

He He +



1968

He H₂

++

711528 Potential energy surfaces for linear HeH₂⁺⁺. Zetik,
Donald F. (Univ. of Texas, Austin, Tex.). 1968, 124 pp. (Eng).
Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 68-16,165.
From *Diss. Abstr. B* 1968, 29(6), 2012. SNDC

поверх.
поверх.

C.A. 1969. 70. 16

11969

paper 2e, D, 2i (BeH_2^+ , LiHeH^+ , He_3^+ ,
 LiH_3^+ , LiH_2^+ , HeH_3^+ , H_2H^+ ,
 H_5^+ , HeH_2^+ , H_3^+)

IX 2252

Poshusta R.D., Haugen J.A., Zetser D.F.,

J. Chem. Phys., 1969, 51, no 8, 2343-2357 (aug).

Ab initio predictions for very small
 ions. (Ccl. BeH_2^+) III

Pu Gray, 1970, 4D.116

W 48 12

HeHeH⁺

XI-161

1970

HeHeH⁺

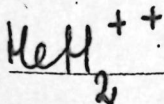
M4941z Hydrogen bonding of H₂⁺ to the helium atom: energy surface for linear HeH₂⁺. Edmiston, C.; Doolittle, J.; Murphy, K.; Tang, K. C.; Willson, W. (Dep. of Chem., Univ. of Wyoming, Laramie, Wyo.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(7), 3419-24 (Eng). By using pseudonatural orbitals as a basis for the superposition of configurations (SOC), the authors have calcd. the adiabatic potential energy surfaces of linear HeHH⁺ and HHeH⁺. Except for the different basis set of Gaussian functions used, these calcns. were carried out identically to one reported earlier for linear H₃. HeHH⁺ has a potential energy min. about 5 kcal deep for $R_{\text{HeH}} \cong 2.0$ at. units, and $R_{\text{HH}} \cong 2.0$ at. units. This "H bonding" effect is given by the Hartree-Fock results and is little changed by SOC. HHeH⁺ has a high potential energy barrier of about 25 kcal for the symmetric complex, $R_{\text{HHe}} = R_{\text{HeH}} \cong 2.1$ at. units. RCJQ

поверх. волны
мерца;

до
сп-ра
ув. мех.

расчет

C. A. 1970. 72. 22



1970

нобелле.
нобелле.
неприм

7354j Ab initio potential surfaces of HeH_2^{++} . Zetik, Donald F.; Poshusta, R. D. (Dep. of Chem., Univ. of Texas, Austin, Tex.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(9), 4920-1 (Eng). Potential energy contours were obtained for the reactions (1) $\text{H}^+ + \text{HeH}^+ \rightleftharpoons \text{HHe}^+ + \text{H}^+$, and (2) $\text{He}^+ + \text{H}_2^+ \rightleftharpoons \text{HeH}^+ + \text{H}^+$, using ab initio calcs. The activation energies for these reactions are 6.5 and 4.1 eV, resp. The computed curve of HeH^+ , when compared with the exact curve shows a gradual decrease in error from 0.074 at. units at $R = \infty$ to 0.050 at. units at $R = 0$. The computed H_2^+ curve differs from the exact curve by 0.020 at. units from $R = \infty$ to $R = 1.0$, where the error begins to increase to 0.057 at. units at $R = 0$. BGJN

C.A. 1970.13.2

19

11

H_2He^+

1980

Ср-па

кв.-иex
парем

(123735h) Theoretical study of binding energy in the H_2He^+ system. Cirule, Z.; Posiunaite, N.; Bolotin, A. B. (Latv. Gos. Univ. im. Stucki, Riga, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1970, 11(4), 722-6 (Russ). The wave-mech. calens. lead to the conclusion that both linear and trigonal structures of the H_2He^+ ion are possible. The stability of the linear structure was more pronounced according to the calens.

Zdenek Jerman

C. A. 1980. 73.24

HeH₂²⁺

1970

9 Д146. Потенциальные поверхности для HeH₂²⁺, рассчитанные неэмпирическим методом. Zetik D. F., Poshusta R. D. Ab initio potential surfaces of HeH₂⁺⁺. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 9, 4920—4921 (англ.)

расчет
потенц.
поверх.

Проведен неэмпирич. расчет HeH₂²⁺. Волн. ф-ция была образована 16 взаимодействующими конфигурациями, построенными из 7 гауссовских орбиталей, 3 из которых центрированы на ядре He, а 4 плавающих орбитали центрированы вблизи 2 водородных ядер. Орбитальные экспоненты масштабировались и частично оптимизировались для каждой ядерной конфигурации. Приведены и кратко обсуждены поверхности потенц. энергии для реакций $H^+ + HeH^+ \rightleftharpoons HHe^+ + H^+$ и $He^+ + H_2^+ \rightleftharpoons HeH^+ + H^+$. Энергии активации оценены в 6,5 и 4,1 эв соответственно. Теплота второй реакции найдена равной 9,1 эв (точное значение 9,5 эв). В. Л. Лебедев

III

Ф. 1970. 92

(+1) I



$H_2^+ He$

XI-1220

1970

3 Б86. Теоретическое исследование энергии связи в системе $H_2^+ He$. Цирул З. Я., Пошюнайте Н. П., Болотин А. Б. «Ж. структурн. химии», 1970, 11, № 4, 722—726

геометр.
конфигурац.

Исследована зависимость энергии связи в молекуле $H_2^+ He$ от расстояний и углов. Установлены две возможные геометрич. конфигурации: треугольная и линейная. Резюме

X. 1971. 3

HeH_2^+

XI-1854

1971

1 Д127. Неэмпирические расчеты энергетической поверхности для линейного иона HeH_2^+ по методу ССП МО ЛКАО. Brown Peter J., Hayes Edward F. Nonempirical LCAO—MO—SCF study of the energy surface for linear HeH_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 2, 922—926 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в сжатом гауссовом базисе получена потенц. поверхность для наиболее стабильной (по данным авторов) — линейной — формы системы HeH_2^+ . Обнаружен минимум, соответствующий комплексу HeH_2 ($R(\text{H—H}) = R(\text{He—H}) = 2$ ат. ед.). Вид потенц. поверхности позволяет объяснить результаты исследования реакции $\text{H}_2^+ + \text{He} = \text{HeH}^+ + \text{H}$, сечение которой сильно зависит от колебательного состояния иона H_2^+ . В. И. Барановский

св-мех
расчет

9, 1972, 1D

HeH₂⁺

X1-1854

1971

✓ 24 Б25. Неэмпирический расчет поверхности энергии для линейной системы HeH₂⁺ методом ЛКАО МО ССП. Brown Peter J., Hayes Edward F., Nonempirical LCAO—MO—SCF study of the energy surface for linear HeH₂⁺. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 2, 922—926 (англ.)

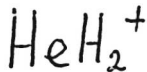
Методом ЛКАО МО с учетом самосогласования в рамках ограниченного метода открытых оболочек рассчитана поверхность потенциальной энергии линейной системы. HeH₂⁺. В кач-ве АО использовались гауссовы функции *s*- и *p*-симметрии, центрированные на ядрах He и H. Исходные линейные комбинации АО и параметры экспонент определялись из условия наилучшего приближения энергии разъединенных систем He и H₂ к соотв-щим хартрифовским значениям. Поверхность потенциальной энергии обладает минимумом в configura-

расчет
потенциальной
энергии

X. 1971. 24

ции $R_{\text{He-H}} = R_{\text{H-H}} = 2$ ат. ед. и глубиной потенциальной ямы около 3,5 ккал/моль. Подъем поверхности в эндотермич. направлении р-ции $\text{H}_2^+ + \text{He} \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$ начинается после поворота пути р-ции. Это обстоятельство объясняет сильную зависимость сечения указанной р-ции от номера колебательного уровня иона H_2^+ . Вариация волновой функции и исключение из базисного набора р-ОА показывает, что образование устойчивого комплекса обязано поляризации электронной оболочки в поле иона.

Е. Е. Никитин



1972

kb.
Mex.
jaeger

-/169040p Use of the method of diatomics-in-molecules in fitting ab initio potential surfaces. System HeH_2^+ . Kuntz, P. J. (Theor. Chem. Inst., Univ. Wisconsin, Madison, Wis.). *Chem. Phys. Lett.* 1972, 16(3), 581-3 (Eng). An illustration is presented of how a semi-empirical method can be used to represent a potential energy surface obtained from an ab initio calcn. A simple equation derived from the diatomics-in-mols. (DIM) formalism is fit to an ab initio collinear potential surface for HeH_2^+ , and the resulting potential function is used to construct a surface for non-linear geometries.

C.A. 1972. 77, N26

He H_2^+

1974

Aubert M.

Bessis N. et al.

раствор
молукс.

Phys. Rev. A: Gen. Phys. 1974,
10, N1, 51-60 (англ).

(см H_2^+ ; III)

H_2^+ , $He H_2^+$, H_3 , $He H$, He_2^+ ⁻¹⁹⁷⁴ X8513
 $Li H^+$, $(He H_2)^+$, H_4^+ (кв. мех. пакет.
γē, до)

Blust R. H., Linnet J. W.,
J. Chem. Soc. Faraday Trans.
Part 2., 1974, 70(2), 327-38

10

7

сестр. р. К

50627.2419

Ch, Ph, TC

40892

 HeH_2^+

1975

4119

Chapman Frank M., Jr., Hayes Edward F.
Resonances in the collinear inelastic
scattering of He by H_2^+ below the reaction
threshold. "J. Chem. Phys.", 1975, 62,

N 11, 4400-4403

0396 пик

(англ.)

370 374

388

ВИНИТИ

60202.6643

96201

1976

Ch, Ph, TC, IAGU

 HeH_2^+ кв. м.р.

8773

Bolotin A.B., Bugaets O.P., Zhogolev D.A.
Theoretical studies on stability of
 NeH_2^+ and HeH_2^+ ions. "Chem. Phys.
Lett.", 1976, 37, N 1, 9-12

(см. NeH_2^+ ; III)

(англ.)

526 527

5.4 4

ВИНИТИ

⁺
 H_2-He

ВФ-5066 - XI

1976

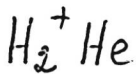
10 Д78. Неэмпирический расчет молекулы H_2^+He .
Пошюнайте Н. П., Жоголев Д. А., Зур-
ба В. Б., Болотин А. Б. «Lit. fiz. rinkinys, Lit.
fiz. sb.», 1976, 16, № 1, 79—83 (рез. лит., англ.)

Путем неэмпирич. расчета по методу ССП МО ЛКАО
в базисе линейных комбинаций безузловых гауссовых
ф-ций исследована зависимость полной энергии систе-
мы H_2^+He от расстояний между атомами и геометрич.
конфигурации с использованием различных наборов
базисных ф-ций и слэтеровских экспонент. Установлена
возможность стабильности молекулы H_2^+He , определе-
ны равновесные расстояния и геометрич. конфигурация,
а также соответствующие им энергии связи. Автореф.

Кв. мех.
расчет

Ф. 1976

№ 10



ВФР - 5066 - XI

1976

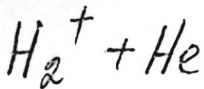
20 Б45. Неэмпирический расчет молекулы $\text{H}_2^+ \text{He}$.
Пошюнайте Н. П., Жоголев Д. А., Зурба В. Б.,
Болотин А. Б. «Liet. fiz. rinkinys, Лит. физ. сб.',
1976, 16, № 1, 79—83 (рез., лит., англ.)

Путем неэмпирич. расчета по методу ССП МО ЛКАО
в базисе линейных комбинаций безузловых гауссовых
функций исследована зависимость полной энергии си-
стемы $\text{H}_2^+ \text{He}$ от расстояний между атомами и геомет-
рич. конфигурации; использованы различные наборы ба-
зисных функций и значения слейтеровских экспонент.
Установлена возможность стабильности молекулы
 $\text{H}_2^+ \text{He}$, определены ее равновесные расстояния и гео-
метрич. конфигурация, а также соотв-щие им энергии
связи.

Автореферат

Кв. мех.
расчет

X, 1978, N 20.



45-16510

1976

86: 60758p Test of the $\text{H}_2^+ + \text{He}$ interaction potential. Comparison of the interactions of helium with H^+ , H_2^+ and H_3^+ . Viehland, L. A.; Mason, E. A.; Stevens, T. H.; Monchick, L. (Brown Univ., Providence, R. I.). *Chem. Phys. Lett.* 1976, 44(2), 360-2 (Eng). Gaseous ion mobility data are used to test theor. potentials for $\text{H}_2^+ + \text{He}$ at large sepn. distances. Agreement with ab initio calens. is good, but significant discrepancy with recent diatomics-in-mols. calens. is found. Mobility data are also used to calc. the spherically-averaged $\text{H}_3^+ + \text{He}$ potential, which is compared with $\text{H}_2^+ + \text{He}$ and an ab initio $\text{H}^+ + \text{He}$ calens.

homeras
круба-8

C.A. 1977. 86. N10

$H_2 + He$

ЖУ-18334

1977

поверхн.
потенци.
энергии

19 Б1179. Хемиионизация молекулы водорода атомами $He(2^3S)$ и $He(2^1S)$. Потенциальные поверхности, автоионизационные ширины и сечения. Cohen James S., Lane Neal F. Chemiionization of the hydrogen molecule by $He(2^3S)$ and $He(2^1S)$ atoms: potential surfaces, autoionization widths, and cross sections. «J. Chem. Phys.», 1977, 66, № 2, 586—597 (англ.)

Методом стабилизации (выбором стабилизированных собственных значений энергетич. матрицы, лежащих выше порога ионизации) рассчитаны поверхности потенциальной энергии систем $H_2 + He$ для двух состояний возбужденного гелия — 2^3S и 2^1S . Молек. функция строилась в приближении валентных схем на базе одноцентровых АО. Набор 9 учтенных состояний оказался достаточным для удовлетворительного воспроизведения поляризуемости H_2 и описания состояний отриц. иона

Х. 1947 № 19

H_2^- с возбуждением остова. Расчет проведен при фиксированном расстоянии $\text{H}-\text{H}$ и различных углах θ между молек. осью и линией столкновения. Для всех θ взаимодействие H_2-He отвечает отталкиванию за исключением больших расстояний, где проявляется вандер-ваальсово притяжение. Ширины электронных адиабатических термов рассчитаны в рамках теории возмущений, и совместно с потенциалом использованы для формулировки задачи рассеяния на комплексном потен-

циале. Оценено полное сечение ионизации и показано, что вследствие его сильной зависимости от энергии эксперименты в условиях пучков и послесвечения могут приводить к различным эффективным хемоионизациям H_2 . По мере возрастания энергии вероятность ионизации при столкновении с $\text{He}(2^1\text{S})$ растет быстрее, чем при столкновении с $\text{He}(2^3\text{S})$. Е. Е. Никитин

He-H₂

1977

10 Д270. Расчеты поверхности потенциальной энергии He-H₂ в расширенной области расстояний. Raczkowski Andrew W., Lester William A., Jr. Extension of a He-H₂ potential energy surface. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 47, № 1, 45—49 (англ.)

Расчеты ССП—КВ Тзаплине и Кутцельнига (РЖФиз, 1974, 5Д185) потенц. поверхности (ПП) He-H₂ расширены на область более близких расстояний. В расчете учитывались все однократно и двукратно возбужденные конфигурации. Обсуждается применение различных базисов в данных расчетах, на малых расстояниях применялся несколько уменьшенный базис, поскольку взаимодействие в этой области в основном определяется отталкивательным ССП термом, а корреляц. эффекты относительно малы. Получено аналитич.

расчет
поверхн.
потенциал,
исср.м

ф. 1977 № 10

выражение для ПП в координатах R — (расстояние He—H₂) r — (расстояние в H₂), γ — угол взаимной ориентации этих направлений, в форме ряда по полиномам Лежандра от $\cos \gamma$. Область применимости разложения $1,0 < r < 1,8$ ат. ед., $1,8$ ат. ед. $< R < \infty$, однако коэф. рассчитаны для более широкой области, что позволяет провести интерполяцию в область $0,5 < r < 2,5$ ат. ед., $R \geq r/2 + 1$.

Г. М. Жидомиров

HeH_2^+

1978

12 Б93. Электронная структура HeH_2^+ . Hopper Darrel G. The electronic structure of HeH_2^+ . «Int. J. Quantum Chem.», 1978, Quantum Biol. Symp. № 12, 305—322 (англ.)

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля с последующим учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны энергии основного и ряда возбужденных состояний системы HeH_2^+ в геометрич. конфигурациях симметрии C_{2v} , C_s и $C_{\infty v}$. Вычисления проведены со стандартным двухэкспонентным базисом $4s2p$, дополненным в зависимости от электронного состояния либо оптимизированными p -функциями на каждом центре, либо s - и p -функциями. Для основного состояния $X^2\Sigma^+(1^2A_1)$ приведены результаты расчетов равновесных геометрич. параметров, гармонич. силовых постоянных, частот колебаний и дипольного момента. Погрешности вычислений оцениваются в 0,01 ат. ед. для межъядерных расстояний, 0,027 эв для энергий диссо-

Электронная,
структура

2.1978, N 12

циации (на всевозможные фрагменты), 0,04 мдн/А для силовых постоянных. Детально проанализированы вклады корреляц. энергии в полную энергию основного состояния. Расчеты вертикальных энергий возбуждения проведены для состояний $2^2\Sigma^+$, $3^2\Sigma^+$, $n^2\Sigma^+$, $1^2\pi$, $1^4\Sigma^+$ и $1^4\pi$. Найдено, что возбужденные состояния в системе HeH_2^+ существенно отделены от основного. Энергия возбуждения в ближайшее состояние $2^2\Sigma^+$ составляет 12,4 эв. Отмечено, что волновые функции Σ -состояний являются валентными, а π -состояний — ридберговыми.

А. В. Немухин

врач
Чел.

HeH₂⁺

7 Д129. Электронная структура HeH₂⁺. Норрег
Darrel G. The electronic structure of HeH₂⁺. «Int. J.
Quantum Chem.», 1978, Quantum Biol. Symp. № 12,
305—322 (англ.)

1978

Электр.
структур.

Методом конфигурационного взаимодействия на ба-
зисе МО, полученных многоконфигурационным методом
ССП, рассчитана потенц. поверхность основного со-
стояния X²Σ⁺ молекулярного иона HeH₂⁺. Базис АО
включал набор сгруппированных гауссовых ф-ций
[4s2p], дополненный ф-циями типов s и p со специально
оптимизованными для данного расчета экспонентами.
Получены следующие характеристики состояния X²Σ⁺:
равновесная геометрия (R_{HH}=2,085 ат. ед., R_{HHe}=
=1,988 ат. ед.), частоты норм. колебаний (ν₁=828 см⁻¹,
ν₂=377 см⁻¹, ν₃=2211 см⁻¹), энергии диссоциации
D_e(He—H₂⁺)=0,01002 ат. ед., D_e(H—HHe⁺)=
=0,03779 ат. ед., D_e(H—H⁺—He)=0,1144 ат. ед. и ди-
польный момент (1,403 ед. Дебая). Для межъядерных
расстояний R_{HH}=R_{HHe}=2 ат. ед. рассчитаны энергии
вертикальных возбуждений. При этой геометрии первое
возбужденное состояние 2²Σ⁺ лежит на расстоянии
12,4 эв от основного состояния 3²Σ⁺, 1²Π, 1⁴Σ и 1⁴Π
расположены соответственно на 1,6; 3,8; 7,1 и 11,2 эв
выше состояния 2²Σ⁺.

пересч,
1978
N4

А. Дементьев

HeH_2^+

11 Д161. Неэмпирические дискретные электронные поверхности потенциальной энергии для дублетных основного и низших возбужденных состояний HeH_2^+ . McLaughlin Donald R., Thompson Donald L. Ground- and lower excited-state discrete ab initio electronic potential-energy surfaces for doublet HeH_2^+ . «J. Chem. Phys.», 1979, 70, № 6, 2748—2769 (англ.)

E_i ; м.п.

Представлены результаты расчетов поверхностей потенц. энергии системы HeH_2^+ (симметрия C_∞) для четырех низших состояний типа $^2A_1'$. Расчеты, охватывающие 596 точек в молекулярном конфигурац. пространстве, производились методом КВ с использованием двух гауссовых базисов: один предназначен для расчета основного состояния (главное квантовое число $n=1$), а второй дополнен диффузными ф-циями, описывающими орбитали с $n=2$. Матрица КВ включала лишь основные конфигурации, отобранные по теории возмущений, соответствующие одно-, дву- и трехкратным возбуждениям из 46 исходных базисных конфигураций. Оценены ошибки в расчете энергии как абсолютные (5 и $10 \cdot 10^{-3}$ ат. ед. для основного и возбужденных состояний соответственно), так и относительные (2—3) $\cdot 10^{-3}$ ат. ед.

В. И. Барановский

Ф. К. Г. В. Н. И.

HeH_2^+

1979
Pericorgast Phil,
et al.

J. Chem. Phys. 1979. 71,
N1, 184-28

success
analysis

coll. H2O-III

$(\text{HeHH})^+$

1979

92:47518q Approximate diatomics-in-molecules potential energy surfaces and nonadiabatic coupling for $\text{He}^+ + \text{H}_2$. Schneider, F.; Zuelicke, L. (Cent. Inst. of Phys. Chem., Ger. Acad. Sci., DDR 1199 Berlin-Adlershof, Ger. Dem. Rep.). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 67(2-3), 491-7 (Eng). The DIM method is used to generate approx. 3D potential energy hypersurfaces and nonadiabatic coupling coeffs. for the system $(\text{HeHH})^+$. In redn. of the size of the matrixes, a heuristic truncation of the basis set is proposed. The resulting potentials for the 2 lowest excited electronic states are discussed with respect to inelastic scattering and dissociative charge-transfer in collisions of $\text{He}^+ + \text{H}_2$.

nometh.
nobexH.

C.A. 1980. 92N 6



поверхн.
пот. энергии

④ □

х. 1981 и 9

9 БЗІ. Расчет многоконфигурационным методом самосогласованного поля поляризационного состояния $2^2A_1(2\Sigma^+)$ иона HeH_2^+ . Радиационный механизм получения H_2^+ при тепловых столкновениях $\text{He}^+ + \text{H}_2$. Н о р р е г D a r r e l G. An MCSCF characterization of the $\text{HeH}_2^+ 2^2A_1(2\Sigma^+)$ polarization state. A radiative mechanism for the production of H_2^+ from thermal $\text{He}^+ + \text{H}_2$ collisions. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 7, 3289—3293 (англ.)

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля (МК ССП) выполнены расчеты Пв потенциальной энергии заряженной системы $\text{He}-\text{H}_2^+$ при приближении иона $\text{He}^+(1^2S)$ к молекуле $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+)$ с симметрией всей системы C_{2v} и $C_{\infty v}$. Для анализа рассмотренного состояния $2^2A_1(2^2A_1, 2^2\Sigma^+)$ использован квадратичный метод оптимизации орбиталей с сохранением симметрии («J. Chem. Phys.», 1973, 58, 5104). Для учета дальнодействующего взаимодействия между ионом He^+ и молекулой H_2 использована трехконфигурац. ф-ция вида: $\psi = C_1\Phi_1(1\sigma^22\sigma) + C_2\Phi_2(1\sigma2\sigma^2) + C_3\Phi_3(1\sigma3\sigma^2)$, где $1\sigma \equiv 1s \text{ He}$, $2\sigma \equiv 1\sigma_g \text{ H}_2$ и $3\sigma \equiv 1\sigma_u \text{ H}_2$. Расчеты проведены в двухэкспонентном базисе, расширенном за счет поляризац. ф-ций на всех атомах. Согласно результатам расчетов на потенциальной поверхности при симметрии C_{2v} имеется неглубокий минимум, к-рому соответствуют след. значения параметров: $E_b = 0,091 \text{ эВ}$.

1980

$R_{\text{He}-\text{H}_2} = 2,345 \text{ \AA}$, $R_{\text{H}_2} = 0,714 \text{ \AA}$. Фундаментальная колебательная частота найдена равной для псевдодвухатомной системы 284 нм. С уменьшением $R_{\text{He}-\text{H}_2}$ по мере перехода в область сильного взаимодействия различия между C_{2v} - и $C_{\infty v}$ -кривыми уменьшаются. Существование такого поляризац. состояния позволило предположить для столкновительного процесса иона $\text{He}^+(1^2S)$ с молекулой $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+)$ при тепловых энергиях с образованием иона H_2^+ радиац. механизма с переносом заряда, независимо от наличия или отсут-

ствия 3-го тела М: $\text{He}^+(1^2S) + \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow \text{He}^+ - \text{H}_2(2^2A_1)$; $\text{He}^+ - \text{H}(2^2A_1) \rightarrow [\text{He} - \text{H}_2^+(1^2A_1)]^* + h\nu$ (153 нм); $[\text{He} - \text{H}_2^+(1^2A_1)]^* \rightarrow \text{He}(1^1S) + \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+, v) + \text{КЭ}$. Такому каналу с переносом заряда соответствует тепловая константа скорости, равная $7,5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^3/\text{с}$, что делает его при низких энергиях столкновений более важным, чем хорошо известный диссоциативный канал с переносом заряда. На основании расчетов построена полная корреляц. диаграмма для HeH_2^+ , показывающая особенности поверхности потенциальной энергии при тепловых столкновениях.

С. Долин

1980



4 Д66. Описание поляризационного состояния 2^2A_1 - ($^2\Sigma^+$) иона HeH_2^+ методом МК ССП. Излучательный механизм образования H_2^+ при тепловых столкновениях $\text{He}^+ + \text{H}_2$. An MCSCF characterization of the HeH_2^+ 2^2A_1 ($^2\Sigma^+$) polarization state. A radiative mechanism for

the production of H_2^+ from thermal $\text{He}^+ + \text{H}_2$ collisions. Hopper Darrel G. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 7, 3289—3293 (англ.)

Многоконфигурационным методом самосогласованного поля (МК ССП) рассчитаны потенц. кривые состояния 2^2A_1 ($2^2A'$, $2^2\Sigma^+$), соответствующие налету He^+ (1^2S) на молекулу H_2 ($X^1\Sigma^+$) по траекториям симметрии C_{2u} и $C_{\infty v}$. Волн. ф-ция МК ССП включала 3 конфигурации, а базис АО представлял набор гауссовых ф-ций ($4s2p$). Установлено, что состояние 2^2A_1 ион-молекулярного комплекса $\text{He}^+ - \text{H}_2$ имеет минимум глубиной 0,091 эв, который характеризуется расстояниями $R(\text{He}^+ - \text{H}_2) = 2,345 \text{ \AA}$ и $R(\text{H}_2) = 0,714 \text{ \AA}$. Частота норм.

рассет
потенц,
кривых

Ф. 1981 № 4

колебания комплекса по связи $\text{He}^+ - \text{H}_2$ составляет 284 см^{-1} . При увеличении расстояния $R(\text{He}^+ - \text{H}_2)$ разница между энергиями состояний $2^2A_1(C_{2v})$ и $2^2\Sigma^+(C_{\infty v})$ уменьшается. Полученное в результате расчетов доказательство стабильности состояния 2^2A_1 комплекса $\text{He}^+ - \text{H}_2$ подтверждает излучательный механизм образования H_2^+ при столкновениях He^+ с H_2 , а также указывает на важную роль этого состояния в колебательной дезактивации молекул водорода ионами гелия.

А. Дементьев

HeH₂⁺

6 Д67. Гиперповерхность потенциальной энергии
ридбергова состояния $1^2\Pi(1^2B_1, 1^2A'')$ системы HeH₂⁺.
Potential energy hypersurface for the $1^2\Pi(1^2B_1, 1^2A'')$.
Rydberg state of the HeH₂⁺ system. Hopper Dargel G. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 9, 4528—4535
(англ.)

Многоконфигурационным методом ССП (МК ССП) проведен расчет поверхности потенц. энергии ридбергова возбужденного электронного состояния $1^2\Pi(1^2B_1, 1^2A'')$ системы HeH₂⁺. Базис АО включал наборы (4s2p) сгруппированных гауссовых ф-ций на каждом центре, дополненные поляризационными ф-циями. В МК ССП включались все возможные собственные по спину конфигурации в заданном пространстве активных МО. В результате расчетов построены контурные карты потенц. поверхности состояния 1^2B_1 , показывающие, что данное состояние иона HeH₂⁺ адиабатически диссоциирует на He (X^1S) + H₂($C^2\Pi_u$); H⁺ + HeH($1^2\Pi$) и He(X^1S) + H(1^2P) + H⁺. Состояние $1^2\Pi$ связано по отношению к изменению координаты R_{He}. Полученные характеристики поверхности потенц. энергии состояния $1^2\Pi$ иона HeH₂⁺ предполагается использовать для интерпретации механизма процесса столкновения He⁺ с H₂.

А. И. Дементьев

потенц.
энергия
Ридберг.
состояния

Ф.1981.16

HeH₂⁺

М.П.

поверхн.

2.1981.11

11 В25. Гиперповерхность потенциальной энергии для ридбергова состояния $1^2\Pi(1^2B_1, 1^2A'')$ системы HeH_2^+ .
 Hopper Darrel G. Potential energy hypersurface for the $1^2\Pi(1^2B, 1^2A'')$ Rydberg state of the HeH_2^+ system. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 9, 4528—4535 (англ.)
 Проведены неэмпирич. расчеты поверхности потенциальной энергии состояния симметрии $1^2\Pi(1^2B_1$ и $1^2A'')$ для нелинейных геометрич. конфигураций молек. иона HeH_2^+ . Использован общепринятый двухэкспонентный базис сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненный диффузными p -орбиталями. Расчеты выполнены в многоконфигурац. приближении самосогласованного поля (20 конфигураций) с послед. учетом конфигурац. взаимодействия (60 конфигураций). Результаты расчетов различных двухатомных составляющих свидетельствуют о высокой точности приближения. Построены сечения трехатомной потенциальной поверхности. Обсуждены особенности электронного строения данного ридбергова состояния. Из результатов расчетов следует, что взаимодействие $\text{He}(X^1S)$ с $\text{H}_2^+(C^2\Pi_u)$ характеризуется притяжением, а взаимодействие $\text{HeH}(1^2\Pi)$ с H^+ является отталкивательным.

А. В. Немухин



Summer 10945 1980

kb. acc.
jaccg

94: 20776b Potential energy hypersurface for the $1^2\Pi(1^2=B_1, 1^2A'')$ Rydberg state of the helium hydride (HeH_2^+) system. Hopper, Darrel G. (Theor. Chem. Group, JAYCOR, Dayton, OH 45431 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(9), 4528-35 (Eng). The $1^2\pi(1^2B_{1g}, 1^2A'')$ state of HeH_2^+ was examd. with ab initio electronic structure calens. The potential energy hypersurface for this Rydberg state was surveyed with an MCSCF/CI wavefunction involving orbital expansions in a double-zeta plus double polarization plus diffuse one-electron basis. The surface is essentially a trough falling monotonically from the atom-diat. asymptote $\text{He}(X^1S) + \text{H}_2^+(C^2\pi_u)$, through the triat. region, to the asymptote $\text{HeH}(1^2\pi) + \text{H}^+$. At some triat. geometries the $1^2\pi$ state is one of the lowest excited electronic states of this mol. ion system. The results obtained here are the first reported explicit treatment of HeH_2^+ Rydberg states and contribute towards the elucidation of the manifolds of the lowest 2 Rydberg series arising from the $(\text{HeH}, \text{H})^+$ excited asymptotes.

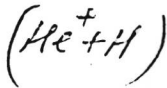
C. A. 9981. 94 v 4



1980

16.Б1077. Столкновительные методы исследования поверхностей потенциальной энергии возбужденных состояний системы HeH_2^+ . Энергетические пороги сечений реакций ионов гелия с водородом, дающих в качестве продуктов H^+ , H_2^+ , H_3^+ , HeH^+ и $\text{H}^*(nl)$. Jones E. Grant, Wu Richard L. C., Hughes B. Mason, Tiernan T. O., Hopper Darrel G. Collisional studies of the excited state potential energy surfaces of HeH_2^+ : Energy thresholds and cross sections for reactions

столкнов.

обра
на

x. 1981. N/6

of helium ions with hydrogen yielding H^+ , H_2^+ , H_3^+ , HeH^+ , and $H^*(nl)$. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 11, 5631—5645 (англ.)

Различные каналы р-ции $He^+(1s) + H_2(X^1\Sigma_g^+, v=0)$ в диапазоне энергий столкновения 1—90 эВ исследовались методом рассеяния ионного пучка на газовой мишени с масс-спектрометрич. регистрацией ионных продуктов и спектроскопич. анализом хемилюминесцентного излучения образующихся электронно возбужденных атомов $H^*(nl)$. Измерения сечений выявили наличие порогов образования H^+ при $7,1 \pm 0,2$ эВ, HeH^+ и H^* (21) при $9,0 \pm 0,1$ эВ, H^* (31) при $12,7 \pm 1,0$ эВ и H^* (41) при $14,4 \pm 1,5$ эВ. Аналогичные р-ции исследованы также для D_2 . Отмечается, что образование H_2^+ и H_3^+ (в ходе втор. р-ции) происходит при почти тепловых энергиях столкновения. Полученные результаты интерпретируются с использованием информации, о поверхностях потенциальной энергии полученной в неэмпирич. расчетах многоконфигурац. методом самосогласованного поля.

А. И. Маергойз

HeH_2^+

1981

1 Д92. Квазипериодическое движение в линейном комплексе HeH_2^+ . Quasiperiodic motion in collinear HeH_2^+ . Ma y n e H o w a r d R., W o l f R a l p h J. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 3, 508—512 (англ.)

Движение ядер в слабосвязанном комплексе HeH_2^+ исследовано в классич. приближении. При построении ядерной ф-ции Гамильтона использована поверхность потенц. энергии, рассчитанная методом двухатомных фрагментов в молекулах. Предполагалось сохранение линейной геометрии комплекса. Установлено, что переход от квазипериодич. движения ядер к иррегулярному с ростом энергии ядер происходит постепенно, причем квазипериодич. движения наблюдаются при энергиях вплоть до $3D$ (D — энергия диссоциации HeH_2^+). Этот результат противоречит полученным ранее с использованием модельных ф-ций Гамильтона данным, свидетельствующим о скачкообразном характере перехода от квазипериодич. движения к иррегулярному при достижении критич. значения энергии. А. В. Зайцевский

квазипериод.
движение

СР. 1982, 18, №1.



1981

kl. lex.
pauzet

(94:27710e Atoms-in-molecules calculations on diatomic fragments of polyatomic systems. Helium-hydrogen (HeH and HeH^+). Polak, R.; Vojtik, J.; Paidarova, I.; Schneider, F. G. Heyrovsky Inst. Phys. Chem. Electrochem., Czech. Acad. Sci. 121 - Prague, 2 (Czech.). *Chem. Phys.* 1981, 55(2), 183-91 (Engl.). Two different modifications of the atoms in molecules method were applied to various states of the HeH and HeH^+ species. The calcs. were done for a wide range of internuclear sepns. to obtain a description of the diat. mols. suitable for input to a subsequent DIM calcn. of potential energy surfaces for $(\text{HeH}_2)^+$. The results are compared with other presently available calcs.

C.A. 1981.24,N16

HeH_2^+

Om. 16692

1983

17 Б142. Поверхности потенциальной энергии HeH_2^+ , полученные методом двухатомных фрагментов в молекулах. Расчет с расширенным базисом. Diatomics-in-molecules potential energy surfaces of $(\text{HeH}_2)^+$, an extended basis set calculation. Schneider F., Zülicke L., Polak R., Vojtik J. «Chem. Phys.», 1983, 76, № 2, 259—269 (англ.)

Методом двухатомных фрагментов в молекулах (ДФМ) рассчитаны сечения поверхностей потенциальной энергии различных состояний системы HeH_2^+ с симметрией геометрич. конфигурации $C_{\infty v}$, C_{2v} и C_s . При построении набора многоатомных базисных ф-ций учтены структуры $\text{He}-\text{H}^+-\text{H}$, $\text{He}-\text{H}^+-\text{H}(2s)$, $\text{He}-\text{H}^+-\text{H}(2p)$, $\text{He}^+-\text{H}-\text{H}$, $\text{He}^+-\text{H}^+-\text{H}^-$ и $\text{He}^--\text{H}^+-\text{H}^+$. Методом ДФМ использован в неэрмитовой формулировке с явным учетом матрицы интегралов перекрывания. Энергии двухатомных фрагментов взяты по результатам наиболее надежных неэмпирич. расчетов. Матрицы коэф. смешивания двухатомных состояний одинаковой

расчет
потенц.
поверхн., Е;

Х. 1983, 19, N 17

симметричны построены на основании оценочных расчетов методом атомов в молекулах. Рассмотрены два варианта приближения: метод ДФМ без варьируемых параметров и вариант с введением подгоночных параметров в коэф. смешивания. Во втором варианте удалось подобрать параметры так, чтобы согласовать результаты метода ДФМ и неэмпирич. расчетов HeN_2^+ . В первом же варианте погрешности приближения в области взаимодействия доходят до 0,1—1 эВ, что делает проблематичным применение приближения ДФМ для колич. описания энергии взаимодействия при образовании молекул.

А. В. Немухин

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

Om. 16692

1983

10 Д61. Поверхности потенциальной энергии $[\text{HeH}_2]^+$, рассчитанные методом двухатомных фрагментов в молекуле. Расчеты с расширенным базисным набором. Diatomics-in-molecules potential energy surfaces of $(\text{HeH}_2)^+$: an extended basis set calculation. Schneider F., Zülicke L., Polák R., Vojtík J. «Chem. Phys.», 1983, 76, № 2, 259—269 (англ.)

С использованием расширенного базисного набора в рамках неэрмитовской формулировки метода двухатомных фрагментов в молекуле (ДФМ) рассчитаны поверхности потенц. энергии (ППЭ) основного и нижних возбужденных состояний системы $(\text{HeH}_2)^+$. Размерность симметризованного по спину и пространственным координатам базисного набора равнялась 13, а исходные кривые потенц. энергии двухатомных фрагментов выбирались либо в аналитич. виде, либо интерполяцией сплайнами, но так, чтобы они максимально соответствовали наиболее точным неэмпирич. дан.

расчет
м.п.

гр. 1983, 18, N10

ным. Подробно рассматривается влияние выбора функций смешивания валентных структур двухатомных фрагментов на ППЭ всей системы. Результаты сравниваются с данными неэмпирич. расчетов. Отмечается, что выбор коэф. смешивания на основании ограниченных по базису расчетов по методу валентных схем или по методу атомов в молекулах приводит к достаточно точным результатам, хотя детали ППЭ, в частности угловая зависимость или величины расщеплений в местах квазипересечений, могут быть и неточными.

А. А. Зембеков



HeH₂⁺

DM- 16692

1983

98: 222197g Diatomics-in-molecules potential energy surfaces of the helium-hydrogen ion ((HeH₂)⁺): an extended basis set calculation. Schneider, F.; Zuelicke, L.; Polak, R.; Vojtik, J. (Cent. Inst. Phys. Chem., Acad. Sci. GDR, 1199 Berlin-Adlershof, Ger. Dem. Rep.). *Chem. Phys.* 1983, 76(2), 259-69 (Eng). Within the framework of the non-hermitean DIM formulation of Tully and Truesdale, (1976), and using 13 symmetry-adapted polyat. basis functions, ground-state and excited-state potential energy surfaces for (HeH₂)⁺ were calcd. Whereas the global shape of the potential energy surfaces is obtained in reasonable agreement with existing ab initio data, at least if scaling is introduced, there are marked differences in the details, e.g. the angular dependences and the splitting of the first and second excited-state potential energy surfaces. The dependence of the results on mixing parameters and scaling as well as implications concerning the predictive power of the DIM method are discussed.

(nomenus.)
(notexu.)

C.A. 1983, 98, N26

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

OM. 22406 1985

2 Д78. Неэмпирический расчет адиабатических пересекающихся поверхностей молекулярного иона $(\text{HeH}_2)^+$. Ab initio determination of the diabatic multicrossing pattern in the $(\text{HeH}_2)^+$ molecular ion. Kubach C., Courbin-Gaussorgues C., Sidis V. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 119, № 6, 523—528 (англ.)

Предложен метод для получения количеств. информации о адиабатич. пересекающихся поверхностях. Рассматриваются состояние с возбуждением остова $(1a', 2a'_2)^2A'$ и $(1a'^2v)^2A', ^2A''$ серии Ридберга трехатомного иона $(\text{HeH}_2)^+$. «Квазиadiaбатические» одноконфигурац. ф-ции составлялись из МО (метод ССП для $1a'$ и $2a'$ и схема улучшенных виртуальных орбиталей для возбужденных МО). Применялись техника проекционного оператора и расчеты в рамках метода взаимодействия конфигураций. Рассчитанные положения точек пересечения согласуются с эксперим. энергетич. порогом образования H^+ и эмиссии фотонов из состояний $\text{H}^* (n=2)$ и $\text{H}^* (n=3)$ (Wn R. L. C., Hopper D. G. «Chem. Phys.», 1981, 57, 385). Г. К.

ab initio
расчет

ср. 1986, 18, №2

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

Дм. 22406 1985

3 Б1077. Неэмпирическое определение пересекающейся системы адиабатических термов для молекулярного иона $(\text{HeH}_2)^+$. Ab initio determination of the diabatic multicrossing pattern in the $(\text{HeH}_2)^+$ molecular ion. Kubach C., Courbin-Gaussorgues C., Sidis V. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 119, № 6, 523—528 (англ.). ISSN 0009—2614

Предложен неэмпирич. метод расчета адиабатич. термов возбужденных состояний молек. иона $(\text{HeH}_2)^+$. Все такие термы получают из терма основного состояния $\text{He}(1^1\text{S}) + \text{H}_2^+(1\sigma_g)$ переносом электрона с He на H_2^+ , либо ридберговым возбуждением иона H_2^+ . Метод состоит в построении функций указанных термов из одного набора самосогласованных орбит, к-рые обеспечивают для 2 указанных подсистем термов выполнение ряда общих требований метода ССП. Конкретные рас-

М.П., стуж
мира

Х. 1986, 19, № 3

четы выполнены для фиксированного расстояния между протонами при различных расстояниях R от He до центра иона H_2^+ и углах γ между вектором R и осью молекулы H_2 в базисе гауссовых функций $(10s+5p)$ на каждом центре. Отмечено образование потенциальных ям для ридберговских состояний в треугольной конфигурации и сильно отталкиват. характер термов системы $He^+—H_2$ для обеих конфигураций. Качественно обсуждены x -ки пересечений термов. Е. Е. Никитин

HeH_2^+

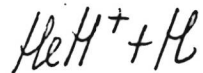
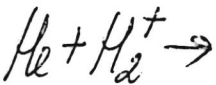
Doc. 22406

1985

/ 103: 183906n Ab initio determination of the diabatic multicrossing pattern in the helium-hydrogen molecular ion (HeH_2^+). Kubach, C.; Courbin-Gaussorgues, C.; Sidis, V. (LCAM, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 119(6), 523-8 (Eng). A method is presented for obtaining quant. information on the pattern of diabatic-potential-surface multicrossing that involves the core-excited state ($1a'$, $2a'^2$) $^2A'$ and the ($1a'^2\nu$) $^2A'$, $^2A''$ Rydberg series of the (HeH_2) $^+$ triat. ion. Quasi-diabatic single-configuration state functions were built from judiciously generated MOs (balanced SCF treatment of $1a'$ and $2a'$ and the improved-virtual-orbital scheme for the excited MO). By using the projection-operator technique of T. F. O'Malley (1969), the configuration states that describe different characteristics were grouped into subspaces where CI calcs. were performed. The salient features of the potential-energy surfaces for various geometries are discussed.

nomeres. no-
represent,
neop. pariem

C. A. 1985, 103, N 2 & 2



not yet
 ionized.
 HeH⁺,
 ab initio
 praeem

Om. 26332

1987

Joseph T., Sathyamurt-
 hy N.,

J. Chem. Phys., 1987,
86, N2, 704-714.

HeH_2^+

Im. 29779

1987

108: 227210r Long-range potentials of polyatomic molecular ions. Murrell, J. N. (Sch. Chem. Mol. Sci., Sussex Univ., Falmer/Brighton/Sussex, UK BN1 9QJ). *Mol. Phys.* 1987, 62(6), 1403-8 (Eng). The potential energy surface of HeH_2^+ is used to illustrate the factors that arise when there is a degeneracy in the electronic states of the charged fragments at dissociation limits. At short H-H distances the positive charge is shared equally between the 2 atoms. At large H-H distances, but 1 short H-He distance, the charge resides on 1 of the H atoms. These limits and intermediate situations, affect the induction and dispersion contributions on the HeH_2^+ potential energy surface.

homers.

но перхитов

C.A. 1988, 108, N26

HeH_2^+

CM 29779

1987

21 B1114. Дальнодействующие потенциалы многоатомных молекулярных ионов. Long-range potentials of polyatomic molecular ions. Murrell J. N. «Mol. Phys.»; 1987, 62, № 6, 1403—1408 (англ.)

На примере потенциальной Пв HeH_2^+ проанализирован характер дальнодействующего Пт взаимодействия в молек. ионе при наличии вырожденных электронных состояний заряженного фрагмента на диссоциац. пределе. При малых расстояниях Н—Н заряд поровну распределен между двумя атомами водорода. При больших расстояниях Н—Н и малых расстояниях He—Н заряд сосредоточен на одном из атомов Н. Показано влияние этих предельных ситуаций на индукц. и дисперсионный вклады в энергию взаимодействия He и H_2^+ . Сделан вывод о сильном влиянии вырожденности электронного состояния молек. иона на характер его дальнодействующего потенциала. А. А. Сафонов

М.А.

X. 1988, 19, N 21

$H_2 He^+$

DM. 28755

1987

колебат.-
вращат.
уровни

Tennyson F., Mil-
ler J.,

J. Chem. Phys., 1987,

87, N11, 6648 - 6652.

HeH₂⁺

1990

16 Б1050. Неэмпирические потенциальные поверх-

ности молекулы HeH₂⁺ и неадиабатические взаимодействия между ними. Ab initio (HeH₂)⁺ energy surfaces and nonadiabatic couplings between them / Furlan Richard J., Bent Gary, Russek Arnold // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 9.— С. 6676—6684.— Англ.

Усредненным по состояниям вариантом многоконфигурац. метода ССП с последующим полным учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны адиабатич. потенц. поверхности (ПП) трех нижних электронных состояний (1, 2, 3 ¹A) молекулы HeH₂⁺ и связывающие их неадиабатич. матричные элементы. Используемый метод расчета гарантирует одинаковую точность ПП всех трех состояний. Обнаружены конеческие точки пересечения ПП 2- и 3-го состояний в области $K \sim 3,0$ ат. ед. и 1- и 2-го состояний в области $R \sim 1,2$ ат. ед., где R — расстояние He—H₂. ПП и неадиабатич. матричные элементы вычислены на достаточ-

М. П.

X. / 1991, № 16

но густой сетке точек в пространстве колебат. переменных, что позволяет вычислить их в любой внутренней точке с помощью сплайн-интерполяции.

В. Б. Павлов—Веревкин



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

1990

114: 12548v Ab initio dihydrohelium(1+) $((\text{HeH}_2)^+)$ energy surfaces and nonadiabatic couplings between them. Furlan, Richard J.; Bent, Gary; Russek, Arnold (Phys. Dep., Univ. Connecticut, Storrs, CT 06269 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(9), 6676-84 (Eng). The energy surfaces of the three lowest adiabatic states of the $(\text{HeH}_2)^+$ triat. mol. system have been calcd. ab initio as functions of all three variables describing the triat. geometry, using the BRLJHU set of quantum-chem. programs. The procedure is described by the acronym SA-MCSCF/CI, for state-averaged multiconfiguration self-consistent-field calcn., followed by a full CI calcn. In addn. the nonadiabatic matrix elements which couple these adiabatic states have been calcd. Results have been obtained on a sufficiently fine mesh for interpolation by a spline-fit program to produce energy differences and nonadiabatic coupling matrix elements over the full mesh required for collisional excitation problems of He^+ on H_2 and H_2^+ on He involving these states.

расчет и н.
в 3-х электронных
состояниях

с.А. 1991, 114, N 2

$H_2 H^+$

1992
Aguado A., Paniagua M.,

nomens.
p-ue,
ab initio
paren

J Chem. Phys. 1992, 96(2),
1265-75.

(all. H_3 ● ; III)

$[HeH_2]^+$

1992.

nominal. not yet
ab initio
vacuum

117: 118895 Potential energy surfaces describing ion complexes containing molecular hydrogen. Ischtwan, Josef; Smith, Brian J.; Collins, Michael A.; Radom, Leo (Res. Sch. Chem., Aust. Natl. Univ., Canberra, 2601 Australia). *J. Chem. Phys.* 1992, 97(2), 1191-210 (Eng). High-level ab initio MO calcns. have been carried out to describe the potential energy surfaces for a series of systems corresponding formally to dimer ions of mol. hydrogen with an inert-gas atom or a first- or second-row hydride $[X:H_2]^+$, where $X = He, Ne, Ar, Kr, HF, HCl, H_2O, H_2S, NH_3,$ and PH_3 . Of the $[XH_2]^+$ ion complexes, $[Ne:H_2]^+$, $[Ar:H_2]^+$, $[Kr:H_2]^+$, and $[HFH:H]^+$ lie in wells of significant depth and should be exptl. observable. The energetics of ion-mol. reactions assocd. with the $[XH_2]^+$ systems have been examd. in detail. The reactions include proton- and hydrogen-transfer reactions and hydrogen-exchange reactions. Pathways and transition structures for scrambling of hydrogen atoms within the $[XH_2]^+$ complexes, some of which are relevant to the exchange reactions, have also been detd.

(79)



C. A. 1992, 117, N 12

HeH_2^+

1993

118: 110099b Accurate fit of the two lowest excited-state potential-energy surfaces for doublet dihydrohelium($1+$) (HeH_2^+). Aguado, Alfredo; Suarez, Cristina; Paniagua, Miguel (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *J. Chem. Phys.* 1993, 98(1), 308-15 (Eng). Diabatic potential-energy functions for the two lowest excited states of the doublet HeH_2^+ system which fit published *ab initio* data (McLaughlin and Thompson, 1979) at a quant. level were obtained, similar to that obtained previously for the ground state (root-mean-square error about 1 kcal/mol), and without any quantity of *ad hoc* character, preserving the accuracy of the *ab initio* points. The corresponding adiabatic potential-energy functions were obtained by solving a 2×2 determinant that uses the diabatic energies and an interaction term fitted to the lowest eigenvalue to obtain a global root mean square as low as possible (0.93 kcal/mol). The lowest adiabatic potential-energy function satisfies the criteria needed to be used in full three-dimensional scattering calcs. for the collisionally-induced predissocn. charge-exchange reaction $\text{He}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{He} + \text{H}^+ + \text{H}$ and, using the ground-state potential-energy surface also, the collision-induced dissocn. reaction $\text{H}_2^+(v) + \text{He} \rightarrow \text{He} + \text{H}^+ + \text{H}$ and the exoergic reaction $\text{He}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{H}$.

по метр. по-
верхности

C.A. 1993, 118, N 12

HeH_2^+

1995

123: 123667p Potential energy function and reaction dynamics for the HeH_2^+ system. (I). Analytical potential function of the ground state for HeH_2^+ . Huang, Zheng; Xie, Hongping; Jiang, Dongling; Zhu, Zhnghe (Inst. Atomic Mol. Phys., Sichuan Union Univ., Chengdu, Peop. Rep. China 610065). *Yuanzi Yu Fenzi Wuli Xuebao* 1995, 12(2), 151-5 (Ch). The equil. geometry, dissociation energy, and harmonic force consts. for HeH_2^+ ($X^2\Sigma^+$) were calculated based on CID/6-31G using Gaussian 92. The anal. potential energy function of HeH_2^+ was then derived by many-body expansion method.

номери.
книж. описок.
координат.

C.A. 1995, 123, N10

HeH₂⁺

1995

at initio
racem
kon. sp. ypravku
HeH₂⁺

123: 68683p Ab initio predicted rotation-vibration energy levels of HeH₂⁺. -Spirko, V.; Kraemer, W. P. (Max-Planck-Inst. Astrophys., D-85740 Garching, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(1), 265-74 (Eng). The potential energy function of the ground electronic state of HeH₂⁺ is calcd. at the multireference CI-level of ab initio theory, using a MO basis optimized in an appropriate multiconfiguration SCF procedure. Energies of all rotational-vibrational bound states of HeH₂⁺ and HeD₂⁺ are detd. variationally from a diagonalization of the full dimensional Sutcliffe-Tennyson Hamiltonian for triat. mols. The results obtained at the present high-accuracy level differ significantly from those of previously published calcns. They are used to assess the reliability of an adiabatic approxn. in which the high-frequency H₂⁺ stretching vibration is sepd. from the remaining motions. For all bound vibrational levels of HeH₂⁺, good agreement between the results from the adiabatic approxn. and the rigorous full dimensional calcn. is obtained.

C.A. 1995, 123, 26

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

1998

очень
сложно,
ab initio
расчет

129: 281276p The ground state of $(\text{He}-\text{H}-\text{He})^+$ from correlated ab initio calculations. Komasa, J.; Rychlewski, J. (Department of Chemistry, A. Mickiewicz University, 60-780 Poznan, Pol.). *Pol. J. Chem.* 1998, 72(7, Suppl.), 1353-1360 (Eng), Polish Chemical Society. He_2H^+ ion in its ground state is studied by means of ab initio methods taking into account the electron correlation. Geometry optimization at the CCSD(T)/cc-pV5Z level of theory has been performed and the potential energy hypersurface scan is presented. The optimum conformation is linear and sym. with the proton at the He-He midpoint and the He-H distance equal to 1.75 bohr. Stabilization energy with respect to the $\text{He}_2\text{H}^+ \rightarrow \text{HeH}^+ + \text{He}$ disocn. channel has been computed. Addnl., a single point variational calcns. with the use of the exponentially correlated Gaussian wave functions have been performed. They supply an upper bound to both the total electronic energy (-5.903505 hartree) and the stabilization energy (-13.224 kcal/mol). A comparison of the results from both the perturbational coupled cluster and variational methods is presented.

C. A. 1998, 129, N 21

HeH₂⁺

1998

128: 236420z Ab initio calculated rotation-vibration line strengths for the ($v_{HH} = 0 \rightarrow 1$) transition of HeH₂⁺. Kraemer, W. P.; Jurek, M.; Spirko, V. (Max-Planck-Institute of Astrophysics, D-85740 Garching, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 187(2), 206-209 (Eng), Academic Press. The purely vibrational transitions and their line strengths in the bond state of HeH₂⁺ ions were calcd. and a comparison between full-dimensional calcns. and adiabatic sepn. scheme was carried out. The spectroscopic consts. such as rotational const., rotational distortion const. and spin statistical wts. are reported.

Грайман.
и Ковбат.
НОСМ.

C.A. 1998, 128, N19

HeH₂⁺

1998

129: 267128k Adiabatic separations of the vibrational motions in HeH₂⁺ and the calculation of metastable states. Spirko, V.; Jurek, M.; Kraemer, W. P. (J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Rep. CZ-18223/8). *Pol. J. Chem.* 1998, 72(7, Suppl.), 1389-1397 (Eng), Polish Chemical Society. Recent ab initio calcd. potential energy data for the ground electronic state of HeH₂⁺ were used to construct a new potential function, which is suitable to describe the interaction between He and H₂⁺ at low collision energies. All bound and the lowest quasi-bound rotation-vibrational levels of HeH₂⁺ are evaluated within the framework of the Sutcliffe-Tennyson Hamiltonian for triat. mols. neglecting Coriolis interactions between the states. Adiabatic sepns. of the vibrational motions were used to simplify the calcns. of the bound and quasi-bound levels close to the dissocn. limit. Comparison with the results of full-dimensional calcns. shows that a very good agreement was obtained when sepg. adiabatically the high-frequency H₂⁺ stretching motion from the remaining two low-frequency modes and that further sepn. of the low-frequency motions still provides useful approxns. for the positions of the bound and lowest quasi-bound states.

HeH₂⁺
H. COCM.

C.A. 1999, 129, N20.