддиссоциирующих ионов, основанная на изучении трансляционного движения. Fournier Paul G. A. Spectroscopie de translation des niveaux rovibroniques d'états moléculaires d'ions prédissociés. «Colloq. int. CNRS», 1974, № 217, 169—176 (франц., рез. англ.)

Создана установка для измерения кинетич. энергии фрагментов, образующихся при диссоциации, с точностью 10^{-4} эв. Точность может быть повышена до $\sim 10^{-6}$ эв. Это дает возможность говорить о своего рода спектроскопии преддиссоциирующих состояний. Предложен метод, позволяющий изучать особенности преддиссоциации простых положит. и отриц. ионов. Метод применен к случаю $\text{HeH}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{He}$ и $\text{N}_2^+ \rightarrow \text{N}^+ + \text{N}$. Он позволяет оценивать также времена жизни преддиссоциирующих колебательных уровней. А. Бобров

спектроскоп.
колеб. вращ.
мол. состояний

ж. 1975. № 1

(43)



преддиссоц.
колеб. вращ. сост. мол.

HeH^+

N_2^+

Спектры
преддиссо-

12 Д523. Исследование переходов между колебательно-вращательными уровнями диссоциирующих молекулярных ионов. Fournier Paul G. A. Spectroscopie de translation des niveaux rovibroniques d'états moléculaires d'ions prédissociés. «Colloq. int. CNRS», 1974, № 217, 169—176 (франц.; рез. англ.)

Разработан метод измерения малых величин кинетич. энергии фрагментов молекулы, образующихся в результате преддиссоциации. Приведена схема эксперим. установки и описана методика измерений, обеспечивающая точность порядка 10^{-4} эв. Отмечено, что улучшенный вариант установки позволит повысить точность измерений до $\sim 10^{-6}$ эв. Измерены спектры преддиссоциации молекулярных ионов HeH^+ и N_2^+ и зучен эффект замещения изотопов в молекуле азота. Библ. 16.

фр. 1974 N12

1974



(+1)

41028.737
Ph, TC, MGU

30063

$\text{He}^+ - \text{H}$

02

1974

3033

Flannery M.R., McCann K.J.

Elastic and 2s and 2p inelastic
scattering of atomic hydrogen by helium-
ions.

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.", 1974, 7,
N 11, 1349-1357

(англ.)

0221 Физ

195 196 - 2 13

ВИНИТИ

50203.6721

Ph, Ch, Ma, MGU

96559 HeD⁺TC HeH⁺

(2)

1974

*4-8027

Gray J., Tomlinson R.H. Production of short-lived molecules in a mass spectrometer. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1974, 15, N 2, 121-131

(англ.)

0294 пик

263 266 0 28 6

ВИНИТИ

HeH⁺

1974

11 Б18. Изучение молекулярного иона HeH⁺ методом конфигурационного взаимодействия. I. Синглетные E-состояния. Green T. A., Michels H. H., Browne J. C., Madsen M. M. Configuration interaction studies of the HeH⁺ molecular ion. I. Singlet sigma states. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 12, 5186—5197 (англ.)
В адиабатич. приближении методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны основное и низшие возбужденные состояния мол. иона HeH⁺. Исследовано 10 синглетных состояний (¹Σ), коррелирующих с состояниями объединенного атома с главными квантовыми числами, меньше или равными 4. При больших межъядерных расстояниях рассмотрены только те Σ-состояния, к-рые коррелируют с состояниями разделенных атомов с $n \leq 3$. Расчет проводился в области изменения межъ-

5634-4394

17

основа.
и низшие
возб.
сост.

х. 1975. № 11

ядерного расстояния R от 0 до 50 ат. ед. с шагом 0,1 ат. ед. Базис состоял из слейтеровских функций с добавлением двухцентровых орбиталей, заданных в эллипсоидальных координатах. Область изменения R поделена на 8 частей, в каждой из к-рых проводилось варьирование параметров базиса и специфич. отбор конфигураций. Рассчитанная волновая функция HeH^+ стабильна по отношению к расширению базиса и увеличению числа конфигураций. При больших R волновая функция удовлетворяет условиям теоремы Гельмана—Фейнмана и с хорошей точностью воспроизводит атомные характеристики, напр. поляризуемость. На примере проведенных расчетов обсуждены возможности неэмпирич. расчетов простых систем и колич. описания низкоэнергетич. атом-атомных столкновений. А. Дементьев

Литер.

HeH⁺

расчет

9/1975-6

6 ДГ57. Исследование конфигурационного взаимодействия в молекулярном ионе HeH⁺. I. Синглетные σ -состояния. Green T. A., Michels H. H., Browne J. C., Madsen M. M. Configuration interaction studies of the HeH⁺ molecular ion. I. Singlet sigma states. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 12, 5186—5197 (англ.)

Метод наложения конфигураций применяется для рассмотрения синглетных σ -состояний молекулярного иона HeH⁺, соответствующих состояниям объединенного атома с главным квантовым числом, не превосходящим 3. Расчеты выполнены для широкой области межъядерного расстояния (0—34,5 через 0,1 ат. ед., 35,0—50,0 через 0,5 ат. ед.). Рассматриваются собств. значения оператора энергии и средние от электронной координаты вдоль межъядерной оси. Точность полученных результатов иллюстрируется путем сравнения с атомными характеристиками (для больших межъядерных расстояний), а также с результатами, полученными с применением теоремы Гельмана—Фейнмана. Проводится сопоставление с результатами других авторов. Показано, что при межъядерных расстояниях более 3 ат. ед. для возбужденных состояний оказывается весьма успешным одноэлектронный модельный потенциал, при меньших межъядерных расстояниях и в пределе объединенного атома метод модельного потенциала неприменим. Э. Р. А.

1974

1631
X1-4394

He H⁺

1974

15950x Configuration interaction studies of the helium hydride(+) molecular ion. I. Singlet sigma states. Green, T. A.; Michels, H. H.; Browne, J. C.; Madsen, M. M. (Sandia Lab., Albuquerque, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(12), 5186-97 (Eng). The method of superposition of configurations is applied to the singlet sigma states of HeH⁺ which correlate to the sepd. atom states of principal quantum no. ≤ 3 . The calcs. are carried out for internuclear seps. in the ranges 0(.1)34.5,35.0(.5)50.0 bohr. Energy eigenvalues and the expectation values of the electron coordinate along the internuclear line are discussed. Supplementary calcs. of higher quality wavefunctions for the lowest states are also reported. Comparisons with other work are given. It is shown that for internuclear seps. greater than about 3 bohr a one-electron electron model potential approach is quite successful for the excited states. At smaller internuclear seps., and as the united atom limit is approached, current model potential methods cannot be trusted. In this region the model potential, being based on the sepd. atoms, cannot describe the actual changing charge distributions of the core electron.

4634

XI-18

C.A. 1975. 63 N2

HeH⁺

XI-4438

1974.

(6 Д158) Исследование конфигурационного взаимодействия в молекулярном ионе HeH⁺. II. Матричные элементы дипольного момента и радиального взаимодействия для синглетных σ -состояний. Green T. A., Browne J. C., Michels H. H., Madsen M. M. Configuration interaction studies of HeH⁺ molecular ion. II. Dipole and radial coupling matrix elements for the singlet sigma states. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 12, 5198—5204 (англ.)

Для 10—12 синглетных σ -состояний с учетом конфигурац. взаимодействия вычислены матричные элементы дипольного момента и радиального взаимодействия в молекулярном ионе HeH⁺ для межъядерных расстояний от 0 до 50 ат. ед. Результаты сравниваются с результатами других авторов. Точный расчет указанных матричных элементов демонстрирует применимость количественных неэмпирич. расчетов для столкновений легких атомов при низких энергиях. Э. Р. А.

расчет

Ф1975N6

HeH⁺

1974

изучение
молекулярного
иона.

11 Б19. Изучение молекулярного иона HeH⁺ методом конфигурационного взаимодействия. II. Матричные элементы операторов дипольного момента и радиального взаимодействия для синглетных Σ -состояний. Green T. A., Browne J. C., Michels H. H., Madsen M. M. Configuration interaction studies of HeH⁺ molecular ion. II. Dipole and radial coupling matrix elements for the singlet sigma states. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, 12, 5198—5204 (англ.)

Волновые функции низших 10 синглетных состояний (Σ) молек. иона HeH⁺, полученные методом конфигурац. взаимодействия (см. пред. реферат), использованы для расчета матричных элементов операторов радиаль-



Х. 1975. N 11

ного и углового взаимодействий: $\langle n | \partial / \partial R | m \rangle$ и $\langle n | L_z | m \rangle$. Эти матричные элементы нужны для расчета низкоэнергетич. столкновений $\text{He}-\text{H}^+$, $\text{H}-\text{He}^+$ методом возмущенных стационарных состояний. Проведен тщательный анализ точности полученных значений матричных элементов путем сравнения результатов расчета с результатами др. авторов и путем исследования стабильности полученных результатов по отношению к улучшению приближения. Полученные результаты показывают возможности неэмпирич. расчетов процессов столкновения лёгких атомов на сегодняшний день.

А. Дементьев

50116.1873

TC, Ph, Ch

 $\text{HeH}^+(\text{E})$
29864

02

1974

2890

Haines Linda M., Murrell John N., Ralston B.J., Woodnutt D.J. Gaussian cell model for molecular orbitals.

"J. Chem. Soc. Faraday Trans.", 1974,
Part 2, 70, N 11, 1794-1800

(англ.)

0281 ДИК

255 258 0273

ВИНИТИ

HeH⁺

1974

диссоц.
молекуляр.
иона

17 Б97. Изучение диссоциации молекулярного иона HeH⁺ с использованием орбиталей эллиптического типа. Muttick K., Dastidar T. K. Rai, Barua A. K. Dissociation of the (HeH) molecular ion using elliptic-type orbitals. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1974, 7, № 2, 288—296 (англ.).

В борновском приближении проведен расчет углового распределения продуктов диссоциации, вызванной электронным возбуждением HeH⁺ из состояния X¹Σ в состояние A¹Σ при рассеянии на ионе HeH⁺ электронов с энергиями от 35 до 1000 эв. (порог возбуждения равен 27,75 эв). Волновые функции основного и возбуж-

Х. 1974 № 17

денных состояний HeH^+ , получены методом конфигурац. взаимодействия в базисе орбиталей, имеющих вид произведения слейтеровских АО и орбиталей эллиптич. типа (что позволило учесть эффекты поляризации электронного облака HeH^+). Изменение колебательных и вращательных состояний не учитывалось. Вычисленное полное поперечное сечение диссоциации возрастает с увеличением энергии электронов от порога возбуждения, имеет плавный максимум в области 70 эв и убывает с дальнейшим ростом энергии электронов. Характер зависимости дифференциального сечения рассеяния фрагментов и полного сечения диссоциации HeH^+ от

энергии рассеиваемых электронов в основном такой же, как и у ионов H_2^+ и HD^+ при их возбуждении из состояния $^2\Sigma_g$ в состояние $^2\Sigma_u$.

В. Ф. Хрустов

HeH⁺

(guceayayus)

1974

87670s Dissociation of the helium hydride(+) molecular ion using elliptic-type orbitals. Mullick, K.; Dastidar, T. K. Rai; Barua, A. K. (Indian Assoc. Cultiv. Sci., Calcutta, India). *J. Phys. B*. 1974, 7(2), 288-96 (Eng). The electron-impact dissoen. of the HeH⁺ molecular ion produced in the X¹Σ⁺ → A¹Σ⁺ transition was studied by using the Born-Oppenheimer approximation. For these calens., accurate Harris-type elliptic orbitals (H.H. Michels, 1966) for the electronic states of HeH⁺ were used, which include the effects of distortion polarization due to the heteronuclearity of the ion. The angular distribution of the dissoen. fragments and the total dissoen. cross section were computed as functions of the incident electron energy. The results obtained show no striking feature due to the heteronuclearity of the molecular ion. Suggestions for further work are given.

C.D. 1974.80. N16

$\text{He}_n\text{H}; \text{He}_n\text{H}^+_{n=1-4}$ (м.п., до, geom. структ., расчёт) 1974
XI 4039

Mittlew M. B., Matcha R. L., Hayes E. F.

J. Chem. Phys., 1974, 60, N 2, 674-679
(англ.)

Theoretical studies of hydrogen-
-rare gas complexes: He_nH and
 He_nH^+ clusters.

РФХИ, 1974, 16 528

1-0



40520.1369

TE, Ph, Ch

40892 02
 $\text{HeH}^+; \text{HeH}^-$

1974

4-4898

Simons Gary, Schwartz Anna K. Floating
ellipsoidal Gaussian orbital computations
on small molecules.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 6, 2272-
2274 (англ.)

IX-4637

0110 ББК 1

093

095

102

ВИНИТИ

1979

 HeH^+ NeH^+ ArH^+

85: 68566z Theoretical determination of the dissociation energy for the noble gas hydride ions HeH^+ , NeH^+ and ArH^+ by the FSGO method. Tamassy-Lentei, Mrs. I.; Szaniszlo, J. (Elem. Fiz. Tansz., Kossuth Lajos Tudomanegy., Debrecen, Hung.). *Acta Phys. Chim. Debrecina* 1974, 19, 37-43 (Eng). The dissocn. energy and the internuclear distance of the noble gas hydride ions HeH^+ , NeH^+ , and ArH^+ were computed in the ground state by the FSGO method. The calcd. values are in rather good agreement with the exptl. and other calcd. results available. L. Somogyi

to, re

nb. acc. facc.

⑦2 ☒

C.A. 1976. 85 n 10

1974(5)

HeH⁺
NeH⁺
ArH⁺

(-50)

(+2) 

X. 1977. №3

3 Б12. Теоретическое определение энергии диссоциации ионов гидридов благородных газов HeH⁺, NeH⁺ методом ПСГО. Tamassy-Lentei I., Szaniszló J. Theoretical determination of the dissociation energy for the noble gas hydride ions HeH⁺, NeH⁺, and ArH⁺ by the FSGO method. «Acta Univ. debrecen. Ser. phys. et chim.», 1974(1975), 19, 37—43 (англ.; рез. венг., рус.)

В рамках простой вариац. процедуры Фроста с использованием плавающих сферич. гауссовых орбиталей (ПСГО) проведены расчеты энергии диссоциации молек. ионов HeH⁺, NeH⁺ и ArH⁺. Базис для каждой системы содержит миним. число орбиталей, причем функции электронов K-оболочки атома благородного газа центрированы на его ядре, а функции L-оболочки расположены в вершинах тетраэдра. Приведены оптимизированные значения параметров орбиталей. В целом рассчитанные значения энергии диссоциации и равновесного расстояния согласуются с имеющимися эксперим. и теор. данными, хотя для NeH⁺ различие в величинах энергии диссоциации и достигает величины 0,3 ат. ед.

А. В. Немухин

1979-3

HeH⁺
NeH⁺
ArH⁺

3 Д122. Расчет энергии диссоциации ионов HeH⁺, NeH⁺, ArH⁺ методом ПСТО. Tamassy-Lenter I., Szani-zlo J. Theoretical determination of the dissociation energy for the noble gas hydride ions HeH⁺, NeH⁺ and ArH⁺ by the FSGO method. «Acta Univ. debrecen. Ser. phys. et chim.», 1974(1975), 19, 37—43 (англ.; рез. венгр., рус.)

Численно, в рамках метода МО, рассчитаны энергия диссоциации D и равновесное расстояние R ионов HeH⁺, NeH⁺, ArH⁺, имеющих непродолжительное время жизни. При расчетах использованы орбитали Гаусса

$$\psi_i = \left(\frac{2}{\pi \rho_i}\right)^{3/4} \exp [-(r-R_i)^2/\rho_i^2],$$

где ρ_i — радиус орбитали, R_i — положение центра орбитали, причем в процессе минимизации энергии варьировались как ρ_i , так и R_i (метод плавающих сферических гауссовых орбиталей). Вычисленные значения составляют (в ат. ед.) $D=0,0703; 0,107; 0,1076; R=1,286; 1,457; 2,198$ для HeH⁺, NeH⁺, ArH⁺ соответственно, что удовлетворительно согласуется с экспериментальными и ранее рассчитанными величинами. И. В. Лебедь

(70)

ф. 1977
N 3

(42)

✱

He H⁺

1975

McCullough E.A.

He H⁺
He H⁺
He H⁺

J. Chem Phys 1975, 62, 3991-3999 (atomic)

(all He; III)

51119.6808

Ch, Ph, TC

48588

HeH⁺ (номенклатура)

1975

3-10559

Schneider F.o., Havemann U., Zülicke L.
Quasiklassische Berechnungen reaktiver
Elementarprozesse im System He + H₂⁺.

"Z. phys. Chem." (DDR), 1975, 256, N 4,
773-777

(нем.)

0504 пик

471 472 496

ВИНИТИ

HeH⁺

1975

rb. mex.
pacrem

137062e Possibility of formation of a helium-proton (HeH⁺) molecule in helium collisions with protons. Zurba, V. B.; Bolotin, A. B. (Vilnius V. Kapsukas State Univ., Vilnius, USSR). *Liet. Fiz. Rinkiny* 1975, 15(4), 235-9 (Russ). The possibility of the formation of HeH⁺ mols. was studied using the LCAO method of selfconsistent field in Roothaan's variant. AO were described as linear combination of the Gaussian functions. The formation of the bonds in the HeH⁺ mol. was attributed to the 1s orbitals. The dependence of the total energy on the distance between He and H⁺ was calcd. Orbital d. and nucleus charges were detd. The calcd. bond energy of the HeH⁺ mol. at ground level was 0.0311 at. units (19.3 kcal/mole) exhibiting thus its stability. J. Kramarz

C. H. 1975 83 N 16

1975

 HeH^+ (ϕ_0)

201975. N 24

24 Б27. О возможности образования молекулы HeH^+ при столкновениях атомов гелия с протонами. Зурба В. Б., Болотин А. Б. «Liet. fiz. rinkinys, Lit. fiz. sb.», 1975, 15, № 2, 235—239 (рез. лит., англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследована возможность образования молекулы HeH^+ ; расчет проводился в базисе гауссовых функций. Найдена зависимость полной энергии системы от расстояния между ядром гелия и протоном как для основного состояния, так и для возбужденного. Определены заселенности орбиталей и заряды на атомах в зависимости от межъядерного расстояния. Показано, что система HeH^+ имеет в основном состоянии минимум полной энергии, к-рый соответствует межъядерному расстоянию около 1 А, а заряды на атомах имеют при этом экстремальные значения. Установлена зависимость переноса электронного заряда с атома гелия на протон от расстояния между ними. Определена энергия связи молекулы HeH^+ в основном состоянии. Резюме

HeH⁺

XI-4867

1975

12 Б34. Теоретическое исследование спектроскопических характеристик молекулы HeH⁺ в основном и первом возбужденном триплетном состояниях. З у р б а В. Б., Россихин В. В., Болотин А. Б. «Liet. fiz. rinkinys, Lit. fiz. sb.», 1975, 15, № 6, 899—904 (рез. лит., англ.)

На основе предложенного в работе (РЖХим, 1974, 7Б18) вида потенциала Данхэма теоретически исследована молекула HeH⁺ в основном и первом возбужденном триплетном состояниях. В кач-ве базиса в неэмпирич. расчете методом МО ЛКАО ССП использовались линейные комбинации гауссовых функций. Получены силовые постоянные: F_2 , F_3 , F_4 , а также др. спектроскопич. характеристики (ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e , R_e , I_e). Расчитаны положения колебательно-вращательных уровней. Проведено сравнение потенциальных кривых нулевого и четвертого порядка. Теор. результаты сравнены с имеющимися данными др. авторов. Автореферат

Сид. Моск.

М. П.

X1976 N12

HeH⁺

XI-4867

1975

5 Д157. Теоретическое исследование спектроскопических характеристик молекулы HeH⁺ в основном и первом возбужденном триплетном состоянии. Зурба В. Б., Россихин В. В., Болотин А. Б. «Lit. fiz. rinkinys, Lit.ССР физ. сб.», 1975, 15, № 6, 899—904 (рез.; лит., англ.)

На основе нового потенциала Данхэма теоретически исследована молекула HeH⁺ в основном и первом возбужденном триплетном состоянии. В качестве базиса в неэмпирич. расчете использовались АО, представленные в виде линейной комбинации гауссовых ф-ций. Получены силовые постоянные, а также другие спектроскопич. характеристики. Рассчитаны положения колебательно-вращательных уровней. Проведено сравнение потенц. кривых нулевого и четвертого порядка. Библи. 14. Резюме

Сил. пост.
спектр.
пост.

ф. 1976. №5

HeH⁺

XI-4867

1975

84: 126954s Theoretical studies of spectral characteristics of HeH⁺ molecules in the ground and the first excited triplet states. Zurba, V. B.; Rossikhin, V. V.; Bolotin, A. B. (Vilnius V. Kapsukas State Univ., Vilnius, USSR). *Liet. Fiz. Rinkiny* 1975, 15(6), 899-904 (Russ). The mol. orbitals and

corresponding single electron levels and the total energy of the system in the ground and excited states were found by using the method of the self-consistent field in the Hartree-Fock-Roothaan variation in which the mol. orbitals are represented by linear combination of at. orbitals. To avoid the difficulties assocd. with calcg. multicenter integrals, the at. orbitals are approxd. by a fixed no. of Gaussian functions. The force consts. F_2 , F_3 , and F_4 and other spectroscopic characteristics were found for the ground and 1st excited states. The positions were calcd. of the vibrational-rotational levels. The potential curves of the zero and 4th order are compared. Theor. results were compared with literature data.

КВ, нет
факелы

C.A. 1976 84 N18

HeH⁺

43-13578

1976

85:112937x A view of bond-formation in helium hydride cation (HeH⁺) from the separated species. Chandra, A. K. Sebastian, K. L. (Dep. Inorg. Phys. Chem., Indian Inst. Sci. Bangalore, India). *Mol. Phys.* 1976, 31(5), 1489-1504. Bond formation in HeH⁺ from the sepd. atoms of He + H⁺ or He⁺ + H was studied in terms of the changes in mol. electron distributions and the forces exerted on the nuclei, which were calculated from the 2-center Slater elliptic MO wave functions using the Hellmann-Feynman theorem. Bonding in the ground state is almost covalent and is caused by charge d. transfer from behind He to the internuclear region. In the excited states the origin of bonding is the long-range force arising from the ion-induced dipole interaction.

kb. acc.
fact

C.A. 1976. 85 N16

HeH⁺

1976

12 Д200 К. О колебательной автоионизации молекулы и рекомбинации несимметричных молекулярных ионов. Чибисов М. И., Яковленко С. И. (Ин-т атом. энергии им. И. В. Курчатова. Препринт ИАЭ-2668). М., 1976. 16 с., ил., 11 к. — На ротапринте

Колебат.
автоионизация

Исследуются свойства высоковозбужденных ($n \geq 5$) связанных электронных состояний несимметричных двухатомных молекул. Найдена скорость колебательной автоионизации — процесса, при котором высоковозбужденный электрон ионизуется за счет передачи ему колебательной энергии ядер. Рассмотрен также обратный процесс — колебательное прилипание электрона к молекулярному иону. Проведены конкретные расчеты для иона HeH⁺. Найдено выражение для рекомбинационного потока, обусловленного колебательным прилипанием и прилипанием за счет тройного соударения иона с двумя электронами (тройная рекомбинация). Показано, что исследованные процессы должны играть существенную роль в кинетике низкотемпературной плазмы.

Автореферат

Ф 1976 N 12

60427.4280

Ch, Ph, TC, MGU

30063

 $He^+ + H$ *иониз.*
крив.

1976

4220

Faheyton J., Houver J.C., Barat M.
 Masnou-Seeuws F. Elastic and inelastic
 processes in $He^+ - H$ collisions in the
 keV energy range. "J.Phys.B:Atom.and
 Mol.Phys.", 1976, 9, N. 3, 461-471 (англ.)

0610 пик

582 584

602

ВИНИТИ

HeH⁺

X-13629

1976

infrared -
conjugate

85:38802f A new test of translational spectroscopy: the rotational predissociation of the X¹Σ state of helium hydride ion (HeH⁺). Fournier, P. G.; Comtet, G.; Odom, R. W.; Loch, R.; Maas, J. G.; Van Asselt, N. P. F. B.; Los, J. (Lab. Collisions Ioniques, Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 40(1), 170-4 (Eng). The expt. on the accurate measurement of the kinetic energy released during the predissocn. of HeH⁺ ions into the fragments H⁺ and He was repeated. This expt. was carried out on 2 machines specially designed for this purpose. The new results differ from those of the original expt. and agree now very well with the theor. predictions.

C.A. 1976 55N6

HeH⁺

* U-13629

1976.

23 Б1052. Новая проверка спектроскопии поступа-
тельной энергии. Вращательная преддиссоциация HeH⁺
(X¹Σ). Fournier P. G., Comtet G., Odon R. W.,
Locht R., Maas J. G., Asselt N. P. F. B. van,
Los J. A new test of translational spectroscopy: the ro-
tational predissociation of the X¹Σ state of HeH⁺. «Chem.
Phys. Lett.», 1976, 40, № 1, 170—174 (англ.)

преддиссоц.

На двух разных установках изучена преддиссоциация
HeH⁺ → H⁺ + He путем измерений распределения кинетич.
энергии ионных осколков. В двух типах экспери-
ментов первоначально колебательно или вращательно-
возбужденный ион с данной энергией попадал в реакц.
камеру, а ионные осколки направлялись или в электро-
статич. анализатор с дальнейшим многоканальным сче-
том или в двойной масс-спектрометр. Результаты изме-
рений на разных установках хорошо согласуются меж-
ду собой и с теор. расчетами процесса. С. К. Чекин

х. 1976. №23

HeH⁺

11 D245. Новая проверка трансляционной спектроскопии: вращательная преддиссоциация из состояния HeH⁺ ($X^1\Sigma$). Fournier P. G., Comtet G., Odum R. W., Locht R., Maas J. G., Asselt N. P. F. B. van, Los J. A new test of translational spectroscopy: the rotational predissociation of the $X^1\Sigma$ state of HeH. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 40, № 1, 170—174 (англ.)

На двух различных установках проведено измерение кинетич. энергии фрагментов H⁺ и He, получающихся вследствие преддиссоциации колебательно и вращательно-возбужденных ионов HeH⁺ ($X^1\Sigma$). В обеих установках использовался пучок быстрых (с энергией 5÷15 кэв) молекулярных ионов, что позволило избежать неопределенности в измерениях, вызванной тепловым движением частиц, и существенно повысить точность измерения. Спектр поступательной энергии фрагментов имеет резонансную структуру, обусловленную диссоциацией молекулярных ионов из различных энергетических колебательных и вращательных состояний. Измерения на обеих установках дали близкие результаты и позволили с хорошей точностью (лучше 5%) определить положение ряда колебательно-вращательных уровней HeH⁺.

Б. Ф. Гордиев

1976

X-13629

и.п.

ф. 1976
N 11

HeH⁺

Жз-13568

1976

10 Д72. Изучение методом конфигурационного взаимодействия молекулярного иона HeH⁺. III. Синглетные пи и дельта состояния. Green T. A., Michaels H. H., Browne J. C. Configuration interaction studies of the HeH⁺ molecular ion. III. Singlet pi and delta states. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 10, 3951—3956 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенц. кривые электронных состояний типов ¹Π и ¹Δ для молекулярного иона HeH⁺. Потенц. кривые построены в области изменения межъядерного расстояния от 0 до 50 ат. ед. для ¹η-состояний и в области от 0 до 65 ат. ед. для ¹Δ-состояний, причем шаг составлял в среднем 0,1 ат. ед. На основе полученных волн. ф-ций рассчитаны дипольные матричные элементы переходов, а также матричные элементы взаимодействия: $\langle n | \nabla_{z1} + \nabla_{z2} | m \rangle$ и $\langle n | \partial / \partial R | m \rangle$ для всех возможных комбинаций типов Π—Π и Δ—Δ. Полученные результаты сравнены с результатами метода модельных потенциалов. Ч. II см. РЖФиз, 1975, 6Д158. А. Дементьев

потенц.
кривые

Ф. 1976
N 10

HeH⁺

*3-13568

1976

21 Б21. Изучение молекулярного иона HeH⁺ методом конфигурационного взаимодействия. III. Синглетные пи- и дельта-состояния. Green T. A., Michels H. H., Browne J. C. Configuration interaction studies of the HeH⁺ molecular ion. III. Singlet pi and delta states. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 10, 3951—3956 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия проведен расчет ряда синглетных состояний π и Δ молекулы HeH⁺, коррелирующих в диссоциац. пределе с атомными состояниями He(1s, nl) или H(nl) при $n \leq 3$. Базис включал орбитали слейтеровского типа и эллипсоидальные функции. Расчеты выполнены для межъядерных расстояний R от 0 до 50 ат. ед. с шагом 0,1 при $R \leq 34,5$ и шагом 0,5 при больших R , причем для состояний Δ расчет продолжен до $R=65$ ат. ед. Приведены результаты расчета энергий, матричных элементов операторов дипольного момента и импульса, а также с учетом результатов более ранних расчетов — моментов радиальной и угловой связи для синглетных состояний Σ , π , Δ . Сообщ. II, см. РЖХим, 1975, 11Б19. В. И. Пупышев

М.П.

X1976
N21

HeH⁺

* 13-13568

1976

Кб. уел.
пакет

25593p Configuration interaction studies of the helium monohydride(+) molecular ion. III. Singlet pi and delta states. Green, T. A.; Michels, H. H.; Browne, J. C. (Sandia Lab., Albuquerque, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(10), 2001-6 (Eng). The method of superposition of configurations was applied to the singlet Π and Δ states of HeH⁺ which correlate to the sep'd. atom states of principal quantum no. ≤ 3 . The calcs. were carried out for internuclear sepns. R in the range 0(0.1)34.5, 35.0(0.5)50.0 at. units. The Δ state calcs. were also extended to $R = 65$. The work is a continuation of a study of HeH⁺ for which the singlet Σ states have already been reported. In addn. to the energy eigenvalues, matrix elements for radial and angular coupling and the dipole and gradient matrix elements are calcd. for all combinations of the singlet Σ , Π and Δ states. Plots and tables of the calcd. eigenvalues and matrix elements are presented. Where possible the calcd. data are compared with the results of previous work. The results are useful for theor. collision studies of H⁺ + He and H + He⁺.

C.A. 1976 85 N4

HeH⁺

Жз-13143

1976

(расчет потенциальных кривых)

18 Б32. Взаимодействия на больших и промежуточных расстояниях в трех низших сигма-состояниях иона HeH⁺. Kolos W. Long- and intermediate-range interaction in three lowest sigma states of the HeH⁺ ion. «Int. J. Quantum Chem.», 1976, 10, № 2, 217—224 (англ.; рез. франц., нем.)

Методом конфигурац. взаимодействия с оптимизацией нелинейных параметров вычислены потенциальные кривые основного ($X^1\Sigma^+$) и двух возбужденных ($A^1\Sigma^+$ и $a^3\Sigma^+$) состояний иона HeH⁺ в интервалах межъядер-

Х. 1976, 18

ных расстояний $5 \leq R \leq 9$, $4 \leq R \leq 10$ и $3 \leq R \leq 10$ ат. ед., соотв. Ион в основном состоянии диссоциирует на He и H^+ , в двух возбужденных — на He^+ и H. Пробные волновые функции заданы как симметризованные произведения $\exp(-\alpha_1 \xi_1 - \alpha_2 \xi_2 + \beta_1 \eta_1 + \beta_2 \eta_2)$ на линейные комбинации произведений вида $\xi_1^r \xi_2^r \eta_1^s \eta_2^s \rho^\mu$, где ξ_i и η_i — эллиптич. координаты электронов, $\rho = 2r_{12}/R$; (r_{12} — межъэлектронное расстояние); α_i и β_i — параметры; r_i , S_i и μ — целые числа, причем r и $s \leq 5$, $\mu \leq 2$. Вычисленная энергия основного состояния лишь на $2,42 \text{ см}^{-1}$ выше точного значения. Энергии дальнедействующих взаимодействий ($6 \leq R \leq 10$ ат. ед.) в двух возбужденных состояниях иона HeH^+ получены также как суммы поправки первого порядка, вычисленной с волновыми функциями типа функций Гайтлера—Лондона, энергии индукц. взаимодействия в пятом порядке теории возмущений и энергии дисперсионного взаимодействия во втором порядке теории возмущений. Установлено, что вычисленные таким способом величины плохо передают энергии взаимодействия He^+ и H при больших расстояниях.

В. Хрустов

HeH⁺

*4-13143

1976

84:185242f Long- and intermediate-range interaction in three lowest sigma states of the helium hydride(+) ion. Kolos, W. (Max-Planck-Inst. Phys. Astrophys., Munich, Ger.). *Int. J. Quantum Chem.* 1976, 10(2), 217-24 (Eng). In a continuation of previous work (K., 1974-5), accurate variational wave functions were used to calc. the total energies and the potential energies of the HeH⁺ ion, as functions of the internuclear distance (R , in at. units), for the ground state ($R = 5.0-9.0$) which dissociates into He + H⁺, and for the 1st excited singlet state $4^1\Sigma^+$ ($R = 4-10$) and the lowest triplet state $4^3\Sigma^+$ ($R = 3-10$) which both dissociate into He⁺(1s) + H(1s). The variational results are compared with those obtained by using a perturbation-theory expansion.

not yet
packed

C.A. 1976, 84 N26

HeH⁺

расчет
по методу
Кригера

9 Д109. Энергия взаимодействия для трех низших сигма-состояний иона HeH⁺ при больших и средних межъядерных расстояниях. Kolos W. Long-and intermediate-range interaction in three lowest sigma states of the HeH⁺ ion. «Int. J. Quantum Chem.», 1976, 10, № 2, 217—224 (англ.; рез. франц., нем.)

Рассчитаны отдельные участки потенц. кривых иона HeH⁺. Расчеты проводились прямым вариационным методом с использованием базисного набора двухэлектронных функций, которые являются обобщением функций Джеймса—Кулиджа. Оптимизировались как линейные, так и нелинейные параметры. Вычислены энергии основного состояния (83-членная функция, $5 \leq R \leq 9$ ат. ед.), которое диссоциирует на He и H⁺, и двух возбужденных состояний, $a^3\Sigma^+$ (40-членная функция, $3 \leq R \leq 10$ ат. ед.), $A^1\Sigma^+$ (52-членная функция, $4 \leq R \leq 10$ ат. ед.), которые диссоциируют на He⁺ и H. Результаты вариационных расчетов сравниваются с энергиями, которые получаются при использовании теории возмущений. Показано, что на больших межъядерных расстояниях в энергию взаимодействия системы He⁺...H основной вклад вносят обменный и поляризационный члены второго и более высших порядков.

А. И. Панин

1976

51-13143

Ф 1976 № 9

HeH⁺

ЖУ-12247

1976

16 Б22. Новая неэмпирическая потенциальная кривая и квазистационарные состояния молекулы HeH⁺. Kolos W., Peek J. M. New ab initio potential curve and quasibound states of HeH. «Chem. Phys.», 1976, 12, № 4, 381—386 (англ.)

расчет
основн.
состоян

В приближении Борна — Оппенгеймера рассчитана энергия основного состояния молекулы HeH⁺ в области $0,9 \leq R \leq 4,5$ ат. ед. В расчете использована 83-членная вариационная функция в эллиптических координатах. С помощью полученной кривой определены положения и ширины квазистационарных колебательно-вращательных уровней. Рассчитанные значения сравнены с эксперим. Найдено, что, хотя точность расчета существенно повышена, расхождение с экспериментом осталось практически неизменным. Отличие объяснено неточностями эксперимента.

А. И. Шушин

X. 1976. № 18

HeH⁺

XU-12247

1976

8 Д154. Новая неэмпирическая потенциальная кривая и квазисвязанные состояния HeH⁺ Kolos W., Peek J. M. New ab initio potential curve and quasibound states of HeH. «Chem. Phys.», 1976, 12, № 4, 381—386 (англ.)

(min) Потенциальная кривая для основного состояния иона HeH⁺ рассчитана в приближении Борна—Оппенгеймера для $0,9 \leq R \leq 4,5$ ат. ед. с использованием 83-членной вариационной волн. ф-ции с включением в явном виде межэлектронных расстояний. Приведены расчетные значения энергий корреляции, энергий и ширин квазисвязанных колебательно-вращательных состояний ³HeH⁺ и ⁴HeH⁺. Полученные результаты обсуждаются в свете эксперим. данных по сечениям диссоциации рассматриваемого иона.

В. И. Барановский

ф. 1976. № 8.

1976

HeH⁺

#45-12247

ref. acc.
part 105

84:155961x New ab initio potential curve and quasibound states of helium hydride(+). Kolos, W.; Peek, J. M. (Max-Planck-Inst. Phys. Astrophys., Munich, Ger.). Chem. Phys. 1976, 12(4), 381-6 (Eng). The ground state energy of HeH⁺ was calcd. in the Born-Oppenheimer approxn. for $0.9 \leq R \leq 4.5$ au (at. units) by using an 83-term variational wavefunction in elliptic coordinates and including the interelectronic distance. The resulting potential curve was used to compute the quasibound state spectrum of the ion.

C.A. 1976 BY N22

HeH⁺

HD

H₂

kb. corr.
factor

86: 60791u Long-range interaction in some two-electron systems. Kolos, W. (Quantum Chem. Lab., Univ. Warsaw, Warsaw, Pol.). *Quantum Sci.* 1976, 465-77 (Eng). Edited by Calais, Jean-Louis; Goscinski, Osvaldo; Linderberg, Jan. Plenum: New York, N. Y. In an extension of previous work (K., 1974-5), perturbation calcns. were done on: (a) the contributions of the polarization and exchange energies to the potential energies of the $X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Sigma_u^+$ states of H₂ and of the $A^1\Sigma^+$ and $a^3\Sigma^+$ states of HeH⁺; (b) the change of the He correlation energy as a function of the internuclear distance in HeH⁺; (c) the dissociation energies of HD in different excited vibrational levels of the B state; and (d) some excited vibrational energy levels of HD in the C state. In (c) and (d), the adiabatic approxn. was used, with and without corrections for nonadiabatic effects. Comparisons are made with exptl. data where available. In (a), the 2nd-order exchange energy is very important, except for the X state of H₂. In (b), neglect of electron correlation causes errors of 5-7% in the potential energy of HeH⁺. Inclusion of corrections due to nonadiabatic effects improved and decreased agreement with exptl. results in (c) and (d), resp.

1976

(+2) 

C.A. 1977. 86. N10

4
HeH⁺

1 Д111. Вращательная преддиссоциация HeH⁺. Измерения энергии и времен жизни. Locht R., Maas J. G., Asselt N. P. F. B. van, Los J. The rotational predissociation of HeH⁺: Energy and lifetime measurements. «Chem. Phys.», 1976, 15, № 2, 179—184 (англ.)

Измерены относит. времена жизни и энергии выше предела диссоциации для вращательной преддиссоциации некоторых квазисвязанных уровней электронного состояния X¹Σ⁺ иона HeH⁺. Рассмотрены состояния с номерами колебательных уровней 0, 1, 2, 3, 4 и вращательных уровней соответственно 25, 23, 21, 19, 17. Для проведения экспериментов использовалась двойная масс-спектрометрич. установка с соосным расположением пучков первичных и вторичных ионов. Времена жизни особенно чувствительны к форме кривой потенц. энергии. Эти измерения использовались для сравнения с теоретич. данными для двух потенц. кривых, отличающихся на величину, не превышающую ~10⁻³ эв. Показано, что потенц. кривая, рассчитанная в работе (РЖФиз, 1976, 8Д154), с наибольшей точностью позволяет объяснить эксперим. данные. С помощью данных по временам жизни для исследованных уровней рассчитаны относит. заселенности.

Г. К.

вращат.
преддиссоц.

Ф. 1977. № 1

1976

58451-6
*

HeH⁺

X 18-14745

1976

2 Б91. Вращательная преддиссоциация HeH⁺. Измерение энергии и времени жизни. Locht R., Maas J. G., Asselt N. P. F. B. van, Los J. The rotational predissociation of HeH⁺: Energy and lifetime measurements. «Chem. Phys.», 1976, 15, № 2, 179—184 (англ.)

Вращат.
преддиссоц.
(7)

На установке, состоящей из источника ионов (моноплазматрон), масс-анализатора, камер распада и анализатора по импульсам, измерены относит. времена жизни $\tau_{v,j}$ и энергии $E_{v,j}$ для различных колебательно-вращательных состояний иона HeH⁺ ($X^1\Sigma^+$), распадающегося в результате вращательной преддиссоциации. Принцип измерений основан на выделении и регистрации ионов H⁺, образующихся при распаде HeH⁺ в камерах распада. Выделение этих ионов осуществлялось путем приложения отрицат. Пт к камерам, в результа-

ШИИ
ОТВОИ
ОЦЕ

X 1977 N2

те чего образующиеся в них ионы H^+ приобретали импульс, зависящий не только от $E_{v,j}$, но и от поля в камере и отличный от импульса H^+ , образующихся в свободном от поля пространстве. Кол-во образующихся в камерах ионов H^+ пропорционально кол-ву достигающих камеры ионов HeH^+ , к-рое однозначно связано с $\tau_{v,j}$. Полученные результаты сопоставлены с результатами расчетов, выполненных для различных кривых P_t энергии (полученных неэмпирич. методом). Установлено, что $\tau_{v,j}$ чрезвычайно чувствительны к форме кривой P_t энергии; данные измерений позволяют отличить кривые P_t энергий, различающиеся лишь на $4 \cdot 10^{-5}$ ат. ед. С помощью измеренных $\tau_{v,j}$ ($v=0-4$, $j=25-17$) определены факторы относит. заселенности уровней HeH^+ .
Е. Николаев

HeH⁺

Omura 7076 1976

Saha S, et al.

omogueso-
yugus
krubae
nomerus.
merum

J. Phys. B: Atom.
and Mol. Phys., 1978,
11 (19), 3349-56.

61203.8709
Ch, Ph, TC, MGU

40392

HeH⁺

1976
X 43-15597

Stewart R.F., Watson D.K., Dalgarno

A.
Variational time-dependent Hartree-Fock
calculations. III. Potential curves for
two-electron molecular systems.

"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 6, 2104-2111
(англ.)

(см. H₂; III)

0757. пик

714 724 7 0 0

ВИНИТИ

70202.1841

 $H^+ + He$

1976

Ch, Ph, TC

96201

* 4-16510

Viehland L.A., Mason E.A., Stevens T.H., Monchick L. Test of the $H_2 + He$ interaction potential. Comparison of the interactions of He with H^+ , H_2 and H_3 .
"Chem. Phys. Lett.", 1976, 44, N 2, 360-362
(VINITI.)

0799 VINITI

780 780 1.0 1.

VINITI

HeH⁺

summary of G. Herzberg

1977

U.R.

check

89: 50858u The predicted infrared spectrum of helium hydride(1+) ion and its possible astrophysical importance. Dabrowski, I.; Herzberg, G. (Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *Trans. N. Y. Acad. Sci.* 1977, 38(Festschr. I. I. Rabi), 14-25 (Eng). The IR rotation-vibration spectrum of HeH⁺ is predicted on the basis of W. Kolos and J. M. Peck's (1976) ab initio potential function of the electronic ground state and the dipole moment function derived from the electron d. function of H. H. Michel (1966) and S. Peyerimhoff (1965). The existence of quasibound levels leads to the possibility of recombination of He + H⁺ by inverse photodissocn. The spectrum emitted in this process is also predicted. Two of the predicted lines agree with unidentified lines obsd. in a planetary nebula and the Orion nebula but a conclusive identification is not yet possible.

C. A. 1978. 89 N 6

HeH^+

18 Б24. Точное теоретическое определение молекулярных энергетических уровней. Kolos W. Accurate theoretical determinations of molecular energy levels. «Acta phys. austr.», 1977, Suppl. № 17, 161—179 (англ.)

Проведено сравнение точных теор. расчетов двух-электронных систем с эксперим. величинами. В расчетах учтены неадиабатич., релятивистские и радиац. поправки. Расчеты основного состояния молекулы водорода согласуются с эксперим. значениями в пределах ошибки эксперимента. Для возбужденных $^3\Sigma_v^+$ и $^1\Sigma_g^+$ состояний молекулы водорода небольшие расхождения между теор. и эксперим. результатами объяснены в основном недостаточно строгим учетом адиабатич. поправок. Рассмотрены также результаты расчета квазисвязанных состояний HeH^+ . Отмечено, что в случае квазисвязанных состояний наиболее существенным является расчет потенциальной кривой при больших межатомных расстояниях. Б. И. Жилинский

 (ϵ_i)

И. 1977 N 18

Hell[†]

1974

Kolos W.

Acta Phys. Austriaca, Suppl,
1974.

Accurate theoretical deter-
minations of molecular energy
levels.

C. A. 1974 87 v18, 141363d (see H₂, III)

HeH^+

He_2^+

вращат.
преддиссоц.

(+1) 17

ф. 1949, 118

1977

8 Д133. Вращательная преддиссоциация малых молекулярных ионов. Lo's J., Nowak P. J. C. M. Rotational predissociation of small molecular ions. «Etats atom. et mol. couplés contin. atom. et mol. hautement excités. Colloq. Aussoi, 1977». Paris, 1977, 281—35 (англ.)

С использованием метода трансляционной спектроскопии экспериментально исследована вращательная преддиссоциация небольших молекулярных ионов HeH^+ и He_2^+ . Описанная в работе техника эксперимента состоит в масс-спектрометрич. разделении ионов, образовавшихся при преддиссоциации в ионном пучке, по поступательной энергии. Метод имеет высокую степень разрешения. Кратко обсуждаются теоретич. методы расчета положения и ширины преддиссоциированных состояний. Показано, что из сравнения результатов теории и эксперимента можно определить потенциал взаимодействия частиц в молекулярном ионе с большой точностью, т. е. предложенный эксперим. метод дает

возможность проверить неэмпирич. расчет потенциала взаимодействия, а также точность теории квазистационарных состояний. В результате такого сравнения обнаружено отличие результатов теории и эксперимента для положения уровней порядка 20 мэв даже для иона He_2^+ , достаточно хорошо исследованного теоретически.

А. И. Шушин

HeH⁺

ЖС - 18398

1974

11 Д249. Диссоциация вращательного резонансного состояния: расчет собственных энергий и ширин квазисвязанных состояний ${}^4\text{HeH}^+$. Price Roger I. The dissociation of an orbiting resonance: calculation of eigen-energies and widths of the quasi-bound states of ${}^4\text{HeH}^+$. «Mol. Phys.», 1977, 33, № 2, 559—571 (англ.)

В приближении Борна — Оппенгеймера с использованием улучшенных внешних граничных условий рассчитаны собственные энергии (E_{nJ}) колебательно-вращательных (n, J) квазисвязанных уровней основного электронного состояния $X^1\Sigma^+$ системы ${}^4\text{HeH}^+$. Полученные энергии сравнены с энергиями трех других расчетов: по стандартному методу ВКБ с квадратичным приближением, расчета с использованием внешних граничных условий, присущих нерегулярной ф-ции Бесселя, и расчета методом максимизации ф-ции временной задержки. Проведены также сравнительные расчеты ширин колебательно-вращательных состояний (Γ_{nJ}) в классическом и квантовом приближениях. Обсуждено использование развитого метода улучшенных внешних граничных условий для расчетов структуры вращательных резонансных состояний систем, диссоциирующих на ион и нейтральный атом, напр., H_2^+ . Библ. 43

Резюме

диссоц.
вращат.
резон.
сост.

ф. 1974
N 11

HeH⁺

1978

88:110894u Variable-screening method for diatomic molecules. Aguilar, J.; Murez, C.; Nakamura, H. (Serv. Phys. At., CEN, Saclay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1978; 53(1), 174-6

(Eng). A variable-screening iterative method is proposed for calcg. near-Hartree-Fock electronic wave function and energies for diat. mols. This new method was applied to the ground state of HeH⁺.

kb. max.
fact

C.A., 1978, 88, N16

HeH⁺

1979

расчет
потенц.
кривых

5 Д136. Метод вариации параметров экранирования для двухатомных молекул. Aguilar J., Murez C., Nakamura H. Variable-screening method for diatomic molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1978, 53, № 1, 174—176 (англ.)

Для расчета потенц. кривых двухатомных молекул предложен метод вариации параметров экранирования. Метод состоит в нахождении эффективного гамильтониана $\bar{H}$ молекулы, который включает экранированные заряды ядер $Z_i = Z_i - \alpha_i$ и не содержит членов межэлектронного взаимодействия. Параметры экранирования

Ф. 1978, 15



расчет потенц.
кривых (метод)

а; предлагается аппроксимировать ϕ -лой, содержащей постоянные экранирования разделенных и объединенного атомов и произвольные константы. Значения констант находятся из условия минимума $\langle H - \bar{H} \rangle$, где H — точный гамильтониан молекулы. Метод опробован при построении потенц. кривой основного электронного состояния системы HeH^+ . Сравнение полученных результатов с более точными указывает, что ошибка в полной энергии, найденной методом вариации параметров экранирования, не превышает 2%.

А. Дементьев

HeH⁺

оттиски 6403

1978

HeH

расчет
потенц.
кривых

12 Д143. Модель переменного экранирования для двухатомных молекул. Aguilar J., Nakamura H. Variable-screening model for diatomic molecules. «Chem. Phys.», 1978, 32, № 1, 115—121 (англ.)

Описан приближенный метод расчетов двухатомных молекул с использованием эффективного гамильтониана (ЭГ) для электронов на двухцентровых МО вида $h(i) = -\Delta/2 - z_{ia}/r_a - z_{ib}/r_b$, где z_{ia} , z_{ib} — эффективные заряды ядер, зависящие от межатомного расстояния. Возможность расчета возбужденных состояний различной мультиплетности обеспечивается выбором электронной конфигурации (с учетом диабатических и адиабатических корреляционных диаграмм) и ПЭ для объединенного атома и изолированных атомов. Приведены результаты расчетов потенциальных кривых первых синглетного и триплетного состояния иона HeH⁺ и трех-электронной системы HeH. Результаты расчетов хорошо согласуются с полученными более точными методами.

В. И. Барановский

ф. 1978, N 12

He H⁺

kb. acc.
factor

1978

90: 29275n Complex potential and electron spectrum in atomic collisions involving fast electronic transitions: Penning and associative ionization. Bieniek, Ronald James (Dep. Astron., Univ. Illinois, Urbana, Ill.). *Phys. Rev. A* 1978, 18(2), 392-413 (Eng). Formulas for the local complex potential in the entrance-channel radial wave (ECRW) equation are developed for inelastic atom-atom collisions that involve an electronic transition between Born-Oppenheimer states. Penning and associative ionization are used as illustrative examples. A complete derivation of T -matrix elements involving radial wave functions is given. Two approx. formulas for the energy spectrum of the particle ejected in the electronic transition are derived in terms of approx. real radial wave functions. The real component of the ECRW function is not much affected by the imaginary width when the width is small compared to other energy terms. A method of estg. the contribution of the imaginary radial wave functions to matrix elements from information obtained only from approx. totally real wave functions is presented. The eigenenergies of all 149 rotational-vibrational states of HeH⁺(X²) are reported.

C.A., 1979, 90, N4

ВР-Х/1-5688 1978

HeH⁺

энергия
связи

18 Б17. Изучение двухэлектронной химической связи с помощью расчета ожидаемых значений энергии разделений матрицы плотности. II. Гетероядерная система HeH⁺. Butscher Werner, Schmidtke Hans-Herbert. An investigation of the two electron chemical bond calculating energy expectation values from density matrix partitionings. II. The heteronuclear case HeH⁺. «Chem. Phys.», 1978, 30, № 1, 41—51 (англ.)

С использованием разделения матриц плотности первого и второго порядка по Рюденбергу проанализирована зависимость от расстояния (R) различных вкладов в энергию связи для основного состояния гетероядерной двухэлектронной системы HeH⁺. Матрицы плотности вычислены из волновых функций метода МО ЛКАО ССП, причем для каждого R варьировались не только коэф. МО, но и экспоненты базисных орбиталей слейтеровского типа (базис Пейеримхофа, «J. Chem. Phys.», 1965, 43, 998). Проведены также

2, 1978, N 18

расчеты первого возбужденного состояния ($^1\Sigma^+$)HeH⁺ с ограниченным учетом конфигурац. взаимодействия и показано существование очень пологого минимума при $R=6,5$ ат. ед. Подробно обсуждено образование хим. связи в основном состоянии HeH⁺ на основе зависимости от R потенциального и кинетич. вкладов, а также атомных, интерференц. членов, вкладов промотирования и переноса заряда. М. Гофман

HeH⁺

ВФ-Х1-5688

1978

9 Д97. Исследование двухэлектронной химической связи путем расчета средних значений энергий на фрагментах матрицы плотности. Ч. II. Гетероядерный случай — HeH⁺. Butscher Werner, Schmidtke Hans-Herbert. An investigation of the two electron chemical bond calculating energy expectation values from density matrix partitionings. II. The heteronuclear case HeH⁺. «Chem. Phys.», 1978, 30, № 1, 41—51 (англ.)

фрагмент
матрицы

Для основного и первого возбужденного электронных состояний иона HeH⁺ рассчитаны вклады в энергию связи, соответствующие различным частям электронной матрицы плотности, разделенной на фрагменты по схеме Рюденберга (Ч. 1 см. Butscher W. et al., «Chem. Phys.», 1977, 23, 87). Для основного состояния исследована зависимость величин различных вкладов от межъядерного расстояния HeH⁺, что иллюстрируется графиками. Матрица плотности получена методом ССП

Ф; 1978, № 9

на базисе слэтеровских орбиталей, который обеспечивает достижение хартри-фоковского предела по энергии. Для расчета волн. ф-ции первого возбужденного электронного состояния использован ограниченный метод конфигурац. взаимодействия. Показано, что наибольшую роль при образовании связи в молекуле HeH^+ играют члены матрицы плотности, отвечающие, в интерпретации Рюденберга, переносу электронного заряда. А. Дементьев

1978

HeH⁺

8 Б92. Трансляционная спектроскопия преддиссоциационных состояний. Fournier P., Comtet G., Odom R. Translational spectroscopy of predissociating states. «Adv. Mass. Spectrom. Vol. 7A. Proc. 7th Int. Mass Spectrom. Conf., Florence, 1976». London, 1978, 66—69 (англ.)

преддиссоц.

Обсуждено применение трансляционной спектроскопии (измерение кинетич. энергии продуктов диссоциации) для изучения преддиссоц. состояний (ПС). Отмечено, что наиболее прямым проявлением существования ПС является дискретный характер распределения кинетич. энергий продуктов диссоциации. Рассмотрены

В

общий
(примеч.)

основные эксперим. трудности этого метода. Измерены значения кинетич. энергий продуктов диссоциации $\text{HeH}^+ = \text{H}^+ + \text{He}$, образованных в результате вращательной преддиссоциации 5 квази-связанных состояний HeH^+ через центробежный барьер. Оценены времена жизни и относит. заселенности исследуемых пяти ПС HeH^+ . Проведено сопоставление с лит. эксперим. и теор. данными.
О. А. Басченко

X. 1980 N 8

HeH⁺

расчет
э. в. состоян.

Оттиски 6524 1978
1 Б37. Исследование молекулярного иона HeH⁺ методом конфигурационного взаимодействия. IV. Триплетные сигма-, пи- и дельта-состояния. Green T. A., Michels H. H., Browne J. C. Configuration interaction studies of the HeH⁺ molecular ion. IV. The triplet sigma, pi, and delta states. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 101—105 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия проведены расчеты триплетных электронных состояний молек. иона HeH⁺ при межъядерных расстояниях от 0,24 до 6 ат. ед. Подробности вычислительной схемы описаны в пред. сообщ. («J. Chem. Phys.», 1974, 61, 5186). Приведены результаты для девяти состояний симметрии ³Σ, шести — симметрии ³Π и трех — симметрии ³Δ. Обсуждены корреляц. диаграммы, связывающие молек. состояния с состояниями объединенного атома и изолированных атомов. Подробно проанализированы области псевдопересечений потенциальных кривых. Отмечено хорошее согласие результатов для низшего ³Σ-состояния с данными расчета Колоса. Полученные потенциальные кривые предполагается использовать для изучения низкоэнергетич. неупругих атомных столкновений H⁺—He и H—He⁺. ————— А. В. Немухин

э. 1979, 1/1

He H⁺

omnibus 6529

1978

89: 119875s Configuration interaction studies of the helium hydride (HeH⁺) molecular ion. IV. The triplet sigma, pi, and delta states. Green, T. A.; Michels, H. H.; Browne, J. C. (Sandia Lab., Albuquerque, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1978, 69(1), 101-5 (Eng). The method of superposition of configurations was applied to the triplet sigma, pi, and delta states of HeH⁺

M, N.

which correlate to the sepd. atom states of principal quantum no. ≤ 3 . The calcns. were done for internuclear sepns., $0 \leq R \leq 65.5$ a.u., on a mesh adequate for interpolation. Similar calcns. on the singlet states have already been reported. The present calcns. complete the accurate evaluation of the potential energy curves for this system which are required for low- and intermediate-energy collision studies. In addn. to the energy eigenvalues and eigenfunctions, dipole, gradient, and radial coupling matrix elements were calcd. for the sigma and pi states. Primarily, this paper presents information on the eigenvalues. The accuracy of the triplet-state calcns. is comparable to that obtained for the singlet states. The similarities and differences in the pattern of avoided crossings for the triplet and singlet states are exhibited. These are mainly detd. by the differences in the triplet and singlet energy-level schemes of the united and sepd. atoms.

C.A., 1978,
89, 114

HeH⁺

оттиск 6524

1978

12 Д147. Изучение молекулярного иона HeH⁺ методом конфигурационного взаимодействия. IV. Триплетные состояния Σ , Π и Δ . Green T. A., Michels H. N., Browne J. C. Configuratin interaction studies of the HeH⁺ molecular ion. IV. The triplet sigma, pl, and delta states. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, № 1, 101—105 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия рассчитаны потенциальные кривые триплетных электронных состояний типов Σ , Π и Δ молекулярного иона HeH⁺, коррелирующих на диссоциационном пределе с возбужденными атомными состояниями He (nL), H (nL), где $n \leq 3$. Расчеты проведены для межъядерных расстояний $0,0 \div 65,5$ ат. ед.. Ч. III. Green T. A., Michels H. N., Browne J. C. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, 3951. А. Дементьев

расчет
потенц.
кривых

Ф.1978, 11/2

HeH⁺

оттиски 6459

1978

11 Д174. Вращательная преддиссоциация HeH⁺.
влияние движения ядер на вращательно-колебательные
энергии и ширины. Price R. I. Rotational predissocia-
tion of HeH⁺: the effect of nuclear motion on ro-vibra-
tional energies and widths. «Chem. Phys.», 1978, 31,
№ 2, 309—317 (англ.)

Рассчитана приближенная диагональная поправка,
обязанная ядерному движению для состояния X¹Σ⁺.
HeH⁺ в выбранных точках на межъядерной оси. С ис-
пользованием метода дискретных состояний в прибли-
жении Борна — Оппенгеймера рассчитаны энергии E_{uJ}
и ширины Γ_{uJ} квазисвязанных вращательно-колебат.
состояний ⁴HeH⁺, ³HeH⁺, ⁴HeD⁺ и ³HeD⁺ в основном
электронном состоянии. Оценены также величины
 E_{uJ} и Γ_{uJ} с поправками на эффекты ядерного движе-
ния.

Резюме

вращат.
преддиссоц.

Ф. 1978 № 11

HeH⁺

Оттиски 6459

1978

22 Б97. Вращательная преддиссоциация HeH⁺. Влияние ядерного движения на положения и ширины колебательно-вращательных уровней. Price R. I. Rotational predissociation of HeH⁺. The effect of nuclear motion on ro-vibrational energies and widths. «Chem. Phys.», 1978, 31, № 2, 309—317 (англ.)

Для системы HeH⁺ в основном электронном состоянии Σ^+ проведено вычисление диагональной адиабатич. поправки при различных межъядерных расстояниях. При этом использованы известные в лит-ре потенциальные кривые и волновые функции, полученные неэмпирич. методами. По предложенной ранее схеме («Mol. Phys.» 1977, 33, 559) рассчитаны положения и ширины квазисвязанных колебательно-вращательных уровней системы HeH⁺ и ее изотопич. модификаций как в рамках приближения Борна-Оппенгеймера, так и с учетом адиабатич. поправки. Дано сопоставление с имеющимися эксперим. данными и показано, что в пределах погрешностей измерений теория согласуется с экспериментом уже в приближении Борна-Оппенгеймера.

В. И. Истомин

Вращат.
преддисс.

Q-1048, N22

HeH⁺

Оттиски 8267

1979

12 Д162. Теоретическое исследование HeH⁺. A theoretical investigation of HeH⁺. Bishop David M., Cheung Lap M. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 3, 462—473 (англ.)

Приведены результаты численного расчета кривой потенц. энергии основного состояния X¹Σ⁺ молекулы HeH⁺. Расчет проведен в приближении Борна — Оппенгеймера, поправки к потенц. кривой получены в адиабатич. приближении. На основе этих данных определены энергии низлежащих колебательно-вращательных уровней и энергия диссоциации молекулы. Точность полученных значений энергий оценивается авторами ~1 см⁻¹.

Ю. Л. Малинkevич

расчет
кривых
потенц.
энергии

ср. 1979, № 12

HeH⁺

Summary 8267

1979

91: 9732b A theoretical investigation of hydrohelium(1+). Bishop, David M.; Cheung, Lap M. (Dep. Chem., Univ. Ottawa, Ottawa, ON Can. K1N 9B4). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 75(3), 462-73 (Eng). Results are reported for the ground state ($X^1\Sigma^+$) of the HeH⁺ ion. They include an improved Born-Oppenheimer potential curve, adiabatic corrections, and rovibronic energies for the three lowest vibrational states. The dissocn. energy in the adiabatic approxn. is 14,873.6 cm⁻¹; adiabatic effects decrease the 2 lowest vibrational spacings $\Delta G(1/2)$ and $\Delta G(3/2)$ by 0.9 and 0.8 cm⁻¹, resp. The adiabatic rovibronic energies reported are thought to be accurate to within 1 cm⁻¹.

KB, WAX.
pacer

C.A. 1979, Q1N2

HeH⁺

М. И. Д. О

1 Б13. Теоретическое исследование HeH⁺. Bishop David M., Cheung Lap M. A theoretical investigation of HeH⁺. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 75, № 3, 462—473 (англ.)

Проведены улучшенные расчеты энергии основного электронного состояния ($X^1\Sigma^+$) молекулы HeH⁺ в приближении Борна-Оппенгеймера и впервые рассчитаны адиабатич. поправки к этой энергии, а также положения колебательно-вращательных уровней для трех нижних колебательных состояний. Для расчета электронной энергии в приближении Борна-Оппенгеймера использована 255-параметрич. вариационная волновая функция, приведшая ранее к хорошим результатам при расчете молекулы H₂. Адиабатич. поправки рассчитаны с более простой 45-членной функцией, поскольку на примере расчета для одного расстояния показано, что улучшение волновой функции не влияет на величины поправок. Энергия диссоциации в адиабатич. приближении получена равной 14 873,6 см⁻¹. Значения колебательно-вращательных уровней найдены с помощью численного решения уравнения Шредингера с вычисленным адиабатич. потенциалом. Показано, что учет адиабатич. поправок изменяет расстояние между нижними колебательными уровнями, $\Delta G(1/2)$ и $\Delta G(3/2)$ на 0,9 и

1979

Витман 8267

2.1030. N1

0,8 см^{-1} , соотв. Предполагается, что колебательно-
вращательные энергии найдены с точностью $\sim 1 \text{ см}^{-1}$.
Б. И. Жилинский

СК'

HeH⁺

расчет
потенциальных
кривых

Синица 8616 1979
5 Б29. Анализ натуральных спин-орбиталей волновых функций двухатомных молекул в базисе обобщенных двухатомных орбиталей. III. Модели варьирования для некоторых возбужденных состояний молекулярного иона HeH⁺. Helfrich K. Natural spin orbital analysis of diatomic molecular wave functions in terms of generalized diatomic orbitals. III. Variable screening models for some excited states of HeH⁺. «Theor. chim. acta», 1979, 52, № 3, 163—170 (англ.)

Рассчитаны потенциальные кривые некоторых возбужденных состояний молек. иона HeH⁺. Использован базис, состоящий из функций, являющихся решениями одноэлектронных двухцентровых кулоновских задач. В базисный набор включались волновые функции основного состояния иона HeH⁺⁺ и нескольких состояний иона

ВФ-Х1-6354

X-1980.N5

H_2^+ (предполагалось, что один электрон иона HeH^+ занимает двухатомную орбиталь, сходную с функцией основного состояния иона HeH^{++} , а второй электрон занимает орбиталь, к-рая может быть представлена линейной комбинацией функций возбужденных состояний иона H_2^+). Базисные функции были ортогонализированы по Граму-Шмидту и использованы для расчета энергии методом configuraц. взаимодействия (КВ) с учетом всех конфигураций. Оптимизация параметров экранирования, содержащихся в базисных функциях, осуществлялась отдельно для каждого состояния при каждом межъядерном расстоянии. На основе волновой функции метода КВ были получены натуральные спин-орбитали. Отмечено, что в каждой занятой спин-орбитали преобладает одна базисная двухатомная орбиталь.

А. Сафонов

HeH⁺

оттис 8616

1979

110. Естественный спин-орбитальный анализ
атомных и молекулярных волновых функций в терми-
нальных двухатомных орбиталях. III. Модел
с переменным экранированием для некоторых возбуж-
денных состояний. Natural spin orbital analysis of dia-
tomic molecular wave functions in terms of generalized
atomic orbitals. III. Variable screening models for some
excited states of HeH⁺. Helfrich Klaus. «Theor.
chim. acta», 1979, 52, № 3, 163—170 (англ.)

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом
всех конфигураций, возникающих в рамках используе-

ВФ-Х1-6354



ф. 1980. NL

мого ограниченного базиса, рассчитаны полные энергии $E_{\text{полн}}$ пяти ($2^1\Sigma^+$, $1^3\Sigma^+$, $3^1\Sigma^+$, $2^3\Sigma^+$, $1^3\Pi$) возбужденных состояний HeH^+ в широких пределах изменения межъядерных расстояний R . В качестве базисных используются ортогонализованные одноэлектронные модельные двухцентровые ф-ции, полученные методом, описанным автором ранее («Theor. chim. acta», 1971, 21, 381). С целью компенсации малости применяемого базисного набора один или два экранирующих параметра, вводимых в ф-цию, находятся вариац. методом для каждого R . Выполнен естественный спин-орбитальный анализ волн. ф-ций метода КВ. Отмечается, что, как правило, в каждой полностью занятой естественной спин-орбитали доминирует одна двухцентровая базисная ф-ция. Результаты, представленные в виде таблиц и графиков $E_{\text{полн}}(R)$, сравниваются с результатами более совершенных расчетов.

В. В. Россихин

HeH^+

(2i)

2.1980.N12

12 Б228. Наблюдение инфракрасного спектра молекулярного иона гидрида гелия $^4\text{HeH}^+$. Tolliver D. E., Kyrala G. A., Wing W. H. Observation of the infrared spectrum of the helium-hydride molecular ion $^4\text{HeH}^+$. «Phys. Rev. Lett.», 1979, 43, № 23, 1719—1722 (англ.)

Измерены в области частот от 1700 до 1900 см^{-1} пять переходов между колебательно-вращательными уровнями в основном электронном состоянии $X^1\Sigma^+$ гидрида гелия, $^4\text{HeH}^+$. Исследования выполнены в ионном пучке с использованием СО-лазера непрерывного действия. Настройку в резонанс колебательно-вращательных переходов HeH^+ с лазерными переходами осуществляли при помощи эффекта Допплера в ионном пучке. Ширина наблюдавшихся резонансов составляла от 5 до 8 МГц, а точность измеренных частот переходов — около 0,002 см^{-1} . Измеренные частоты сопоставлены с вычисленными в адиабатич. приближении. Согласно находится в пределах точности расчета, однако, наблюдается систематич. расхождение между измеренными и вычисл. частотами около 0,2 см^{-1} . Указанное расхождение связано с тем, что в расчетах не учитывались неадиабатич. и релятивистские эффекты и эффекты квантовой электродинамики. Приведены оценки вклада различных эффектов.

С. Н. Мурзин

1979

4
 HeH^+

Nov. 6/1979
CHH:107p

1979

92: 31476p Observation of the infrared spectrum of the helium-hydride molecular ion ${}^4\text{HeH}^+$. Tolliver, David E.; Kyrala, George A.; Wing, William H. (Opt. Sci. Cent., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1979, 43(23), 1719-22 (Eng). The 1st observation of the vibrational-rotational spectrum of the electronic ground state of the mol. ion ${}^4\text{HeH}^+$ was made. The Doppler-tuned ion-beam laser-spectroscopic technique was used. The frequencies of 5 transitions between 1700 and 1900 cm^{-1} were measured to $\pm 0.002 \text{ cm}^{-1}$ ($\pm 1 \text{ ppm}$). The exptl. values deviate from current theory by typically 0.2 cm^{-1} , and are 2 orders of magnitude more precise than the theor. values.

C.A. 1980, 22, N4

${}^4\text{HeH}^+$

1979

6 Д349. Наблюдение ИК-спектра гелий-гидридного молекулярного иона ${}^4\text{HeH}^+$. Observation of the infrared spectrum of the helium-hydride molecular ion ${}^4\text{HeH}^+$. Tolliver David E., Kyrala George A., Wing William H. «Phys. Rev. Lett.», 1979, 43, № 23, 1719—1722 (англ.)

и. к. скелет

2.

Получен колебательно-вращательный спектр молекулярного иона ${}^4\text{HeH}^+$ в ионном пучке. Зарегистрированы пять вращательных линий в диапазоне $1700\text{--}1900\text{ см}^{-1}$, принадлежащих полосам основного тона и 1-го обертона. Частоты линий, измеренные с точностью $0,002\text{ см}^{-1}$, отличаются от ранее рассчитанных теоретич. значений не более чем на $0,25\text{ см}^{-1}$. Библ. 18.

Р 1980 х6

HeH⁺

1980

Bishop D. M., et al.

расчёт
результат
и анализ
исправок

Adv. Quantum. Chem.

Vol. 12. New York e.a.,

1980, 1-42.

(сер. H₂⁺; III)

HeH⁺

1980

Bishop David M.
et al.

J. Chem. Phys. 1980, 72,
NG, 5125-32.

ganaccias
naispajas.

cu. H₂ - 5

1980

HeH⁺

14 Б971. Определение сродства к протону из кинетики реакций с переносом протона. VII. Сродство к протону O₂, H₂, Kr, O, N₂, Xe, CO₂, CH₄, N₂O и CO. Bohme D. K., Mackay G. I., Schiff H. I. Determination of proton affinities from the kinetics of proton transfer reactions. VII. The proton affinities of O₂, H₂, Kr, O, N₂, Xe, CO₂, CH₄, N₂O, and CO. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 4976—4986 (англ.)

сродство
к протону

Масс-спектрометрически исследована кинетика р-ций переноса протона $XH^+ + Y \rightleftharpoons YH^+ + X$ для X или Y = He, H₂, O₂, Kr, O, N₂, Xe, CO₂, CH₄, CD₄, N₂O, OH и CO и для дейтерирования O₂ при взаимодействии с D₃⁺ при комн. т-ре. Для р-ций с X/Y = H₂/O₂, O₂/Kr, H₂/Kr, H₂/N₂, O/N₂, N₂/Xe, Xe/CO₂, CO₂/CH₄, CH₄/N₂O и N₂O/CO определены константы равновесия и изменения характери-

⊗

2-1981.2/14

стик термодинамич. состояния (ΔG° , ΔH° , ΔS°). С точностью 2 ккал/моль измерено сродство к протону (СП) и теплоты образования протонированных молекул O_2 ($CH_{298} = 100,4$ ккал/моль, $\Delta H^\circ_{f,298} = 266,8$ ккал/моль), H_2 (100,7 и 266,5), Kr (101,4 и 265,8), O (116,1 и 310,6), N_2 (117,4 и 249,8), He (118,0 и 249,2), CO_2 (128,6 и 144,5), CH_4 (130,5 и 218,8), N_2O (137,0 и 249,8) и CO (141,4 и 199,4). Обсуждается корреляция между кинетич. и термодинамич. характеристиками. Эксперим. данные соответствуют экспоненциальной зависимости между эффективностью переноса протона и изменением свободной энергии.

Ч. И. Бутковская

1980

 HeH^+ HeNe^+

M.M.

① ~~2~~

✓93: 158429b The spectra of helium hydride (HeH^+) and helium-neon (HeNe^+). Dabrowski, I.; Herzberg, G. (Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can.). *Spectres Mol. Simples Lab. Astrophys., Commun. Colloq. Int. Astrophys., 21st 1977* (Pub. 1980), 341-9 (Eng). Univ. Liege, Inst. Astrophys.: Cointe-Sclessin, Belg. The rotational and vibrational energy levels of HeH^+ in the ground state were calcd. from the ab initio potential functions of L. Wolniewicz (1976) and W. Kolos and J. M. Peek (1976). The IR rotation-vibration spectrum was derived from these energy levels as well as the recombination spectrum corresponding to inverse predissocn. Attempts at observing this spectrum were not successful but it seems possible that some of the unidentified lines obsd. in planetary nebulae may be accounted for in this way. A spectrum first obsd. by M. J. Druyvesteyn (1931) in discharges in mixts. of He and Ne was studied under high resoln. and the suggestion by Y. Tanaka et al. (1973) that this spectrum is a charge exchange spectrum was

C.A. 1980, 93, N16

confirmed, i.e., it corresponds to a transition from a state formed from $\text{He}^+ + \text{Ne}$ to a state formed from $\text{He} + \text{Ne}^+$. The observation of a hyperfine spectrum in all $^3\text{HeNe}^+$ lines supplies strong support for this conclusion. The vibrational numbering in the spectrum is not obvious but was established from isotope shifts. The lowest state $^2\Sigma^+$ is fairly stable with a dissoch. energy of ~ 0.64 eV, a vibrational frequency $\omega_e \approx 1100$ and an equil. internuclear distance of $r_e \approx 1.14$ Å.

HeH⁺

Влияние
мехр.
корреляции

Х. 1981 N 1

1 Б19. Импульсные распределения для двухэлектронных систем: кулоновский сдвиг и коэффициенты корреляции для молекулярного иона HeH⁺. Reed C. E., Bannard K. E. Momentum distributions for two-electron systems: the Coulomb shift and correlation coefficients for the HeH⁺ molecular ion. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1980, 13, № 8, 1519—1530 (англ.)

Исследовано влияние электронной корреляции на импульсное распределение электронов двухэлектронного иона HeH⁺ в основном состоянии. Волновая функция с учетом корреляц. эффектов построена с помощью 30-членного одноцентрового разложения. В качестве хартри-фоковской волновой функции взята функция основной конфигурации разл. в базисе натуральных орбиталей. Найдены угловые и радиальные компоненты корреляц. вкладов в импульсное распределение, оценена зависимость корреляц. поправок от межъядерного расстояния. Показано, что образование хим. связи приводит к увеличению вероятности движения электронов в направлении, перпендикулярном межъядерной оси, тогда как учет корреляции приводит к увеличению плотности распределения импульса параллельно межъядерной оси.

Б. И. Жилинский

1980

$\text{He}_n \text{H}^+$

1980

$n = 1, 2, 3, 4$

Do

4 Д165. Теоретическое (ПСГО) исследование комплексов $\text{He}_n \text{H}^+$ ($n=1, 2, 3, 4$). Theoretical (FSGO) investigation of the $\text{He}_n \text{H}^+$ ($n=1, 2, 3, 4$) complexes. Tamássy-Lentei I., Szaniszló J. «Acta Univ. debrecen. Ser. phys. et chim.», 1980(1981), 23, № 1, 129—136 (англ.; рез. венг., рус.)

Методом самосогласованного поля в базе плавающих сферических гауссовых орбиталей (ПСГО) рассчитана энергия основного состояния комплексов $\text{He}_n \text{H}^+$, $n=1 \div 4$. Найденные энергии диссоциации комплексов согласуются с имеющимися теоретич. данными.

А. Ф. Шестаков

ф. 1982, 18, №4.

HeH⁺

1980

✓ 93: 158331p Observation of the infrared spectrum of the helium hydride molecular ion. Tolliver, David Edward (Univ. Arizona, Tucson, AZ USA). 1980. 183 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. 8017776. From *Diss. Abstr. Int. B* 1980, 41(2), 605-6.

u.k. chemip

C.A. 1980, 93, N16

Me H⁺

1980

Иванов А. Я. и др.

расчет
потенци-
алов.

Редкол. м. Изв. вузов
Физ. Томск, 1980, 10с;
библиогр. 15 назв.

См. М₂; III

HeH⁺

[omnuck 11585] 1981,

Aubert - Frecon M.
et al.

волновое
р-исл,
расчет E

J. Chem. Phys., 1981, 74
(5), 2931-35

HeH⁺

1981

9 Д104. Кулоновские дырки и корреляционные коэффициенты в координатном пространстве для HeH⁺. Coulomb holes and correlation coefficients in position space for HeH⁺. Banyard K. E., Reed C. E. «J. Phys. B.: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 3, 411—417 (англ.)

Для системы HeH⁺ получена зависимость величины «кулоновской дырки» $\Delta f(r_{12})$ от межэлектронного расстояния r_{12} при фиксированном межъядерном расстоянии 1,4 ат. ед. Рассчитаны также корреляционные коэф., характеризующие корреляцию в аксиальном и угловом направлениях при различных межъядерных расстояниях. Волн. ф-ция HeH⁺ аппроксимировалась рядом конфигурац. разложения в одноцентровом базисе АО. Полученные результаты расчетов сравнены с аналогичными результатами для He, Li, а также с результатами исследования корреляционных эффектов в HeH⁺, выполненных в импульсном пространстве. Найдено, что $\Delta f(r_{12})$ иона HeH⁺ в координатном пространстве слабо отличается от аналогичной ф-ции в атоме He. А. Д.

фрагмент
молекулы

Ф. 1981/19

HeH⁺

(Оттиск 13494)

1981

6 Д56. Наблюдение переходов между связанными и квазисвязанными колебательно-вращательными состояниями в ионе HeH⁺. Observation of bound to quasi-bound vibration-rotation transitions in the HeH⁺ ion. Carrington A., Buttenshaw J., Kennedy R. A., Softley T. P. «Mol. Phys.», 1981, 44, № 5, 1233—1237 (англ.)

Исследованы переходы между связанными и квазисвязанными колебательно-вращательными состояниями иона, HeH⁺. Наблюдались два $(v, J) = (6, 13) \rightarrow (5, 12)$ и $(7, 11) \rightarrow (5, 12)$ перехода, которые можно было осуществить с помощью CO₂ ИК-лазера и проследить за ними по кол-ву протонов, образующихся при вращательной преддиссоциации метастабильных состояний. Отмечает-

ся, что эти наблюдения являются, по-видимому, первыми в литературе.

А. А. Земсков

М.А.

Ф. 1982, 18, № 6.

HeH⁺

1981

14 Б870. Наблюдение колебательно-вращательных переходов из связанных в квазисвязанные состояния в ионе HeH⁺. Carrington A., Buttenshaw J., Kennedy R. A., Softley T. P. Observation of bound to quasibound vibration-rotation transitions in the HeH⁺ ion. «Mol. Phys.», 1981, 44, № 5, 1233—1237 (англ.)

спектр

Техника ионного пучка используется для наблюдения переходов между связанными и квазисвязанными колебательно-вращательными состояниями иона HeH⁺. Ионы, образующиеся в плазмотронном ионном источнике, в к-рый подается смесь He+H₂, вытягиваются с помощью ускоряющего Пт и анализируются с помощью магнитного анализатора. Зона взаимодействия ионного пучка HeH⁺ с пучком излучения лазера на CO₂ достигает в длину 50 см. Протоны, образующиеся в результате вращательной преддиссоциации заселенных лазером

X. 1982, 19, N14.

квазисвязанных состояний, с помощью электростатич. анализатора отделялись от перв. ионного пучка и детектировались. Измеренные характеристики линий для переходов $(\nu, I) = (7,11) \rightarrow (5,12)$ и $(6,13) \rightarrow (5,12)$ сравниваются с результатами неэмпирич. расчетов.

А. И. Маергойз

He H⁺

1981

Caene A., et al.

Ukr. Fiz. Zh. (Russ. Ed.)
1981, 26 (4), 576-579.

Кв. экв.
расчет

сер. вод.



(сер. H₂; III).

HeH⁺

1981

15 Б75. Магнитные свойства HeH⁺. Bishop David M., Cheung Lap M. Magnetic properties of HeH⁺. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 3, 1817—1820 (англ.)

Рассчитаны компоненты диа- и парамагнитной восприимчивости, а также зависящий от Ig -фактор g , для иона HeH⁺. В использованном методе расчета, основанном на втором порядке теории возмущений, электронная корреляция учитывалась путем явного вклю-

М.Н.

Х. 1981. № 15

жения межэлектронной координаты в электронную часть волновой функции. Полная невозмущенная ф-ция записывалась в виде линейной комбинации 33 произведений электронных и колебательных ф-ций с коэф., определяемыми вариац. методом. Вычисл. значения полных изотропных и анизотропных магнитных восприимчивостей, усредненных по вращательным уровням, составили $-1,721 \times 10^{-6}$ и $0,2541 \times 10^{-6}$ эрг/Гс²·моль соотв. Отмечено, что с целью оценки точности полученных величин (эксперим. значения для HeH⁺ неизвестны) проведены аналогичные расчеты магнитных восприимчивостей и фактора g_I для молекул H₂, HD и D₂. Полученные значения парамагнитной восприимчивости, анизотропной восприимчивости и вращательной постоянной g_I согласуются с эксперим. значениями в пределах 0,1%, значения средн. изотропных восприимчивостей — в пределах 1%.

И. А. Тополь

HeH⁺

1981

Gemmell D. S.

Nucl. Instrum. and
Meth., 1981, 191, N1-3,
425 - 431.

гомеоп.,
сиринк.

●
(сер. H₂⁺; III)

HeH⁺

1981

Gemmell D. S.

номер,
структура

IEEE Trans. Nucl.
Sci., 1981, 28, N2,

1168-1173.

● (ссылка на H₂⁺ и III)

He H⁺

1981
Kanter Elliot P.

IEEE Trans. Nucl.

Sci., 1981, 28, N2, 1162-

-1167.

модель.

пузырь

(обзор).

(см. H₂⁺; III)

$^4\text{HeH}^+$

1981

Wing W. M.

Vi. IEEE Trans. Nucl. Sci.,
1981, 28, N2, 1178-1181.

(see $\bullet$ MD^+ ; III)

HeH⁺

Оттиск 13579

1982

8 Д492. Обнаружение основной полосы ИК-поглощения HeH⁺. Detection of the infrared fundamental band of HeH⁺. Bernath P., Amano T. «Phys. Rev. Lett.», 1982, 48, № 1, 20—22 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения молекулярного иона HeH⁺, образованного при разряде в газовой смеси гелия с водородом (100 : 1) при давл. 0,45 мм рт. ст. и т-ре жидкого азота. Разряд происходил в многоходовой кювете, длина оптич. пути составляла 32 м. Возбуждающее излучение генерировалось на разностной частоте при смешении излучения лазера на красителе с излучением аргонового лазера. Приведены частоты колебательно-вращательных линий основного тона, определенные с точностью $\sim 10^{-3}$ см⁻¹, для линий от P(4) до R(4). С привлечением литературных данных найдены молекулярные постоянные B, D и H в основном и первом возбужденном состояниях, а также колебательная частота $\nu = 2911,297$ см⁻¹. Библ. 14. М. В. Т.

Vi, M. A.

Ф. 1982, 18, №8.

Оттиск 14555

HeH⁺

Ommuck 13579

1982

(u.n.)

96: 60232u Detection of the infrared fundamental band of hydrohelium (HeH⁺). Bernath, P.; Amano, T. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Phys. Rev. Lett.* 1982, 48(1), 20-2 (Eng). Nine vibration-rotation transitions of the fundamental band of HeH⁺ were obsd. in absorption by using a tunable, IR, difference-frequency laser source. The mol. consts. for the $V = 0$ and $V = 1$ levels of the $X^1\Sigma^+$ state were detd. and they agree very well with those derived from the ab initio calcn. of D. M. Bishop and L. M. Cheung (1979).

14555

Ommuck

C.A. 1982, 96, N8

HeH⁺

1982

Borisov Yu. A.

теорет.
расчет
энергии

Chem. Phys. Lett.,
1982, 93, N2, 197 -
-200.

●
(ср. H⁻; III)

HeH⁺

1982

12 Д149. Расчет связанных и квазисвязанных энергетических уровней молекулярных мюонных ионов $\text{He}\mu^+$ и $\text{Ne}\mu^+$. Calculs des niveaux d'énergie liés et quasi-liés des ions moléculaires muoniques $\text{He}\mu^+$ et $\text{Ne}\mu^+$. Fournier P. G., Lassier-Govers B. «J. Phys. Lett.» (France), 1982, 43, № 13, 483—491 (фр.; рез. англ.)

Неэмпирические кривые потенц. энергии основных электронных состояний ионов HeH^+ и NeH^+ использованы для расчетов связанных и резонансных колебательно-вращательных состояний мюонных комплексов $\text{He}\mu^+$ и $\text{Ne}\mu^+$. Уровни энергии и ширины резонансов определены путем численного решения одномерного (радиального) уравнения Шрёдингера с эффективным потенциалом, зависящим от вращательного квантового числа. Для оценки точности метода рассчитаны также

кривые
потенц.
энергии

(+3)

1) HeH^+ (крив. потенц. энергии)

фр. 1982, 18, N 12

HeH⁺

1982

Лебедев В.С., Марченко
В.С.

Излучающ. Переходы,
расшир. 1982, №2,
1589-1602.

(сер. HD⁺; III)

He H⁺

1982
Pačdarova I., Vojtík J.,
Polák R.

расчёт
волн. ф-
структ.

Chem. Phys., 1982, 72,
N1-2, 119-129.

(см. HeH; III)

HeH⁺

1982

9 Г132. Образование и разрушение ионов HeH^+ в астрофизической плазме. The formation and destruction of HeH^+ in astrophysical plasmas. Roberge W., Dalgarno A. «Astrophys. J.», 1982, 255, № 2, Part 1, 489—496 : (англ.)

Обсуждаются механизмы образования и разрушения молекулярных ионов HeH^+ в различных астрофизич. областях. Проведены вычисления стационарного обилия этих ионов в планетарных газовых туманностях и в плотных облаках молекулярного газа, находящихся под воздействием ионизирующих рентгеновского и УФ-излучений. Рассмотрены основные механизмы образования HeH^+ : радиационная ассоциация, разные типы ионизации и ион-молекулярные реакции. Основные механизмы разрушения — фотодиссоциация, радиационная рекомбинация и ион-молекулярные реакции с H .

Ф. 1982, 18, № 9.

и H_2 . Рассмотрены также процессы возбуждения HeH^+ и вычислены интенсивности излучательных линий на 149,13; 3,364 и 3,607 мкм. Излучение на 149,13 мкм от областей HII и на 3,364 мкм от плотных планетарных туманностей можно обнаружить. Б. И. Меерсон

Heit⁺

[Om. 17656]

1983

Amaro T.,

Лазер
спектроск.
(обзор)

Bull. Soc. Chim. belg.,
1983, 92, N 6-7, 565-577.

HeH⁺

1983

Carrington Alan,
Kennedy R. A., et al.

UK exekmp

Bull. Magn. Reson.
1983, 5 (3-4), 124-5.

●
(cu. HA⁺; III)

HeH⁺

М. 17930

1983

4 Л159. Колебательно-вращательный спектр HeH⁺ и его изотопов в связанном и квазисвязанном состояниях. Infrared bound to quasibound vibration-rotation spectrum of HeH⁺ and its isotopes. Carrington Alan, Kennedy Richard A., Softley Timothy P., Fournier Paul G., Richard Elisabeth G. «Chem. Phys.», 1983, 81, № 3, 251—261 (англ.)

Изучены колебательно-вращательные спектры ионов ⁴HeH⁺, ³HeH⁺, ⁴HeD⁺ и ³HeD⁺ в области 880—1090 см⁻¹. Для регистрации использован масс-спектрометр со свободным от поля промежутком, в котором ионы взаимодействовали с излучением лазера CO₂. Зарегистрирован также спектр кинетич. энергии продуктов распада. Спектры ионов рассчитаны теоретически, после чего выбраны переходы между связанными или квазисвязанными за счет преддиссоциации вращением состояниями, частоты которых совпадают с частотами генерации лазеров ¹²CO₂ и ¹³CO₂. Измеренные частоты хорошо совпадают с рассчитанными ab initio. Рассмотрено уширение линий за счет преддиссоциации. Библиограф. 29.

М. В. Т.

Vi;
ср. 1984, 18, 4

HeH⁺

Om. 17930

1983

99: 221467d Infrared bound to quasibound vibration-rotation spectrum of hydrohelium ion (HeH⁺) and its isotopes. Carrington, Alan; Kennedy, Richard A.; Softley, Timothy P.; Fournier, Paul G.; Richard, Elisabeth G. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton/Hampshire, UK S09 5NH). *Chem. Phys.* 1983, 81(3), 251-61 (Eng). The positions and widths of all the bound and rotationally quasibound levels of the ground states of ⁴HeH⁺, ⁴HeD⁺, ³HeH⁺ and ³HeD⁺ were calcd. using an adiabatic potential. From these theor. data, the positions of bound to quasibound vibration-rotation transitions lying in the range of the CO₂ laser (880-1090 cm⁻¹) were predicted. IR predissocn. spectroscopy of Doppler-tuned ion beams was used to det. the positions and widths of many of the resonances. There is excellent agreement between the theor. predictions and the exptl. measurements.

Konrad. Gauss.
CNCMP

c. A. 1983, 99, N26

HeH⁺

От. 17930 1983

6 Б1066. Инфракрасный колебательно-вращательный спектр переходов между связанными и квазисвязанными состояниями HeH⁺ и его изотопов. Infrared bound to quasibound vibration-rotation spectrum of HeH⁺ and its isotopes. Carrington Alan, Kennedy Richard A., Softley Timothy P., Fournier Paul G., Richard Elisabeth G. «Chem. Phys.», 1983, 81, № 3, 251—261 (англ.)

спектр

При использовании неэмпирич. адиабатич. потенциала рассчитаны положения и ширины всех связанных и вращательно-квазисвязанных уровней для основных электронных состояний молек. ионов ⁴HeH⁺, ⁴HeD⁺, ³HeH⁺ и ³HeD⁺. На основании этих данных предсказаны положения колебательно-вращательных переходов в области излучения CO₂-лазера (880—1090 см⁻¹). Проведено эксперим. исследование спектров молек. ионов в пучках с помощью методики, описанной одним из авторов ранее («Mol. Phys.», 1981, 44, 267). Получено полное согласие эксперим. данных с теор. предсказаниями.

Б. И. Жилинский

х. 1984, 19, № 6

HeH⁺

1983

Carrington A., Kennedy
R. A., et al.

crekmp Bull. Soc. chim. belg., 1983,
92, N6-7: 16th Int. Symp.
Free Radicals, Laaxelle -
Ottignies, Sept. 12-16, 1983,
601-602. (Cr. ND⁺; III)

HeH⁺

1983

Ellison Frank O.

раб. н.

с. 12.

J. Chem. Phys., 1983,

79, N 5, 2278-2283.

(с. 12 ; III)

HeH⁺

1983

3 Б1022. Автоионизационные состояния простейших квазимолекул. Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилс Э. С. «Ж. техн. физ.», 1983, 53, № 8, 1456—1465

Диагонализационным методом рассчитаны ширины двух нижних автоионизац. адиабатич. $^1\Sigma^+$ -термов квазимолекулы HeH⁺, состоящей из двух электронов в поле двух кулоновских центров. Результаты расчетов сопоставлены с аналогичными данными для квазимолекул HeBe⁴⁺, He₂²⁺, H₂. Показано, что частоты распада автоионизац. состояний с уменьшением межъядерного расстояния проходят через максимум, величина которого может существенно превышать 10^{15} с^{-1} , что на порядок превосходит соответствующие величины в объединенном атоме.

Резюме.

расчет &

X. 1984, 19, N 3

HeH⁺

1983

1 Л362. Автоионизационные состояния простейших квазимолекул. Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилс Э. С. «Ж. техн. физ.», 1983, 53, № 8, 1456—1465

Диагонализационным методом рассчитаны ширины двух нижних автоионизационных адиабатических $^1\Sigma^+$ -термов квазимолекулы HeH^+ , состоящей из двух электронов в поле двух кулоновских центров. Результаты расчетов сопоставляются с аналогичными данными для квазимолекул HeBe^{4+} , He_2^{2+} , H_2 . Показано, что частоты распада автоионизационных состояний с уменьшением межъядерного расстояния проходят через максимум, величина которого может существенно превышать 10^{15} с^{-1} , что на порядок превосходит соответствующие величины в объединенном атоме. Резюме

фр. 1984, 18, N1

HeH⁺

[Om. 16269]

1983

Laaksonen L., Pyykkö P.,
et al.

теорет.
расчёт

Int. J. Quant. Chem.,
1983, XXIII, 319-323.

HeH⁺

1983

1) 17 Д172. Молекулярные состояния HeH⁺. Энергии и динамическое взаимодействие. Molecular states of HeH⁺. Energies and dynamical couplings. Macías A., Riera A., Yáñez M. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1983, 27, № 1, 206—212 (англ.)

Методом полного конфигурац. взаимодействия в гауссовом базисе (5s2p) рассчитаны энергии и волн. ф-ции шести синглетных и пяти триплетных состояний иона HeH⁺ для межъядерных расстояний меняющихся от 0 до ∞. Рассчитаны также матричные элементы радиального взаимодействия между волн. ф-циями различных состояний типа $\langle N^2\Sigma | \partial/\partial R | L^1\Sigma \rangle$. Обсуждены математич. проблемы расчета матричных элементов радиального распределения в случае неортогональных од-ноэлектронных орбиталей и вопросы использования полученных результатов при изучении динамики взаимодействия He⁺ с H. А. И. Дементьев

расчет
энергий
и
волнов.
ф-ции

р. 1983, 18, № 7

HeH⁺

1983

12 Б1054. Молекулярные состояния HeH⁺. Энергии и динамические взаимодействия. Molecular states of HeH⁺. Energies and dynamical couplings. Macías A., Riera A., Yáñez M. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1983, 27, № 1, 206—212 (англ.)

С целью детального изучения нек-рых элементарных процессов в системе HeH⁺ вычислены энергии $1,3\Sigma$ -состояний и радиальные взаимодействия (РВ) между 1Σ -состояниями. Предложен новый способ расчета РВ между волновыми функциями, вычисленными с помощью различных вариационных процедур и при различных способах выбора базисного набора. Обсуждена форма кривых РВ. Особое внимание уделено поведению РВ в области малых межъядерных расстояний и влиянию способа выбора начала координат. Результаты согласуются с данными др. авторов и соответствуют стандартным корреляционным правилам.

А. А. Иогансен

Энергии
 $1,3\Sigma$ -состояний

Х. 1983, 19, N12

HeH⁺

1983

98: 95877b Molecular states of helium-hydrogen(1+)(HeH⁺).
Energies and dynamical couplings. Macias, A.; Riera, A.; Yáñez,
M. (Cent. Coord. Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain). *Phys. Rev.*
A 1983, 27(1), 206-12 (Eng). The mol. results reported in a
previous paper, (authors, 1981), are extended by addnl. energies (for
1,3Σ states) and radial couplings (between 1Σ states) of the HeH⁺
system. These results are needed to treat elastic and inelastic
charge-exchange processes when full account is taken of momentum-
transfer problems. A formalism is given to calc. radial couplings
between wave functions computed with the use of different variational
methods and basis sets. The detailed form of the radial couplings is
discussed and related to the Barat-Lichten correlation diagram. The
effect of using finite basis sets in calcg. degenerate mol. energies is
also discussed.

neopem.
pacem

och. u

bojd. coom.

C. A. 1983, 98, N12.

${}^4\text{HeH}^+$ Wing William H. 1983
Mol. Ions: Geom. and Elec-
tron. Struct. Proc. NATO Adv.
Study Inst., Isle of Kos,
Sept. 30-Oct. 10, 1980. New
York; London, 1983, 17-26.

(Cr. MA^+ ; III)

HeH⁺

[Am. 19138]

1984

Basu D., Barua A.K.,

серия
фотодис-
социации,
кривые
потери.
энергии

J. Phys. B: Atom. and Mol.
Phys., 1984, 17, N8,
1537 — 1545.

HeH⁺

1984

101: 120307f Photodissociation of helium hydride(1+) molecular ion. Basu, D.; Barua, A. K. (Indian Assoc. Cultiv. Sci., Calcutta, 700032 India). *J. Phys. B* 1984, 17(8), 1537-45 (Eng). The partial photodissocn. cross sections of the 2-electron heteronuclear and heteropolar mol. ion HeH⁺ as a function of wavelength were calcd. by using the general formulation for photodissocn. due to electronic transitions $\Lambda \rightarrow \Lambda'$. Transitions to the 3 excited electronic states $A^1\Sigma^+$, $B^1\Sigma^+$, and $C^1\Pi$ from the ground state $X^1\Sigma^+$ were studied for the vibrational levels $v = 0-5$ and for the rotational level $J = 1$ which is the most probable value of J at room temp. The gradual increase of the height of the successive max. is perturbed. The various factors affecting the magnitude of the partial photodissocn. cross sections are discussed.

($A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$
 $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$
 $C^1\Pi - X^1\Sigma^+$)

c.A. 1984, 101, N14

HeH⁺

1984

Carrington Alan.

Laser Appl. Chem. Proc.

снкрмп NATO Adv. Study Inst. Laser

(обзор)

Appl. Chem., San Miniato,
June 27 - July 11, 1982, New
York; London, 1984, 117-121.

(cur. H₃⁺; III)

HeH⁺

[Orn. 21046]

1984

Girdeman Ch. S., Saykally R. J.,

исследов.
с помощью
лазерной
спектроск.
высокого
разреш.

Ann. Rev. Phys. Chem.,
1984, 35, 387-418.



HeH⁺

1984

Хирота Т.

молекул.
структ.
(обзор)

"Kagaku, Chemistry"
(Jap.), 1984, 39, N8,
568-570.

●
(сел. H₃⁺; III)

He H⁺

1984

Motokka Matti,
Kindstedt Tore, et al.

Pacrem
Gi,
u.n.

Mol. Phys., 1984, 52,
N1, 23-32.

(ex.  Ti He²⁺; III)

HeH⁺

[0m. 19603]

1984

Johns J. W. C.,

Сирект
когортны.
Датхена

J. Mol. Spectrosc.
1984, 106, N1, 124-
133.

HeH⁺

1984

3 Д145. Нижние автоионизационные состояния ква-
зимолекулы HeH⁺. Кашиневский Л. М., Кра-
ков Б. Г., Парилс Э. С. «Теория возмущений в
атом. расчетах. Симп. по линейн. фотоиониз. сложн.
атомов, Ужгород, 1984». М., 1985, 187—203 (рез. англ.)

Работа посвящена исследованию нижних автоиониза-
ционных $^3\Sigma^+$ и $^{1,3}\Pi$ -состояний квазимолекулы HeH⁺,
расчету энергий и ширин $\Gamma = \hbar W$ этих состояний.

Резюме

нижние
автоиониза-
ционные

ср. 1986, 18, N3

HeH⁺

1984

Laaksonen Leif,
Grant Ian P.

основн.

состоян.

состоян.

Chem. Phys. Lett.,

1984, 112, N2, 157 -
- 159.

● (см. H₂; III)

HeD⁺

HeH⁺

[Om. 19243]

1984

Shy G.-T., Farley J.W.,
et al.,

let crxmp

Bull. Amer. Phys. Soc.,
1984, 29, N4, 796.

HeH⁺

1985

103: 12237r Partition functions and dissociation constants for hydrohelium(1+) ion. Gaur, V. P.; Tripathi, B. M. (Uttar Pradesh State Obs., Naini Tal, 263129 India). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1985, 33(3), 291-2 (Eng). Partition functions and dissociation constants for HeH⁺ were computed at 2,000-16,000 K.

Целла
по составу,
Lp;

с. А. 1985, 103, N 2

HeH⁺

[Om. 27414]

1985

Herzberg G.,
(edgop)

Proc. Indian. Natl. Sci.
Acad., 1985, A51, N3,
495-521.

(cile. Kopodky c omnick. Herzberg)

HeH⁺

1985

Miller A.

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1985, 18,
N 11, 2231 - 2239.

по теме
крив.,
оценки

( сев. H₂⁺; III)

HeH⁺

DM-20952

1985

13 Б1018. Исследование образования связи для первого возбужденного $^1\Sigma$ и низшего $^3\Sigma$ слабосвязанных состояний HeH⁺. An Investigation of bond formation in the weakly bound first excited $^1\Sigma$ and lowest $^3\Sigma$ states of HeH⁺. Rama Rao Ch. V., Chandra A. K. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 113, № 4, 391—394 (англ.)

Рассчитаны зависимости от межъядерного расстояния R компонент энергии молек. иона HeH⁺ в слабосвязанных состояниях: первом возбужденном типа $^1\Sigma^+$ и низшем типа $^3\Sigma^+$. Волновые функции построены в приближении конфигурац. взаимодействия с базисными орбиталями, заданными в эллиптич. координатах. Основное внимание уделено анализу функции кинетич. энергии. Показано, что поведение полной кинетич. энергии и ее компонент вдоль и перпендикулярно межъядерной оси не согласуется с предположением, что образование связи в HeH⁺ обязано эффектам поляризации 1s-орбитали H катионом He⁺. На основании этого сделан вывод, что связь в HeH⁺ образуется за счет переноса заряда с 1s-орбитали H на 2s-орбиталь He⁺.

А. В. Немухин

расчет М.Н.,

Л.;

Х. 1985, 19, N 13

HeH⁺

Ом. 20952. 1985

6 Л220. Исследование процесса образования связи в слабо связанных первом возбужденном $^1\Sigma$ и основном $^3\Sigma$ состояниях иона HeH^+ . An investigation of bond formation in the weakly bound first excited $^1\Sigma$ and lowest $^3\Sigma$ states of HeH^+ . Rama Rao Ch. V., Chandra A. K. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 113, № 4, 391—394 (англ.)

спектр

Выполнена теоретич. оценка роли электронной кинетич. энергии и ее декартовых компонент в процессе образования связи в основном ($^3\Sigma$) и первом возбужденном ($^1\Sigma$) состояниях иона HeH^+ . В расчетах использованы волн. ф-ции многоконфигурационного типа с базисом атомных орбиталей в эллиптич. координатах. Показано, что на начальных стадиях образования связи преобладающим эффектом является перенос заряда от атома Н к иону He^+ , а не поляризация орбитали Н в поле He^+ .

М. Т.

ф. 1985, 18, № 6.

HeH⁺

(Om. 20952)

1985

102: 120057v An investigation of bond formation in the weakly bound first excited 1Σ and lowest 3Σ states of hydrohelium($1+$) (HeH⁺). Rama Rao, C. V.; Chandra, A. K. (Dep. Inorg. Phys. Chem., Indian Inst. Sci., Bangalore, 560012 India). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 113(4), 391-4 (Eng). The role of the electronic kinetic energy and its Cartesian components in formation of the first excited 1Σ and the lowest 3Σ states of HeH⁺ was studied by using CI wave functions with basis orbitals in elliptic coordinates. Bond formation in these states is preceded primarily by a charge transfer from H to He⁺, rather than by polarization of the H orbital by He⁺.

meop. pacem

C. A. 1985, 102, N 14.

HeH⁺
HeH²⁺

1985

4 Д88. Использование двухцентрового базиса для расчета двухатомных молекул. Самсонов Б. Ф., Кирнос В. Н. Ред. ж. «Изв. вузов. Физ.». Томск, 1985. 33 с. Библиогр. 20 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 23 янв. 1985 г., № 635—85Деп.)

В базисе двухцентровых ф-ций предложенного вида получены соотношения для молекулярных интегралов, используемых при расчете электронных состояний двухатомных молекул. Эти соотношения проанализированы с точки зрения расчетов на ЭВМ, проведено сравнение с другими аналогичными соотношениями и расчетами. Выполнены тестовые расчеты основных состояний ионов HeH²⁺ и HeH⁺ методом прямой минимизации энергии. Проведенные исследования показали эффективность двухцентрового базиса в расчетах двухатомных молекул.

Автореферат

теор. расчет
основ. состояний

Ф. 1985, 18, № 4.

HeH⁺

1985

Wells B. H., Wilson S.

pacrim
E J. Phys. B: Atom.
and Mol. Phys., 1985,
18, N21, L731-L734.

(cor.  H₂; III)

HeH⁺

1986

Борисова Н.П.

теорет.
расчет

Теор. и эксперим.
исследования, 1986, 22,
N 1, 3-11.

●
(ссыл. H₂; III)

HeH⁺

[OM 25105]

1986

колебат.
вращат.
спектры,
эксперим.
и
теорет.
исследов.

Carrington A.,
J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1986, Pt 2,
82, N 8, 1089-1106.

HeH⁺

1986

Kirnos V. N., Samsonov B. F.,
et al.

потенц.
кривые
основн.
сост.,
расчет.

Izv. Vyssh. Uchebn.
Zaved., Fiz. 1986,
29(11), 74-9.

(сер. H₂; III)

HeH⁺

от. 25372

1986

№3 Д99. Динамика образования связи в некоторых связанных состояниях HeH⁺. Dynamics of bond-formation in some bound states of HeH⁺. Rao Ch. V. Rama, Chandra Asish K. «Proc. Indian Acad. Sci. Chem. Sci.», 1986, 96, № 3—4, 195—205 (англ.)

Проведен анализ электронных волн. ф-ций связанных электронных состояний $1,2^1\Sigma^+$ и $1^3\Sigma^+$ иона HeH⁺, вычисленных методом конфигурац. взаимодействия в базисе эллиптич. орбиталей Харриса. Исследовано распределение электронной плотности и поведение декартовых компонент кинетич. энергии электронов как ф-ций межъядерного расстояния R . Установлено, что при сближении ядер в некоторой области значений R наблюдается нарастание поперечной ($T_{\perp}$) и одновременное убывание продольной ($T_{\parallel}$) компоненты кинетич. энергии, что рассматривается как проявление интерференционных эффектов и связывается с переносом отрицат. заряда от He к H⁺ в случае состояния $1^1\Sigma^+$

(м.п.)

ср. 1987, 18, 13

и от Н к He^+ для $2^1\Sigma^+$ - и $1^3\Sigma^+$ -состояний. Классическая поляризац. составляющая энергии взаимодействия $\text{He}^+ - \text{H}$ и $\text{He} - \text{H}^+$ вносит сравнительно небольшой вклад в полную энергию взаимодействия даже при больших значениях R . Библ. 29. А. В. Зайцевский



HeH⁺

он 25372

спектр

1986
5 Б4579. Динамика образования связи в некоторых связанных состояниях HeH⁺. Dynamics of bond-formation in some bound states of HeH⁺. Rao Ch. V. Rama, Chandra Asish K. «Proc. Indian Acad. Sci. Chem. Sci.», 1986, 96, № 3—4, 195—205 (англ.)

Изучена динамика образования хим. связи в основном ($^1\Sigma$) и возбужденных ($^1\Sigma^*$, $^3\Sigma$) состояниях HeH⁺. Рассмотрены волновые ф-ции многоконфигурац. типа с базисными орбиталями в эллиптич. координатах. Исследованы изменения полной кинетич. энергии электронов и проекций на оси декартовой системы координат в зависимости от межъядерного расстояния R . Показано, что вопреки принятой точке зрения поляризация орбиталей нейтр. атома положит. ионом не играет существенной роли даже при больших значениях R . Образование хим. связи в этих состояниях обусловлено переносом заряда от нейтр. атома на положит. ион, так что хим. связь возникает вследствие интерференции, имеющей место при перетекании заряда между атомными центрами.
В. Е. Скурат

Х. 1987, 19, № 5.

HeH⁺

1987

107: 225205y Gas discharge modulation using fast electronic switches: application to hydrohassium(1+) (HeH⁺). Blom, C. E.; Moeller, K.; Filgueira, R. R. (Phys.-Chem. Inst., Justus-Liebig-Univ., D-6300 Giessen, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 140(5), 489-92 (Eng). A high-voltage modulator based on MOS-FETs was developed. It was employed for on-off modulation of gas discharges as well as for reversing the polarity of the electrodes in a d.c. discharge. New results for the vibration-rotation bands of HeH⁺, measured with tunable diode laser radiation, are presented.

KONST. GRAUS.
НОНОСК

C: A. 1987, 107, ~24

HeH⁺ 1987
Liu Di Jia, Mo Wing
Cheung, et al.

вращающ.
спектр

J. Chem. Phys. 1987,
87(5), 2442-6.

●
(сер. ArH⁺; III)

HeH⁺

1987

/ 109: 156771g Structures of charge complexes during diffusion of positive ions in inert gas matrices. Potapov, S. G.; Sukhanov, L. P. (Inst. At. Energ. im. Kurchatova, Moscow, USSR). *Fiz. Nizk. Temp. (Kiev)* 1987, 13(10), 1105-8 (Russ). It is shown theor. that the stable mol. ions RH⁺ and R₂H⁺ (R = He, Ar) with binding energy $D_e \geq 0.3$ eV are formed during diffusion of protons in low temp. inert gas matrixes. The other nearest lattice atoms are attracted to the mol. ion R₂H⁺ in the form of polarization «snowball». The formation of such mol. ions should be taken into account when describing diffusion mechanisms at sufficiently low temps., at which the classical activation mechanism proves to be suppressed.

(He)

He₂H⁺, Ar₂H⁺, Ar₂H⁺

(73) 127



C.A. 1988, 109, N 18.

HeH⁺

1987

Д11 Б1038. О структуре зарядовых комплексов при диффузии положительных ионов в матрицах инертных газов. Потапов С. Г., Суханов Л. П. «Физ. низ. температур», 1987, 13, № 10, 1105—1108

На основе расчетов потенциальных Пв методом Хартри-Фока показано, что при диффузии протона в низкот-рных матрицах инертных газов образуются стабильные молек. ионы RH^+ , R_2H^+ ($R=He, Ar$) с энергией связи $D_e \geq 0,3$ эВ. Остальные ближайшие атомы решетки притягиваются к молек. иону R_2H^+ в виде поляризац. «шубы». Образование таких молек. ионов необходимо учитывать при описании механизмов диффузии в обл. достаточно низких т-р, при к-рых классич. активац. механизм подавлен. Резюме

М.П.

(43) 19

He₂H⁺, Ar₂H⁺,
Ar₂H⁺

X. 1988, 19, N 11.

HeH⁺

(M. 26576)

1987

Sears T. J.,

Физическое
исследование
и спектр.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt 2, 83,
N1, 111-126.

HeH⁺

[OM. 29417]

1988

теорет.
расчет.
влияние
базисной
ф-ции

Urdaneta C., Largo-
Cabrerizo A., et al.

J. Chem. Phys., 1988,
88, N 3, 2091-2093.

HeH⁺

(OM. 29004)

1988

Zhu Z. H., Wang F.,
Xu Z. R.

потеря
Крив.
основн.
состоян.
теорет.
расчет.

J. Mol. Spectrosc. Theo-
chem., 1988, 164,
N1-2, ● 165-173.

${}^4\text{HeH}^+$

(Im 34150)

1989

112: 44579f Infrared spectra of hydrohelium($1+$) and deuterohelium($1+$) ions (${}^4\text{HeH}^+$, ${}^4\text{HeD}^+$, ${}^3\text{HeH}^+$, and ${}^3\text{HeD}^+$). Crofton, Mark W.; Altman, Robert S.; Haese, Nathan N.; Oka, Takeshi (Dep. Chem., Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(10), 5882-6 (Eng). Isotopic species of HeH^+ provide testing ground for studying isotopic dependence of vibration-rotation consts. because of the small masses of He and H isotopes. IR spectra were obsd. of the hot band $v = 2 \leftarrow 1$ of HeH^+ and fundamental bands of HeD^+ , and ${}^3\text{HeD}^+$, and the Dunham coeffs. T_{KL} and the isotopically independent parameters of U_{kl} , Δ_{kl}^{He} , and Δ_{kl}^{H} were obtained.

ld - cncmp

(43) ${}^4\text{HeD}^+$,

${}^3\text{HeH}^+$,

${}^3\text{HeD}^+$



C.A. 1990, 112, N6

HeH⁺

М.Н.

④ HeD⁺

X.1990, N 24

1989

24 Б1350. Инфракрасные спектры ${}^4\text{HeH}^+$, ${}^3\text{HeH}^+$ и ${}^3\text{HeD}^+$. Infrared spectra of ${}^4\text{HeH}^+$, ${}^4\text{HeD}^+$, ${}^3\text{HeH}^+$, and ${}^3\text{HeD}^+$ / Crofton Mark W., Altman Robert S., Haese Nathan N., Oka Takeshi // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 10.— С. 5882—5886.— Англ.

Измерены фрагменты вращат. структуры полос 1—0 молек. ионов ${}^4\text{HeH}^+$, ${}^3\text{HeH}^+$, ${}^3\text{HeD}^+$, ${}^4\text{HeD}^+$ и полосы 2—1 ${}^4\text{HeH}^+$. Использована лазерная система разностной частоты (смешивание излучения Аг и лазера на красителе на кристалле ниобата лития) и метод модуляции ионов по скоростям. Начала полос соотв. при 2910, 9573; 2995,0487; 2423,426; 2310,486; 2604,147 см⁻¹. Значения вращат. постоянных ${}^4\text{HeH}^+$ (в см⁻¹): $B_0 = 33,55855$, $D_0 = 1,6215 \cdot 10^{-2}$, $H_0 = 5,91 \cdot 10^{-6}$, $L_0 = -2,832 \cdot 10^{-9}$, $B_1 = 30,83985$, $D_1 = 1,5858 \cdot 10^{-2}$, $H_1 = 5,50 \cdot 10^{-6}$, $L_1 = -3,206 \cdot 10^{-9}$, $B_2 = 28,08970$, $D_2 = 1,5629 \cdot 10^{-2}$, $H_2 = 4,86 \cdot 10^{-6}$, $L^2 = -4,12 \cdot 10^{-9}$. Аналогичные данные приведены для остальных изотопомеров. Рассчитаны изотопически инвариантные коэф. Данхема U_{He} , $\Delta_{\text{He}}^{\text{He}}$, $\Delta_{\text{He}}^{\text{H}}$. Найдены параметры потенциальной ф-ции молекулы: $a_0 = 74217$ см⁻¹, $a_1 = -2,1976$, $a_2 = 3,1045$, $a_3 = -3,673$, $a_4 = 3,61$, $a_5 = -1,6$, $D_e = 16\,440$ см⁻¹.
В. М. Ковба

He-He⁺

(om. 31620)

1989

ab initio
pacem

Ichihara A, Itoh R.,

Bull. Chem. Soc. Jap.,
1989, 62, N2, 633-635

Ab Initio ● Calculation
for the Interaction Energy of He-He.

HeH⁺

Am. 31800

1989

Ze, We, De,
расчет

Потанов С.П., Сухачев Л.Н.,
Цуцев Т.Л.,

Л. фцу. химии, 1989,
63, N 4, 865-876.

HeH⁺

1989

Wells B. M., Wilson S.

аннотация,
мюонем.
рацем
J. Phys. B: At., Mol.
Opt. Phys. 1989, 22(9),
1285-95.

(cell. H₂⁺; III)

HeH⁺
HeH

1991

023 Б1198. Резонансы и связанные колебательно-вращательные уровни взаимодействующих состояний X , A , C и D молекул HeH , HeD , ^3HeH и ^3HeD . Resonances and bound rovibrational levels in the interacting X , A , C and D states of HeH , HeD , ^3HeH and ^3HeD / van Hemert Marc C., Peyerimhoff Sigrid D. // J. Chem. Phys.—1991.—94, № 6.—С. 4369—4383.—Англ.

Методом ССП и многоконфигурац. методом ССП в базисе сгруппир. гауссовых орбиталей рассчитаны потенциальные кривые состояний типа $^2\Sigma^+$: X , A , C , D , 5 и 6; типа $^2\Pi$: B , E и 3, а также состояния $1^2\Delta$ молекулы HeH и основного состояния молекулы HeH^+ . Проведено интенсивное изучение зависимости матричных элементов операторов первой и второй пр-ной по межъядерному расстоянию R и операторов L_x и L^2 от R . Методом связанных каналов рассчитаны колебательно-вращат. уровни энергии сильно взаимодействующих

М.А.

X.1991, N 23

пар состояний $X-A$ и $C-D$ молекул HeH , HeD , 3HeH и 3HeD . Отмечен сравнительно небольшой вклад масс-поляризац. вз-вия в неадиабатич. поправку к энергии во всех рассмотренных случаях. С помощью двухпараметрич. поправочных ф-ций определено большое число неадиабатич. резонансных и связанных колебательно-вращат. уровней электронных состояний A , C и D . Результаты хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными.

В. Б. Павлов-Веревкин

He II⁺

1992

(117: 120698q Improved technique for detection of gas-phase molecular ions by laser absorption spectroscopy. Farley, John W. (Dep. Phys., Univ. Nevada, Las Vegas, NV 89154 USA). *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng.* 1992, 1637 (Environ. Process Monit. Technol.), 18-24 (Eng). Mol. ions play an important and often dominant role in the gaseous media in which they occur, even when present in very small quantities. Ion densities are typically lower than densities of excited neutrals, often by orders of magnitude. Conventional laser spectroscopy must deal with the strong interfering signal from excited neutrals. One widely used technique for detecting ions is velocity-modulated spectroscopy. A gas-phase discharge is driven by an audiofrequency power supply, impressing a modulation upon the ion velocity distribution. A laser beam

(Camp)

C. A. 1992, 117, N 12

traverses the discharge and falls upon a detector, whose signal is demodulated by a lock-in amplifier. The velocity-modulation technique enhances the ion signal and suppresses the interfering signal. However, the technique is plagued by a coherent background signal, arising from elec. pick-up or fluorescence from the discharge. Variation in the background can obscure the desired signal. This paper describes an improvement in the velocity-modulated technique that suppresses the background. A double-modulation technique is used, in which low-frequency amplitude modulation of the laser beam is combined with conventional velocity-modulation spectroscopy. Two lock-in amplifiers are used in series. This suppresses the background by several orders of magnitude. The P(1) line of the fundamental band of HeH^+ is shown as an example.

Нел⁺

1992

9 Б1019. Приближение вращающейся волны для многофотонных возбуждений в ИК-области, учитывающее диагональные матричные элементы дипольного момента и их важную роль. The rotating wave approximation, including the incorporation and importance of diagonal dipole moment matrix elements, for infrared multiphoton excitations /Nakai Sachiko, Meath William J. //J. Chem. Phys. — 1992. — 96, № 7. — С. 4991 — 5008. — Англ.

Развит формализм для описания многофотонных переходов в многоуровневых системах под действием непрерывного лазерного ИК-излучения в рамках обобщенного приближения вращающейся волны (ОПВВ), учитывающий наличие ненулевых диагональных матричных элементов оператора дипольного момента. Методом Флоке и в ОПВВ рассчитаны резонансные профили поглощения и временная эволюция молек. состояний под действием лазерного излучения для двух восьмиуровневых модельных систем, описывающих слабо ангармонич.

М.П.

①

Х. 1993, № 9 Нел

молекулу HCl и сильно аангармонич. молекулу HeH^+ в широком диапазоне частот и интенсивностей лазерного излучения. Результаты расчетов использованы для обсуждения точности ОПВВ и необходимости учета диагональных матричных элементов оператора дипольного момента при описании трех различных типов многофотонных переходов. Библ. 64. В. Б. Павлов-Вереvкин

HeH⁺

1992

751183. Диодные лазерные спектры и кривая потенциальной энергии молекулярного иона HeH⁺. Diode Laser Spectra and Potential Energy Curve for the Molecular Ion HeH /Purder J., Civiš S., Blom C. E., van Hemert M. C. //J. Mol. Spectrosc. .—1992 .—153 ,№ 1—2 .—С. 701—709 .—Англ.

Численным интегрированием уравнения Шредингера с потенциалом, взятым из лит. данных, рассчитаны ровибронные уровни энергии HeH⁺. После введения ряда поправок в потенциал, сделанных на основе эксперим. данных о 1—0- и 2—1-полосах, предсказаны значения ровибронных уровней для $0 \leq J \leq 15$ и $0 \leq v \leq 4$ для HeH⁺ и HeD⁺. Для подтверждения рассчитанных величин полосы 3—2 HeH⁺ и 2—1, 3—2 и 4—3 HeD⁺ получены экспериментально с помощью перестраиваемого диодного лазера. Расхождения между эксперим. и расчетными значениями составили менее 0,1 см⁻¹. На основе имеющихся данных определены вращат. постоянные для отдельных колебат. уровней обоих изотопов.

Е. А. Пазюк

спектр,
кривая
потенциальной
энергии

X.1994, №7

HeH⁺

1992

, 117: 57836r Diode laser spectra and potential energy curve for the molecular ion helium hydride (HeH⁺). Purder, J.; Civis, S.; Blom, C. E.; Van Hemert, M. C. (Phys.-Chem. Inst., Justus Liebig Univ., W-6300 Giessen, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 153(1-2), 701-9 (Eng). Rovibrational levels of HeH⁺ were calcd. by numerical integration of the Schroedinger equation with a potential taken from the literature. After corrections were applied to the potential by using exptl. data of the $\nu = 1 \leftarrow 1$ and $\nu = 2 \leftarrow 1$ bands of HeH⁺, rovibrational levels with $0 \leq J \leq 15$ and $0 \leq \nu \leq 4$ for HeH⁺ and HeD⁺ were predicted. The $\nu = 3 \leftarrow 2$ band of HeH⁺ and the $\nu = 2 \leftarrow 1$, $\nu = 3 \leftarrow 2$, and $\nu = 4 \leftarrow 3$ bands of HeD⁺ were obsd. with a tunable diode laser system. The mean difference between exptl. measurements and theor. predictions is $< 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Mol. consts. for both isotopic species were detd. by a fit to all available data.

конд. франс.
гробле Хемму

C.A. 1992, 117, N6

He H⁺

1993

Fischer P., De Windt
Laerrent, et al.

et. n. J. Chem. Phys. 1993,
99, N10. C. 7888-7898.

(cer. ● H₂ ; III)

HeH⁺

1997

127: 182544b Infrared laser absorption spectroscopy of rotational and vibration rotational transitions of HeH⁺ up to the dissociation threshold. Liu, Zhuan; Davies, Paul B. (Department Chemistry, University Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(2), 337-341 (Eng), American Institute of Physics. Many high J pure rotational transitions of ⁴HeH⁺ up to the dissociation threshold were measured by IR diode laser absorption spectra at 590-920 cm⁻¹ in an air cooled H₂/He discharge. Addnl. centrifugal distortion terms up to J¹² were included in the rotational Hamiltonian to fit these transitions. Ten new vibration rotational transitions also were detected in the same spectral region, arising from both low (v = 1,2) and high (v = 4-7) vibrational states. Some of the transitions involving high v (v = 6,7) are obsd. as stimulated emission signals. The measured rotational transitions are in excellent agreement with ab initio calcns. based on the form of the adiabatic potential model developed by A. Carrington et al. (1983).

UK J. Chem. Phys.

C. A. 1997, 127, N 13

HeH⁺

1997

rec'd no paper
chemp, UK

127: 363619a Measurement of the Pure Rotational Quasibound Spectrum of HeH⁺ in a Laboratory Plasma by Direct Laser Absorption. Liu, Zhuan; Davies, Paul B. (Department of Chemistry, University of Cambridge, Lensfield Road, Cambridge, UK CB2 1EW). *Phys. Rev. Lett.* 1997, 79(15), 2779-2782 (Eng), American Physical Society. The pure rotational quasibound spectrum of HeH⁺ X¹Σ⁺ was obsd. in the mid IR region using diode laser velocity modulation absorption spectroscopy. Four quasibound to quasibound (Q-Q) and 3 bound to quasibound (B-Q) transitions in the v = 0, 1, and 2 states of the ion were detected in a low pressure a.c. glow discharge. The highest quasibound level involved in the spectrum (v = 0, J = 26) is 2000 cm⁻¹ above the dissociation limit. The measured transition frequencies are in very good agreement with ab initio calculations. Two of the Q-Q transitions have wider linewidths due to lifetime broadening.

C. A. 1997, 127, N26

HeH⁺, HeD⁺

1997

126: 298915g Observation of the rotational spectra of ⁴HeH⁺, ⁴HeD⁺, ³HeH⁺, and ³HeD⁺. Matsushima, Fusakazu; Oka, Takeshi; Takagi, Kojiro (Dep. Phys., Toyama Univ., Toyama, Japan 930). *Phys. Rev. Lett.* 1997, 78(9), 1664-1666 (Eng), American Physical Society: Low J rotational transitions of ⁴HeH⁺, ⁴HeD⁺, ³HeH⁺, and ³HeD⁺ were obsd. in the 2-5 THz region with a high-precision far-IR spectrometer. Dunham coeffs. Y_k and isotopically independent parameters U_k, Δ_k^H, and Δ_k^H were detd. In particular, Δ parameters with k = 0 and l = 1, 2 were detd. with unprecedented accuracy, and provide important information for breakdown of the Born-Oppenheimer approxn. The lowest J = 1 - 0 transition of ⁴HeH⁺ obsd. at 2010.1839(2) GHz will be an important future probe for detecting this species in space.

Gaussian-
champ

C. A. 1997, 126, N 22

F: HeH⁺

P: 3

2000

133:34663 Experimental determination for 4HeH⁺
internuclear separation.

Miao, Jing-wei; Shi,
Mian-gong; Yang, Bai-fang; Tang, A-you; Cue, N.

Institute of Nuclear Science and Technology,
Sichuan University Chengdu 610064, Peop. Rep.
China Wuli Xuebao, 49(6), 1058-1063 (Chinese)

2000 The internuclear sepn. of 4HeH⁺, generated by
an rf ion source, was detd. to be 0.094 $\pm$ 0.003

nm. The internuclear sepn. of 4HeH⁺ is different that
of H₂⁺ and H₃⁺, and dependent on the ion source. By
means of the me and condition of 4HeH⁺ formation, the
difference of internuclear sepn. fo produced in the rf
and the deuplasmatron ion source is discussed.