

ASH₃

1928

AsH₃; PH₃; NH₃ (*moner. nocui*)

Robertson R., Fox J.J.

Studies on the infra-red region of spectrum. IV. Diskussion of absorption bands of ammonia, phosphine and arsine

Proc. Roy. Soc. (London), 1928, 120A
189

Kelley, bull. 592,
c. 858

10

2568-111

AsCl₃ (ω ; 2)

1934

Howard J.B., Wilson E.B., Jr.
J.Chem.Physics 1934, 2, 630-4

"Normal frequencies of vibration of symmetrical pyramidal molecules AB₃ with application to the Raman spectra of trihalides".

C.A., 1934, 7160⁴

2615-III

W (NH_3 ; PH_3 ; AsH_3 ; NO_3)

1935

PH_3 ; AsH_3)

Howard J.H.

J.Chem.Physics 1935, 3, 207-11

"Normal vibration frequencies
of ammonia, phosphine and arsine".

C... 1935, 36019

2069-111

(AsH₃; AsD₃; DSiCl₃; DSiBr₃)

1936

Delfosse J.M.

Nature 1936, 137, 868

"Raman spectra of "heavy" arsine,
silicochloroform and silicobromoform"

C.A., 1936, 5498⁶

2715-III

D (AsH_3)

1936

de Hemptinne M., Delfosse J.-M.

Ann.soc.sci.Bruxelles 1936, 56B,
373-83

"Raman spectrum of light and
heavy phosphine and arsine".

C.A., 1937, 2512⁷

ω (AsH₃; AsD₃; PD₃) 3043-II | 1939

BP-III-5350

Lee P, Wu C. K.

Trans. Faraday Soc. 1939, 35, 1366-73

"Infrared absorption spectra of AsH₃,
AsD₃ and PD₃."

Cite 6 only

10

ECT

Q.A.H.

1940, 1561 6 10/11

✓

AsH₃

Bop - 5340-III | 1940

Stevenson D.P.

Copyright.

J. Chem. Phys."

1940, 8, 285-287.

"The Struct. of Phosphine and Related
Hydrides.

1900-III

1948

AsH₃ (V, Bo, Ze, L xyz)

AsD₃ (V, Bo, Ze, L xyz)

PH₃ (V, Bo, Ze, L xyz)

McConaghie V.M., Niclesen H.H.
Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.,
1948, 34, 455-64

Some preliminary results on
the infrared spectra of AsH₃, AsD₃,
and PH₃



C.A., 1949, 3293d

565-III

1949

NH_3 , AsH_3 (аммиак и мышьяк)

Duchesne J., Ottelet I.

J. Chem. Phys. 1949, 17, 1354-1355

Vibration potential function
and structure of ammonia and arsine
molecules

CA., 1950, 44, 4781h



AsH₃; AsD₃

McConaghie V.M., Niesen H.H.

A study of the high frequency
fundamental bands in the spectrum
of AsH₃ and AsD₃

Phys.rev., 1949, 75, 633

Kelley, bull.592, c.732

1905-III

HfO_2 (We, Bo, Ze, L, μ , γ) 1949

HfO_2 (We, Bo)

Virginia E.S., Donoghue, Michael E.S.

Phys. Rev., 1949, 75, 633-640

High-frequency fundamental bands in
the spectrum of HfO_2 and ZrO_2

C.S., 1949, 4130g

549-111

1950

NH_3 , AsH_3 , PF_3 , AsF_3 (симовне постоле)

Burnelle L., Duchesne J.

J.Chem.Phys., 1950, 18, 1300-1

The angle-angle interaction
in the vibration potential function
of pyramidal molecules

C.A., 1951, 10i

566 -111

1950, 11, 119-123 (Vi, curab. no. 1000), 1950

Ducheneau J., Chlot I.

J. phys. radium 1950, 11, 119-123

Calculation and interpretation
of the vibrational potential function
of the ammonia and arsine molecules

CA., 1950, 44, 5659g

1582-III

1950

PCl_3 , $AsCl_3$ ($\angle P-Cl$, $\angle As-Cl$, $\angle Cl-P-Cl$)
 $\angle Cl-As-Cl$

Kisliuk P., Townes C.H.

J.Chem.Phys., 1950, 18, 1109-11

Microwave spectra and molecular
structure of phosphorus and arsenic
trichlorides

C.A., 1951, 452b

1901-111

1950

AsH₃ (2)

Nielsen H.H.

Discussions Faraday Soc. 1950,
N 9, 85-92

"The low-frequency fundamental
bands in the spectrum of arsine"

C.A., 1952, 3405e



1902-III

1952

AsH_3 ($\angle \text{As-H}, \angle \text{H-As-H}$, момент инерции)

Nielsen H.H.

J.Chem.Phys., 1952, 20, 1955-6

Molecular structure of arsine

C.A., 1953, 9774b

1452-III

1952

PH_3 ($\angle \text{HPH}$; 2 $p\text{-H}$)

AsH_3 ($\angle \text{HASi}$; 2 As-H)

SbH_3 ($\angle \text{HSbH}$; 2 Sb-H)

Nielsen H.H.

J.Chem.Phys. 1952, 20, 759

"Structure of the molecules of
phosphine, arsine, and stibine".

C.A., 1952, 9903f

1953

AD₃

AS H₃

R. Stramp, R. Oeffen,
Bell E. Gosh; 43, 1096.

Врау. спектр РМ₃ и АСМ₃

см РМ₃.

1897-III

AsH₃, AsD₃ (симв. нсв.) 1954.

Game I.

Compt. rend., 1954, 238, 465-7

The fundamental vibrations of
arsine

C.A., 1954, 6254g



1896-III

1955

AsH₃, AsD₃ (B₀; L, 2 if)

Blevins G.S., Jache A.W., Gordy W.
Phys. Rev. 1955, 97, N 3, 684-686
(*asme*)

Millimeter wave spectra of AsH₃
AsD₃.

PX., 1955, 42409

V_i ($H_2O, H_2S, H_2Se, NH_3, PH_3, AsH_3$)

1955-

Longuet-Higgins H.C., Brown D.A.

J. Inorg. and Nuclear Chem. 1955, I,
N I-2, 60-67 ()

The dynamics of binary hydrides.

PX, 1956, 42322

1955

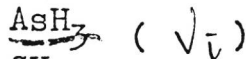
Аз Нз и
УМз

R. S. Mulliken

УАС 77 887

углы связи в молекулах
типа АзНз и их производных.

АзНз $\angle 91^{\circ}30'$



1955

III - 1199

Plíva J., Schneider B.

Chem. listy, 1955, 49, N 2, 149-157 (чеш.)

Сб. чехосл. хим. работ, 1955, 20, № 2, 452-461
(англ. резюме русск.)

Jednoduchá metoda na výpočet približných.
PX, 1956, 12126.

157 Y-111

AsCl_3 (ν_1), силов. посылка

1958

Davis P., Oetjen H.,
J. Mol. Spectrosc., 1958, 2,
и 3, 253-258 (англ.)

Спектры несколько пирамидальных
тригалогенидов в средней дальней
инфракрасной области

1959, и 7,
22246



547 - III

AsH_3 (СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ) 1959

Blum L., Cohan R.V.,
Canad. J. Phys., 1959, 37, N 9,
1002-1007

Вычисление орбитальных силовых
постоянных тетраэдрических молекул

РХ., 1960, № 21, 83699

70

Расставлено
по предметам

1959

AsH₃ (D_J, D_{JK}, D_K)

Sundaram S.,

Спектроскопическ., 1959, 8, № 89, 51
 Вращательное возмущение в мо-
 которых многоатомных молекулах

PX., 1960, № 18, 72278

1960

As H₃ Tenn. S.R. Kelly W. L.

Green L. G.

J. Phys. Chem. 1960, 64, 19,
1334.

ВР-611-III ; ВР-5333-III

AsH_3

1960

(СИЛОВЫЕ ПОСТ., $\frac{\text{H}^{\circ}-\text{E}^{\circ}}{\text{T}}$, $\frac{-\text{F}^{\circ}-\text{E}^{\circ}}{\text{T}}$, S° , Cp°)

Sundaram S., Suszek R.,
Cleveland F.F.

J. Chem. Phys., 1960, 32, № 1, 251-254.

СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ, ПОСТОЯННЫЕ ЦЕНТРОБЕЖ-
НОГО РАСТЯЖЕНИЯ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ
ФУНКЦИИ

РХ., 1960, № 16, 64265

Есть ф. к.

10

99

AsH₃
~~RX₃~~

631-III

1960

/силовые пост., парциальные
частоты/

(X=H, D;

R=N, P, As, Sb)

Рыбакова Г.И., Наутольников Б.И.,
Морозов В.П.

Оптика и спектроскопия, 1960, 9,
№ 2, 166-169

Парциальные частоты пирамидальных
гидридов и дейтеридов симметрии C_{3v}

RX., 1961, 9Б80

630-11

$\text{InH}_3, \text{PbH}_3$)
 $\text{AsH}_3, \text{SbH}_3$) (силовые постоянные 1960)

Рубакова Г.И., Ковальчук Д.С.,
Морозов В.П.

Оптика и спектроскопия, 1960, 9,
№ 1, 34-39.

Силовые постоянные и коэффициенты
влияния пирамидальных гибридов.

РХ., 1961, 6Б123

As-H, D, T. Bp-5337-III 1960.

XYZ_2 Thyagarajan F.
et al.

X = P, N, As

Y, Z = H, D, T. J. Mol. Spectrosc.,

1960, 5 N⁴, 307-8.

V. I. Konev.

Учен. зап. к. дисс.

м. г. г. г.

(см. NH₃; II)

AsH₃

BD-M630-IV 1962

(ν_1 , cur. mov.)

Bartell L. S.
Kuchitsu K.

J. Chem. Phys., 1962,
37(4), 691-96

3032-10

PH₃, PH₃, AsH₃, SbH₃ (СИГНОВЫЕ ПОСТ. 1962)

Хлебникова В.М., Морозов В.И.

Докл. АН Укр. ССР, 1962/6/, 790-2

Применение метода спектра

СА., 1963, 59, N11,
12281h

AsH₃

оттиски 4274

1962

Марозов В.П., Хлебни-
кова В.Н. и др.

Сил. пост.

Физ. проблемы в
спектроскопии, матер.
XIII совещ. Ленингр.
1960 4-12 июля (изд. 1962)

AsH₃

SiH₄

E

Soufeld F.S., 1962

Disc. abstr, 2A, v10,

3428 (1962)

The mass-spectra of
some volatile hydrides

2450 - III; III - 5064 1962

III₃, ~~AsH₃~~, PH₃, PD₃

AsH₃, AsD₃, SbH₃

} (Камедат. носиб.)

Walsh A.D., Warsop P.A.

Advances Molec. spectrosc.,
v.2, 1962, 582-591 (англ.)

The ultraviolet spectra of
hydrides of group V elements

РР., 1963, 7D182

Есть оригинал.

3082-III

1963

PH_3 , PD_3 , AsH_3 , AsD_3 , SbH_3 , PF_3 ,

PCl_3 (Te, J *сверхмалая Vi*)

Humpries C.M., Walsh A.D., Warsop P.A.,

Disc. Faraday Soc., 1963, N 35,

148-157 (*AsH₃*)

Absorption spectra of the
hydrides ...

Pp., 1964, 9D173

III - 2886, III - 5348

PH_3 , SbH_3 , AsH_3 (molecule non., W_i , P_i)¹⁹⁶³

Pariseau M., Wu E., Overend J.

J. Chem. Phys., 1963, 39, N 1,
217-223 (Amu.)

Adaptation of the...

Pp., 1964, 1062

10



FILED OCT 1964

As H₃

As H₃⁺

I

2697 - III
BOP - 12060 - IV

1963

F. F. Saalfeld

H. J. Svec

J. Inorganic Chemistry V.2, N1, 46-50

(1963)

M 1417

1964

Ch. d. M. m. (CH₄, SiH₄, GeH₄, NH₃, PH₃, AsH₃,
SbH₃)

Duncan J. L., Mills I. M.

Spectrochim. acta, 1964, 20, N. 3, 523-546

The calculation of force constants
and normal coordinates. IV. XH₄ and XH₃
molecules

J

PX., 1967, 65141

AsH₃

III - 4041

1964

спектр

16 Б143. Исследование инфракрасных спектров AsH₃, SbH₃ и систем AsH₃ галогеноводород и SbH₃ — галогеноводород в кристаллическом состоянии. Heine-
mann A. Infrarotspektroskopische Untersuchungen an AsH₃, SbH₃ und den Systemen AsH₃ (Halogenwasserstoff und SbH₃) Halogenwasserstoff im Kristallzustand. Ein infrarotspektroskopischer Nachweis des Arsoniumions. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1964, 68, № 3, 287—295 (нем.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения кристаллич. AsH₃ (I) и SbH₃ (II) при t-ре 82° K. Спектр I (ν_1 2092, ν_2 895, ν_3 2092, ν_4 979 см⁻¹) соответствует локальной симметрии (ЛС) молекул I в кристаллич. решетке C_{3v} или C₃. В спектре II ν_1 1878, ν_2 769 см⁻¹; ν_3 и ν_4 расщеплены (1866, 1883 см⁻¹ и 812, 821 см⁻¹ соответственно), что отвечает ЛС C_s или C_i. Дано отнесение составных частот и обертонов в спектрах I и II с учетом частоты реше-

ж. 1965. 16

А

точных колебаний ν_5 : 130 см^{-1} I и $\sim 200\text{ см}^{-1}$ II. Исследованы продукты совместной кристаллизации I и II с галогеноводородами. В случае I+HCl изменение спектров указывает на образование водородных связей; ионы AsH_4^+ не образуются. В системах I+HBr и I+HI образуются соли арсония. ЛС AsH_4^+ в их решетках C_{2v} и V_d соответственно. В случае II взаимодействия не обнаружено.

Ю. Варшавский

AsH₃

Хлебникова В.Н.,
Морозов В.П.

1964

сш. пост.

Спектроскопия, Методы и
применение, СО АН ССР,
110

Применение метода спек-
троскопических масс к
расчету силовых посто-
янных и термодина-
мич. функций гидридов и

дейтериевых элементов V группы.
(см. H_2D) II

AsH₃

Хлебникова В.Н., Морозов В.П. : 1965

Учв. Всес. учбн. заведениям.

Физика., №, 134-136.

К раскату координатных
поверхностей дуриной
гидридов элементов изной
группы.

(см. NH₃)

ВФ-4321-III

4150 H_2O ; H_2S ; H_2Te ; H_2Se ; NH_3 ; PH_3 ; AsH_3 ; SbH_3 ; CH_4 ; SiH_4 ; SnH_4 ;
(vi)

Lascombe J., Huong Pham-Van.,
Morisson H., Devaure J., Josien M.L.
J.chim.phys.et phys.-chim.biol., 1964,
61, N 10, 1414-1420
Influence de la dissolution sur les ...

J

PF, 1965, 120503

As H₃

оттиски 4273

1966

Лесбникова В. М.
Морозов В. П.

расчет
сис. мет.

Фоновиди АХЗЕР

1966, 6 790-91

AsH₃

Morehouse R. L.,
Christiansen J. J.
Gordy W.

1966

J. Chem. Phys. 45, n5, 1747.

ЭТР свободных радикалов,
захваченных в полимере
матрицы при низких
температурах (См. РНЗ)

AsH₃ (v:) ¹³
Capped the R.L.,

XIII 1632 1967

Dissert. Absbr., 1967 B27(11), 4081

~~Far infrared~~ ~~ab~~
High resolution infrared spectrum
of arsine.

12. (⊕)



CA 1967, 520, 953.50°

1967

AsH₃

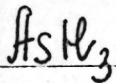
95350j High resolution infrared spectrum of arsine. Peter Kin-Liang Yin (Ohio State Univ., Columbus). *Diss. Abstr. B* 27(II), 4068(1967)(Eng). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-15,159, 187 pp. SNDC

uk.chem

buconno

payperenn

C. A: 1967. 67. 20



1887
Koeppel G. W., et al.

J. Amer. Chem. Soc., 89,
n 14, 3396

Барьеры инверсии пирамидальных молекул типа XH_3 и родственных плоских молекул, содержащих группу XH .

(см. CH_3^-)

Vj (3, ye $y = N, P, As, Pb, Sb, Bi$ 1964
- $X = H, F, Cl, CH_3, C \equiv CH$)

Smit W. M. H., Maas J. H. Van der
Spectrochim. acta, 1964, A23,
N8, 2453-55

XIII 936

сумма

px 1968

40

Chem. work (X_2O , X_2S , X_2Se , SO_2 , 1967
XT 2364 NO_2 , ClO_2 , NH_2 , PX_3 ,
as X_3 , $Se X_3$, type $X = H, D, T$)

Strey G.,

J. Molec. Spectrosc., 1967, 24,
N1, 87-99

Extremal properties of force
constants Part I. no (P)

pp 68

Baird

1968

As H3

Nielsen H.H.

Rao K. N.

Франца
Стар-ро
Новое

U.S. Govt. Res. Dev -
top Rep, 1969, 69,
19, 75

(see 102)!!!

As H_3

(D, T-замес.)

ампл.
колеб.

Rao B. P., Ramma M. V. 1968

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 6, № 7, 339.

Средние амплитуды
колебаний: микровол-
новые молекулы
мина XAF_2 .

(см. NH_3) III

X-4505-BP

1968

AsH₃ exp. (ze, Vi)

Roy R.S., Proc. Phys. Soc.
(L), At. Mol. Phys. [2],
1968, 1(2), 320-2

AsH₃

1968

(75823v) Vibration-rotation bands of AsH₃ in the 2- μ region. Yin, Peter K. L. (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). NASA Contract. Rep. 1968, NASA-CR-95985, 22 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From *Sci. Tech. Aerosp. Rep.* 1968, 6(19), 3227. The vibration-rotation bands of AsH₃ in the 2- μ region were analyzed. The resonance effect, esp. the ν_1 and the ν_3 bands for the K-type doubling and the giant l-type doubling in the 4- μ regions, are described briefly. Some new combination difference relations in obtaining ground state consts. from a perpendicular band are presented.

TCSL

ν_i

u.u.

C.A. 1969. 71. 16

cur. no. (NH₃, PH₃, AsH₃, SbH₃; ND₃, 11969
PD₃, AsD₃, SbD₃, NHF₂, NDF₂, 13
NF₃, PF₃, AsF₃, SbF₃; NCl₃, PCl₃, AsCl₃, SbCl₃,
NBr₃, PBr₃, AsBr₃, SbBr₃, NI₃; PI₃, AsI₃, SbI₃)
King Shin-Tung, Overend J. XIII 330

J. Phys. Chem., 1969, 73, v2, 406-412 (univ.)
The importance of lone-pair electrons
in the intramolecular potential func-
tion of group V hydrides and trihalides

Pu Xun. 1969, 24555- 10 10

ASH₃

1969

Kojko M.S.,
Beers I.

г.р. н.о.с.и.

г. Res. Nat. Beer.

Stand., A 43, N2, 233.

● (Cu: H₂O) III

XI 416

1969

As H₃ u gp. (corr. not.)

Pfeiffer et al.,

J. Molec. Spectrosc., 1969,

31, v2, 181-95

10

лсгб р.к

(Синтез XV_2Z H, D, T - замещенные) 1969

As H_3

Ramaswamy K.,
Swaminathan S.

Vi

Spectrosc. Mol., 18 (202), 7.

(см. NH_3) III

1969

M. n. (NH_3 , ND_3 , NT_3 , PD_3 , PT_3 ,
 AsH_3 , AsD_3 , AsT_3 , SbH_3 , SbD_3 , SbT_3)

Ramaswamy K., Swaminathan S. 13
XIII 531

Austral. J. Chem., 1969, 22, n 2, 291-297 (austr.)

Molecular constants of group
V hydrides by Green's function
analysis.

Puxon, 1969, 19689

10

15

As H_3

M.W.

1869
11/11

1969

10228h Effect of accidental Coriolis-type resonance on the infrared spectra of arsine. Yin, Peter K. L.; Rao, K. Narahari (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1969, 29(3), 486-9 (Eng). The ν_4 band of AsH_3 did not show the doubling of the type observed in the PH_3 spectra. However, doubling has been clearly observed in several of the $^{PP}(J, K = 3)$ and $^{PR}(J, K = 3)$ lines of the ν_3 band. For a particular J , the splittings in the $^{PP}(J, K = 3)$ and $^{PR}(J-2, K = 3)$ should have the same values. The energy level diagram for $J = 5$ illustrates this. Splittings of 0.61, 0.83, and 0.99 cm^{-1} were also measured; resp., in the $^{PP}(12, 3)$, $^{PP}(13, 3)$ and $^{PP}(14, 3)$ transitions. Owing to the symmetry and the $K = 0$ level in the ground state of the AsH_3 mol., only 1 of the components of the l -doublets, for the $^{RR}(J, 0)$ and $^{RP}(J, 0)$ transitions is observed. The shifts are identical for the $^{RR}(J, 0)$ and $^{RP}(J + 2, 0)$ transitions. The mol. consts. for AsH_3 obtained from the anal. of all the 4 fundamentals are given. Since PP , PR , RP , and RR transitions have been observed in the perpendicular bands, ground state consts. can be obtained from ground state combination difference relations. The ground state consts. obtained from ν_2 and ν_3 bands exhibit good agreement. DWJN

C.A. 1969. 70. 24

AsH_3

21 Б275
1969
ХИ

21 Б275. Эффект случайного кориолисова резонанса в инфракрасных спектрах арсина (AsH_3). Yin Peter K. L., Rao K. Narahari. Effect of accidental Coriolis-type resonance on the infrared spectra of arsine (AsH_3). «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 29, № 3, 486—489 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения газ. арсина в области основных колебаний молекулы AsH_3 на спектрометре с высоким разрешением (до $0,07\text{ см}^{-1}$). Определены молек. постоянные, такие как частоты чисто колебательных переходов, вращательные постоянные, постоянные, колебательно-вращательного и кориолисова взаимодействия. Обнаружено расщепление отдельных линий перпендикулярной полосы дважды вырожденного колебания ν_3 , отнесенное авторами к кориолисову взаимодействию возбужденных уровней ν_1 и ν_3 . Расщепления линий полосы ν_4 не обнаружено.

М. В. Тонков

Х. 1969. 21

ASH₃ (Di, mon. room) } 3 1969

Via P.R. 2. XIII 1314

NASA Contract Rep. 1968, NASA-CR
- 95985, 22pp

Vibration-rotation bands of
ASH₃ in the 2-μ region.

10

5
(φ)

CH, 1969, 4, 116, 45823

As H₃

Branton G. R.

1970

et al.

Chem. Phys. Lett., 5(1),
1

g

(Cu. PM₃) III

AsH₃;

AsD₃

сп-иле
потенц.
мерами

Freeman D.E. 1970

Z. Naturforsch.,

1970, A25, 2, 217

● (Cu. CH₄)III

XI - 1092

1970

Naerim & E (HF, HCl, HBr, HI, H₂O, H₂S,
H₂Se, H₂Te, NH₃, PH₃, AsH₃, SbH₃, CH₄,
SiH₄, GeH₄, SnH₄, NaH; BeH₂)

Macraodt WC,

Molec Phys, 1970, 18, No. 697-709

PLH Jun 1970, 21538

MO

GaF, GaH₃, GeH₄, AsH₃, H₂Se (кв. нек. парем) 1970

Stevenson P.E., Lipscomb W.N. ^{15 14}
XII 189 1213

J. Chem. Phys., 1970, 52, N°10, 5343-53
(англ.)

Molecular SCF calculations for
GaF, GaH₃, GeH₄, AsH₃, and H₂Se.

12

⊕

PA 1970.73.1418598t

14
H₂, PH₃, ASH₃, HD, D₂ (u.n., I) 1113 x 1971
2963

Cornford A.B., Frost D.C., McDowell C.A.,
Ragle J.L., Stenhouse A.I.,

Adv. Mass Spectrom. Vol. 5, London,
1971, 105-107. Discuss., 107 (and)

The photo-electron spectra of
some small molecules.

Proc Phys, 1972, 8D374

to 545

AsH₃
SbH₃

Donovan R. F.
Strachan. P.

1971

Trans. Faraday Soc.,
67(12), 3407.

unin.
photos

(Cu. As₂) III

As⁷⁵H₃

15 B223. Микроволновые спектры и молекулярные константы арсина и стибина. Helminge Paul, Beeson Edward L., Jr, Gordy Walter. Microwave spectra and molecular constants of arsine and stibine. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 1, 122—126 (англ.)

1971

Исследованы МВ-вращательные спектры молекул As⁷⁵H₃ (I) ($0 < J < 2$, $\sim 224\,890 - 450\,000$ МГц), As⁷⁵D₃ (II) ($0 < J < 3$, $\sim 114\,900 - 345\,000$ МГц), Sb¹²¹H₃ (III), Sb¹²³H₃ (IV) (для обоих $0 < J < 2$, $\sim 176\,000 - 352\,200$ МГц), Sb¹²¹D₃ (V) и Sb¹²³D₃ (VI) (для обоих $0 < J < 2$, $\sim 89\,300 - 179\,000$ МГц) в основном колебательном состоянии. Для всех исследованных вращательных переходов I—VI изучена сверхтонкая квадрупольная структура. Приведены определенные молек. постоянные I—VI: вращательная постоянная $B_0 = 112470,59 \pm 0,03$ (I), $57477,60 \pm 0,02$ (II), $88038,99 \pm 0,03$ (III), $88022,51 \pm 0,03$ (IV), $44694,92 \pm 0,03$ (V), $44678,81 \pm 0,03$ МГц (VI), постоянные центробежного искажения $D_J = 2,925 \pm 0,003$ (I), $0,741 \pm 0,002$ (II), $1,884 \pm 0,004$

III

845

BR

ном.

струк.

М.И.

X.1971.15

+1



(III, IV), $0,473 \pm 0,004$ (V), $0,476 \pm 0,004$ Мгц (VI) и
 $D_{JK} = -3,718 \pm 0,004$ (I), $-0,928 \pm 0,003$ (II), $-2,394 \pm$
 $\pm 0,015$ (III), $-2,365 \pm 0,015$ (IV), $-0,598 \pm 0,009$ (V),
 $-0,589 \pm 0,010$ Мгц (VI), постоянная ядерного квадра-
 польного взаимодействия $eqQ = -162,63 \pm 0,03$ (I),
 $-164,75 \pm 0,03$ (II), $460,31 \pm 10$ (III), $586,65 \pm 0,11$ (IV),
 $465,32 \pm 0,10$ (V), $593,06 \pm 0,11$ Мгц (VI), постоянные
 ядерного магнитного взаимодействия $C_N = 0,106 \pm 0,003$
 (I), $0,051 \pm 0,003$ (II), $0,245 \pm 0,006$ (III), $0,130 \pm 0,005$
 (IV), $0,127 \pm 0,006$ (V), $0,063 \pm 0,005$ Мгц (VI) и $C_K =$
 $= 0,028 \pm 0,014$ (I), $0,069 \pm 0,015$ (II), $0,247 \pm 0,030$ (III),
 $0,165 \pm 0,030$ (IV), $0,162 \pm 0,030$ (V), $0,044 \pm 0,030$ Мгц
 (VI). Для I и II определенные вращательные постоян-
 ные согласуются с ранее определенными структурными
 параметрами $d_{AsH} = 1,5192$, $d_{AsD} = 1,5145$ А, $\angle HAsH =$
 $= 91^\circ 50'$, $\angle DAsD = 91^\circ 30'$; для III—VI найденные зна-
 чения постоянных B_0 позволяют уточнить эффективную
 геометрич. структуру $d_{SbH} = 1,7102$, $d_{SbD} = 1,7075$ А,
 $\angle HSbH = \angle DSbD = 91^\circ 42'$. Приведены также геометрич.
 параметры III—VI, определенные методом изотопич.
 замещения по Костейну. А. П. Александров

As H₃

1981

7Д427. Микроволновые спектры и молекулярные постоянные арсина и стибина. Helminger Paul, Bee-son Edward L., Jr, Gordy Walter. Microwave spectra and molecular constants of arsine and stibine. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1971, 3, № 1, 122—126 (англ.)

Исследованы вращательные спектры изотопич. образцов молекул AsH₃ и SbH₃ в миллиметровой и субмиллиметровой областях спектра. Измерения проведены с помощью более чувствительного и точного спектрометра, чем в предыдущих работах (РЖФиз, 1956, № 7, 21045; 1957, № 1, 2501). Приведены значения вращательных постоянных, постоянных центробежного искажения и постоянных ядерного квадрупольного и ядерного магн. взаимодействия. Г. П.

М.И.

оп. 1981.

79

(+1)

✕

ВФ-845-111

AS H3 ugr. 1971
Price W.C., Potter A.W. 1971
X12765 A-1884

Углублен змеенов 11, 12
IV - VII зречен (I 13, 14)

3rd. Int. Conf. Vacuum Ultra-
violet Radiat. Phys., Tokyo,
1971, Conf. dig., Tokyo, 1971,
1pA2-2/1-1pA2-2/4

10 (cp) cu apu 1997Z

AsH₃

BQ-853-XIII

1971

36556c Analysis of Coriolis perturbations in the high-resolution infrared spectra of arsine (AsH₃). Sarka, Kamil; Papousek, Dusan; Rao, K. Narahari (Inst. Inorg. Chem., Slov. Acad. Sci., Bratislava, Czech.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 37(1), 1-19 (Eng). Numerical methods for the anal. of high-resoln. ir spectra of symmetric top mols. perturbed by Coriolis interactions between degenerate and nondegenerate vibrational levels are discussed in the 2nd order of approxn. Application to the high-resoln. ir spectra of the AsH₃ mol. in the region of the fundamentals, ν_1 , ν_3 and ν_2 , ν_4 yields considerably improved values of the mol. consts. of AsH₃, including the band origins, rotational consts., Coriolis coupling consts., centrifugal distortion consts., and the parameter of the K-type doubling effect. RCKP

вои.
анал.
взвеш., вращ.

C.A. 1971. 44. 8

AsH₃

ВФ - 853 - XIII

1971

Анализ
ИК-спектра

✓ 8 Д249. Анализ кориолисовых возмущений в инфракрасном спектре высокого разрешения арсина (AsH₃). Sarka Kamil, Pároušek Dusan, Rao K. Narahari. Analysis of Coriolis perturbations in the high-resolution infrared spectra of arsine (AsH₃). «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 1, 1—19 (англ)

Рассмотрено кориолисово взаимодействие 1-го и 2-го порядков в молекулах с симметрией C_{3v}. Проанализировано выражение оператора кориолисова взаимодействия $p_x P_x + p_y P_y$, получены ф-лы для матричных элементов этого оператора и вычислена кориолисова поправка 2-го порядка к колебательно-вращательной энергии (КВЭ). Для первых возбужденных колебательных уров-

Ф. 1971. 82

ней типа A_1 и E получены симметризованные выражения волн. ф-ций и матричных элементов. Выведена ф-ла для следа матрицы КВЭ. Составлена программа для диагонализации матрицы КВЭ итерационным методом наименьших квадратов. Результаты применены к анализу ИК-спектра с разрешением $\sim 0,1 \text{ см}^{-1}$ молекулы AsH_3 и для всех полос определены значения вращательных, центробежных и кориолисовых постоянных. М. Р. Алиев.

AsH₃

14 Б64. Анализ кориолисовых возмущений в инфракрасном спектре высокого разрешения арсина (AsH₃). Sarka Kamil, Papoušek Dušan, Rao K. N. Hari. Analysis of Coriolis perturbations in the high-resolution infrared spectra of arsine (AsH₃). «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 1, 1—19 (англ.)

1971

М. П.

Рассмотрено кориолисово взаимодействие 1-го и 2-го порядка в молекулах симметрии C_{3v}. Проанализировано выражение оператора кориолисова взаимодействия $p_x P_x + p_y P_y$, получены ф-лы для матричных элементов этого оператора и вычислена кориолисова поправка 2-го порядка к колебательно-вращательной энергии (КВЭ). Для первых возбужденных колебательных уровней типа A₁ и E получены симметризованные выражения волновых функций и матричных элементов. Результаты применены к анализу ИК-спектра (с разрешением ~0,1 см⁻¹) молекулы AsH₃; для всех полос определены значения вращательных, центробежных и кориолисовых постоянных.

М. Р. Алнев

X. 1971. 14

H_2O , H_2S , H_2Se , H_2Te , H_3N , H_3P ,
 H_3As , H_3Sb (I, u.n.) $\bar{X}$ 292, 1972

Potts A.W., Price W.C.,
Proc. Roy. Soc. London,
1972, A326, N1565, 181-97

to cp

136

16 Б73. Аномальные значения вращательных постоянных параллельных полос, возмущенных кориолисовым резонансом. Sarka Kamil. Anomalous values of the rotational constants of the parallel bands perturbed by Coriolis resonance. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 41, № 2, 233—239 (англ.)

Рассмотрено влияние кориолисова взаимодействия на вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения молекул типа симм. волчка в невырожденных колебательных состояниях. Методом возмущений во 2-м приближении получены ф-лы для поправок кориолисова взаимодействия к вращательным и центробежным постоянным, к-рые использованы для анализа данных по ИК-спектрам молекул AsH_3 и CH_3D .

М. Р. Алиев

(+1) ☒

X. 1972. 16

AsH₃

XII-2069

1972

CH₃D

(Di)

(un.)

C65617 Anomalous values of the rotational constants of the parallel bands perturbed by Coriolis resonance. Sarka, Kamil (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(2), 233-9 (Eng). Expressions for the anomalous values of the effective rotational and distortion consts. of parallel fundamental bands perturbed by 1st-order Coriolis resonance are derived. Relations between the values of these consts. and the type of interaction involved are summarized. The possibility of detg. interaction parameters from the consts. α_n^B and α_n^C are discussed and examples of Coriolis resonance between the ν_2, ν_4 bands of AsH₃ and ν_3, ν_5, ν_6 bands of CH₃D are presented.

(+1) ~~1~~

C. A. 1972. 46. 12

Fe_3 ; VO_3 ; Fe_2H_2 ; UCl_3 ; VBr_3 ; P_5H_3
 I_3 ; As_3 ; PH_3 ; AsH_3 ; SbH_3 (centrifuge)
N^o 3790

Margittai I.,
Majlhoff F.C.; Chem. Weekbl.,
1973, 69, N27, 9-10

to (9)

ca 735

1973

StS H₃

Пономарёв Ю.И.,

Опт. спектрск., 1973,

35, №5, 828-831.

(См. л. 105)

(Евст. H₂O, III)

As H₃ (u.n.)

XIII 2283

1972
(1973)

Popoušek D.,

Scripta Fac. sci natur. UJEP brno.

Chem., 1972 (1973), 2, v3, 159-164 (curr).

High-resolution infrared spectra and
the Coriolis interaction in axially sym-
metric molecules.

PuXun, 1973, 235311

10

XIII - 2486

40718.1271

40892

02

1974

TC, Ph, Ch, MGU

AsH₃

2249

молек. спектр

Chu F.Y., Oka T. "Forbidden" rotational spectra of phosphine and arsine.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 11, 4612-4618

(англ.)

(см. PH₃; III)

0156 мк; 1

130

135

0148

ВИНИТИ

50313.2482

Ph, TC

34469 / Vi; сшл. нос 1974
AsH₃ / корнал. нос / #13-8294

Padmaja K.M., Aruldhas G.

Parametric study of potential energy
distribution. "Indian J. Pure and
Appl. Phys.", 1974, 12, N 9, 658-660

(англ.)

0322 пик

298

U3 14

ВИНИТИ

AsH_3

AsH_3^-

$A(H^+)$

(Do)

24 Б866. Изучение при помощи спектроскопии ионно-циклотронного резонанса кислотности, основности и ионно-молекулярных реакций арсина в газовой фазе. Wyatt R. H., Holtz D., McMahon T. B., Beauchamp J. L. Acidity, basicity, and ion-molecule reactions of arsine in the gas phase by ion cyclotron resonance spectroscopy. «Inorg. Chem.», 1974, 13, № 6, 1511—1517 (англ.) (1974)

Масс-спектрометрич. методом простого и двойного ионно-циклотронного резонанса изучены ионно-молек. р-ции в чистом арсине и в бинарных смесях AsH_3 с PH_3 , H_2S , CH_3CHCH_2 , CH_3OH , CH_3Cl и C_2H_5ONO . В чистом AsH_3 при энергии ионизирующих электронов 70 эв происходят р-ции конденсации с образованием ионов с 2 и 3 атомами As. Из анализа ионных продуктов р-ций в бинарных смесях определено сродство к протону AsH_3 и AsH_3^- , равное 175 ± 5 и 360 ± 10 ккал/моль соотв., и сродство AsH_3 к метильному катиону > 66 ккал/моль. Рассчитана энергия диссоциации $D(H_2As-H)$ (79 ккал/моль), к-рая несколько меньше энергии связи $As-H$ (71,2 ккал/моль). В ряду PH_3 , AsH_3 разность между величинами сродства к протону и водороду постоянна и равна 80 ккал/моль. Г. В. Карпов

2456

XII

(Do)

(+1)

☑

Р. 1974. №24

AsH₃

Anantha krishnan T. R. 1975

"Austrai J. Chem"

1975, 28, n12, 2727-2730

(anal)

(сн CH₄; III)

опредм.
поправок
автоматичн.

$[NiF_6]^{4-}$, $[CuCl_4]^{2-}$, VCl_4 , $TiCl_4$, 1975
y-8960
 GeH_3F , AsH_3 , $Se(CH_3)_2$, CH_3Br ,
(Кб. мех. пахем), XIII-3164
Borza M., Maraschini F.,
Flamini A., Semprini E.,
J. Chem. Soc., Dalton Trans., 1975,
(7), 596-8.

Semiempirical calculations
on the electronic structure and...
C.A. 1975, 83 v16. 137173s

AsH₃

1975

Кулаков С. И. и др

Тр. по химии и хим.
технол. (горючий), 1975,
вып. 2(41) в-7.

(Vi, u. u.).

(или BeH₄) III

51111.8701
Ch, TC

40771
AsH₃

1975
3454

Levin Charles C.

A qualitative molecular orbital picture of electronegativity effects on XH₃ inversion barriers.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 20,
5649-5655 (англ.)

0484

471 472

476

ВИНИТИ

X4-9276

1975

AsH₃(v_i)

82-82-117

177629f Infrared measurements of arsine. the ν_1 and ν_3 bands, perturbation-allowed transitions, equilibrium structure. Eson, William B.; Maki, Arthur G.; Sams, Robert L. (Natl. Bur. Stand., Washington, D. C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 54(1-3), 252-70 (Eng). High resolu. ir measurements are reported for AsH₃ from 2260 to 1960 cm⁻¹. Numerous perturbation-allowed transitions were found and are used to det. the Coriolis const. Ten ground state rotational consts. are detd. including one that describes the splitting of the $k = 3$ levels. A complete equil. structure is detd. A total of 26 upper state consts. are detd. by means of a computer program which simultaneously fits both ν_1 and ν_3 bands and includes many off-diagonal matrix elements. This anal. will fit transitions through $J = K = 12$ to within exptl. error, but it is concluded that to fit higher rotational transitions the perturbing effects of ν_2 must be taken into account explicitly.

C. A. 1975. 82. N26

*4-9276

1975

AsH₃

м.п.

8918-3138
XIII - III

23 Б322. Измерение инфракрасного спектра арсина: полосы ν_1 и ν_3 , переходы, разрешенные возмущением и равновесная структура. Olson Wm. Bruce, Maki Arthur G., Sams Robert L. Infrared measurements on arsine: ν_1 and ν_3 bands, perturbation-allowed transitions, equilibrium structure. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 252—270 (англ.)

С разрешением $\approx 0,03 \text{ см}^{-1}$ измерен ИК-спектр поглощения молекулы AsH₃ в области 2260—1960 см^{-1} . Выполнен анализ вращательной структуры полос ν_1 и ν_3 . Обнаружены линии запрещенных переходов с $\Delta|K-l| = \pm 3$, разрешаемых за счет колебательно-вращательного взаимодействия. По значениям 470 комбинаций с $\Delta|K-l| = 0$, 357 комбинаций $\Delta|K-l| = \pm 3$, 3-х комбина-

X 1975 № 23

ций частот с $\Delta|K-l|=\pm 6$ и частот 14 МВ-линий вычислены значения вращательных, центробежных и квадрупольной констант для основного колебательного состояния AsH_3 : $B_0=112470,56$, $C_0=104884,76$ Мгц; $D_J=2,9204$, $D_{JK}=-3,7131$, $D_K=3,3555$ Мгц, $H_J=0,2951$, $H_{JK}=-1,297$, $H_{KJ}=1,822$, $H_K=-0,605$ Кгц, $eqQ=-162,67$ Мгц. Анализ вращательной структуры возбужденных состояний с $v_1=1$ и $v_3=1$ выполнен с учетом кориолисова резонанса между этими уровнями, а также l -удвоения и l -резонанса, и определены значения 26 параметров возбужденных состояний, включая резонансные параметры. Отмечено, что величина удвоения уровней с $K=\pm 3$ для AsH_3 выше, чем для PH_3 .

М. Р. Алиев

XU-9276

1975

AsH₃

11 Д408. Исследование ИК-спектров арсина: полосы ν_1 и ν_3 , разрешенные возмущениями переходы, равновесная структура. Olson Wm. Bruce, Maki Arthur G., Sams Robert L. Infrared measurements on arsine: ν_1 and ν_3 bands, perturbation-allowed transitions, equilibrium structure. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, № 1—3, 252—270 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения газообразного AsH₃ при давл. 0,3 мм рт. ст. с разрешением 0,03 см⁻¹ в области 1960—2260 см⁻¹. Приведены частоты наблюдаемых колебательно-вращательных линий полос ν_1 и ν_3 , определенные с точностью $2 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹. По частотам переходов $\Delta|k-l| = \pm 3$, разрешенных за счет внутримолекулярных возмущений, и с использованием микроволн. данных вычислены вращательные постоянные основного состояния молекулы и определены ее геометрич. параметры. При анализе состояний ν_1 и ν_3 приняты во внимание резонанс Ферми, кориолисово взаимодействие, l- и k-удвоение. Молекулярные постоянные для возбужденных состояний получены при одновременном анализе изученных полос. Библ. 13. М. В. Тонков

J. i. m. n

Ф. 1975
N 11

XIII-2138

50905.1303

Ph, TC, MGU

34469

ASH₃

1975

* 4-10011

Ramaswamy K., Sridharan T. Unique force fields of some XY₃-type molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1975, 13, N2, 98-100. (англ.)

0444 0000

(см. NH₃, III) 460

414 414

ВИНИТИ

As H₃

Ramaswamy R.

1975

comb.
noem.

"Indian J. Pure and Appl.
Phys" 1975, 13, N2, 98-100
(aum)

(cu NH₃; III)



As H₃

As D₃

As T₃

еи. ност.
ср. аи. н.
каи.

Thiyana Samandan P
... Mohan S.

1975

Indian J. Phys 1975,
49(11) 808-17 (eng)

(see NH₃; III)

Ommeck 4793

AsH₃

1976

Bohlig Heinz.

(coll. nos.)

Z. Chem. 1976. 10, Nr.,
430-5.



(coll. H₂O; III)

60312.8779
Ch, Ph, TC, MGU

AsH_3 41125
(и. н.)

1976

арт. 4396

Duncan J. Lindsay.

The centrifugal distortion constant D_K
of symmetric top molecules.

"J. Mol. Spectrosc.", 1976, 60, N 1-3,
225-238 (англ.)

(BF_3 ; III)

646-658

0678
ВИНИТИ

00400.7317
Ch, Ph, TC

29854
As H3 (7) * 15-12413
1976

Findlay Robert N.

Electronic structure of some simple
third-row hydrides and fluorides.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1976, Part 2,
72, N 2, 388-397 (англ.)

0593 англ

569 576

585

ВИНИТИ

Jan 528

AsH₃

GeH₄

7 Д179. О применении теории характеристических частот к расчету колебаний молекул XY_n с легкими концевыми атомами. Ушанова Н. И., Александровская А. М., Годнев И. Н. «Ж. прикл. спектроскопии», 1976, 24, № 2, 329—332

Рассмотрено применение теории характеристич. частот к молекулам вида XY_n с легкими концевыми атомами. На основании вычисления коэф. нехарактеристичности α и β_{III} молекул XY₂ (симметрия C_{2v}), XY₃ (симметрия D_{3h}), XY₃ (симметрия C_{3v}), XY₄ (симметрия T_d), XY₆ (симметрия O_h) при выделении валентных и угловых координат найдена общая логич. схема существования приближенных характеристичностей и объяснена хорошая применимость ф-л вида K_{III(макс)} для вычисления силовых постоянных. Примененная методика иллюстрируется на примере AsH₃ и GeH₄.

Автореферат.

(+)

ф 1976 N 7

Д

(+)

Ешубу

1976

AsH₃

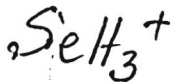
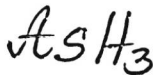
1974

Bhattacharyya S. P. et al
J. Phys. Chem. 1974, 78, 16,
1602-1604 (anal.)

Y. M. N.

cu Fe - III

1974



Барьер
инверсии

(41) IV

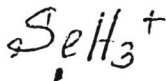
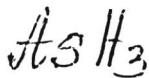
Х. №, 1978

6 Б50. Барьеры инверсии в AsH_3 и SeH_3^+ . Dixon David A., Marunick Dennis S. Inversion Barriers of AsH_3 and SeH_3^+ . «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 18, 6101—6103 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока рассчитаны энергии плоской и пирамидальной конфигураций молекулы AsH_3 и иона SeH_3^+ , после чего по разностям вычисл. энергий оценены барьеры инверсии этих систем. В расчетах использованы 2 базиса орбиталей слейтеровского типа: миним. базис и расширенный базис двухэкспонентного типа, дополненный поляризац. $3d$ - и $4d$ -АО на As и Se, а также $2s$ - и $2p$ -АО на H. Барьер инверсии AsH_3 получен равным 46,4 ккал/моль в расширенном базисе и 43,8 — в миним. базисе. Для SeH_3^+ соотв-щие величины равны 29,8 и 35,3. Обсуждены лит. данные по барьерам инверсии молекул типа AH_3 и ионов AH_3^+ .

М. Е. Ерлыкина

1977



Uo

 ich. allx.
 fuerer

ST: 141636v Inversion barriers of arsine and trihydroselenium(1+) ion. Dixon, David A.; Marynick, Dennis S. (Chem. Dep., Harvard Univ., Cambridge, Mass.), *J. Am. Chem. Soc.* 1977, 99(18), 6101-3 (Eng). Ab-initio SCF calcns. using extended basis sets were performed on the pyramidal and planar geometries of AsH_3 and SeH_3^+ . The inversion barriers, which have not been detd. exptl., are calcd. to be 46 kcal/mole for

AsH_3 and 30 kcal/mole for SeH_3^+ . Electron d. maps for the non-bonding orbital of AsH_3 are presented. Optimized geometries and valence shell exponents for both forms of each mol. are presented at the min. basis set level. The inversion barriers for AsH_3 and SeH_3^+ using min. basis sets are calcd. to be 44 and 35 kcal/mole, resp.

C. A. 1977, 87 N 18

 (+) 

AsH₃

Om. 18718

1977

GeH₃

89: 189761a Mass spectra of monogermane and arsine. Gaivoronskii, P. E.; Chernikovich, M. P. (USSR). *Poluch. Anal. Chist. Veshchestv* 1977, 2, 69-70 (Russ). A comparison was made of the mass spectra for AsH₃ and GeH₃ from spark and electron-impact mass spectrometers. The ions formed in both cases are the same and ionization and dissociation take place in both cases by a single mechanism which is due to the interaction of the mols. with the electron beam.

mass -

- chem. st. exp.

(+1) 

P. A. 1978 - 89 v22

AsH₃

Orim 5337

1977

Marynick D.S., et al.

(рецепт
от. 06/30
кб. дек. прет.)

Faraday
Soc. 1977,

Discuss. Chem.
No. 47-8.

(к. 01/7-80)

AsH₃
AsD₃

Ommick 5510

1977

K. V. Siva Sarma

et al.

pacem
Kopuol:
noct.

Indian J. Pure
and Appl. Phys.
1974, 15, 307-308

As H₃.

1977

Siva Sarma K.V. et al.

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 1977, 15, N3, 207-208.
(ann.)

ex. NH₃ - III

AsH₃

1977

Simons G., et al.

кометр.
молулы

J. Chem. Phys;
1977, 66 (6), 2457-61.

●
(см. CuH; III)

AsH₃

Shimoda Koichi

1977

"3. Int. Tag., 28.3-1.4.", 1977,
"Dresden. Laser und ihre
umarr. Anwend.", S. 1, S. a., 4-6.
соединен.

III
(ср. NH₃)

A₃ H₃

Timoshinin V.S.

1977

сущ. нем.

Изв. Vyssh. Uchebn.

Zaved. Fiz. 1977, 20(4)

сущ. н.

154 - (russ)

● (сущ PH₃; III)

AsH₃

1977.

Тимошенко В. С. и др.

изв. гос. в ВУМШ
N 56-77.

(см. подл.)



(см. PH₃; III)

70518.341

Ch, TC

U.N. 63253

AsH₃, AsD₃, AsT₃

1977

*US-18254

Thirugnanasambandam P., Gna-
nasekaran S. Some molecular constants
of group V hydrides. "Bull. Soc. chim.
belg.", 1977, 86, № 1-2, 11-15
(англ.)

(см. NH₃; III) 087.7. РЖХ

836 839

868

ВИНИТИ

As H₃

Vallamattam Annie-¹⁹⁷⁷

cur. no. ex.

Indian J. Pure Appl

Phys. 1977, 15(1) 49-51

(eng)

● (cur NH₃; 101)

1978

AsH₃

10 Д381. «Запрещенные» переходы в арсине в миллиметровом диапазоне. Helms David A., Gordy Walter. «Forbidden» millimeter-wave transitions in arsine «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 3, 473-481 (англ.)

Исследованы запрещенные вращательные переходы, разрешаемые за счет центробежного искажения, в микроволн. спектре молекулы AsH₃ вблизи 20, 100, 150, 225 и 450 Ггц. Использован спектрометр со штарковской модуляцией с чувствительностью $4 \cdot 10^{-10}$ см⁻¹.

М. П.

Геометрия

Идентифицирована центробежная K-структура и квадрупольная сверхтонкая структура линий вращательных переходов с $F \rightarrow F$, $K = \pm 4 \rightarrow \pm 1$ и $F \rightarrow F$, $K = \pm 5 \rightarrow \pm 2$.

Определены значения вращательных и квадратичных центробежных постоянных ($B_0 = 112470,597$, $C_0 = 104884,665$; $D_F = 2,9257$, $D_{FK} = -3,7164$, $D_K = 3,4126$ Мгц), ряда секстичных и октичных центробежных постоянных, а также постоянных квадрупольной связи ядра мышьяка и спин-вращательного взаимодействия ядер. Для эффективных структурных параметров получено: As—H = 1,520138 Å, H—As—H = 91,9758°.

М. Р. Алиев

сп. 1978.11.10

1978

AsH₃M. B.
Crenk

88: 112912x "Forbidden" millimeter-wave transitions in arsine. Helms, David A.; Gordy, Walter (Dep. Phys., Duke Univ., Durham, N. C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 69(3), 473-81 (Eng). A millimeter-wave spectrometer having a sensitivity of 4×10^{-10} cm⁻¹ in the 2-mm region was used for observation of the forbidden transitions $J \rightarrow J, K = \pm 4 \rightarrow \pm 1$ and $J \rightarrow J, K = \pm 5 \rightarrow \pm 2$ in AsH₃. A comprehensive computer anal. was made of the frequencies together with available microwave frequencies of other transitions. This anal. provides accurate values of the rotational consts., nuclear quadrupole couplings, and effective structural parameters of the mol. The spectral consts. B_0 and C_3 (in MHz) are 112,470.597 and 104,884.665, resp.

C.T., 1978, 88, N16

AsH₃

М. Н.

X 1978, N 21

21 Б265. «Запрещенные» переходы в арсине в мил-
лиметровой области. Helms David A., Gordy 1978
Walter. «Forbidden» Millimeter-wave transitions in
arsine. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 3, 473—481
(англ.)

На миллиметровом спектрометре с чувствительностью $4 \cdot 10^{-10} \text{ см}^{-1}$ в области 144 ГГц при постоянной времени 1 сек. измерено 27 «запрещенных» переходов $J \rightarrow J$, $K = \pm 4 \rightarrow \pm 1$ и 36 «запрещенных» переходов $J \rightarrow J$, $K = \pm 5 \rightarrow \pm 2$ в AsH₃. «Запрещенные» переходы в симм. молекуле индуцированы центробежным искажением. На основе полученных данных определены вращательные постоянные (МГц) $B_0 = 112470,597 (30)$, $C_0 = 104884,665 (43)$, постоянные центробежного искажения, постоянная ядерного квадрупольного взаимодействия (МГц) $(eQq) = -162,58 (11)$ и наведенный дипольный момент, перпендикулярный к оси симметрии молекулы, равный $3,938 (17) \cdot 10^{-5} D$. На основе полученных данных вычислены структурные параметры AsH₃ $r_0 = 1,5201381 (2) \text{ \AA}$, $\alpha_0 = 91,975798 (6)^\circ$. Стандартное отклонение для структурных параметров отражает неопределенность в значениях B_0 и C_0 и не учитывает возможные ошибки в определении абс. величин, к-рые зависят от постоянной Планка. С. Н. Мурзин

[omnua 6516a]

1978

AsH₃

Marynick D.S., Dixon D.A.

(Uo)

J. Chem. Phys. 1978, 69(1),
498 - 500.

A5H3

(Om. 6316, XIII - 4302) 1978

Ramaswamy K., Palaniap-
pan P.R.,

рацем
сп. кварц-
анниuity.
конфат.

Acta phys. pol. 1978,
A53, N 4, 613-618

ASH₃

ommuc 7528 | 1978

Dr,

Ramaswamy K,
et al.

paenjeet,
amocit,
nomeris-
meru

Acta phys. polon.,
1978, A53(5)
733-36

ASH₃

Qmum 5773

1978

Schapfenberg P.

Theor. chin. acta, 1978, 49,
115-22.

печер
павлов-
гемесерин

1979

АШЗ

Якубенко В. П., и др.

расчет
Сил. постр.

Док. ген. ВУЛСТУ
2 янв. 1979 г. N 21-79 Дел.
М. 1979.

(смет. № 5; III)

А8 Н3

1980

Лашенов В.Т.

Бразильская
политика
и потенциал
популяции

Докл. АН СССР, 1980,
254, №, 934-8.

СМ. NF3-Д

AsH₃

ommick 10437 1980

растет
рабуов,
нон.

Pietro W. J., et al

Inorg. Chem., 1980, 19,
n 8, 2225-29.

● (see K₂O)III

As M₃²

се̄се̄се̄ек 12815

1981

Bohm M. C., Gleiter R.

Theor. chim. acta, 1981,

59 (2), 153 - 179.

обзор,
теорет.
расчет
молекуляр.
орбиталей,
взаимодействия

AsH₃

1981

/ 96: 132402z: Broadening of arsenic trihydride rotational lines by gas pressure. Kazakov, V. P.; Krupnov, A. F.; Mel'nikov, A. A. (Inst. Prikl. Fiz., Gorkiy, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Radiofiz.* 1981, 24(11), 1410-12 (Russ). The collisional broadening of AsH₃ rotational lines was studied by microwave spectrometry of ground as well as $v_2 = 1$ and $v_4 = 1$ excited states at room temp. A linear decrease of linewidth was obsd. on increase of rotational quantum no. J .

MB check

@.A. 1982, 96, N16

AsH₃

Оттиск 14551 1981

9 Д454. Радиочастотная спектроскопия молекулы AsH₃ внутри резонатора лазера на CO₂—N₂O. Radiofrequency spectroscopy of AsH₃ inside a CO₂—N₂O laser cavity. Scappini F., Oka Takeshi. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, № 2, 390—398 (англ.)

Методом радиочастотной спектроскопии внутри лазерного резонатора исследована тонкая структура вращательных уровней основного и возбужденных колебательных состояний молекулы арсина. Идентифицированы линии переходов между компонентами квадрупольной сверхтонкой структуры ряда вращательных уровней колебательных состояний с $v_2=1$ и $v_4=1$, переходы между компонентами центробежного K -удвоения тех же состояний, а также запрещенных переходов с $\Delta_k=3$ полосы v_2 и с $\Delta|k-l|=3$ полосы v_4 . Определены значения постоянной квадрупольной связи $eqQ(As)$, параметров зависимости eqQ от F и K и постоянных спин-вращательного взаимодействия для состояний с $v=0$, $v_2=1$ и $v_4=1$. Обнаружены также двухфотонные лэмбовские провалы на полосе v_4 .

М. Р. Алиев

и, н.

Ф. 1981 №9

AsH₃

1982

97: 30547d Dependence of the shifts of molecular lines by the pressure of a gas on the quantum numbers J and K . Belov, S. P.; Kazakov, V. P.; Krupnov, A. F.; Mel'nikov, A. A.; Skvortsov, V. A. (Inst. Prikl. Fiz., Gorkiy, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Radiofiz.* 1982, 25(1), 118-21 (Russ). The sub-mm microwave study of the gas pressure effect on rotational lines of AsH₃ ($J = 0, 1, 2, 3$; $K = 0$) and PH₃ ($J = 0, 1, 2$; $K = 0, 1, 2$) showed that the shift decreases on increase of J and the decrease is more pronounced for the transitions with $K = 0$. The theor. anal. of the results based on the previously published (K., et al., 1980) theory of the effect gave very good agreement with exptl. data confirming the validity of the Stark mechanism for the effect as well as the hypothesis on the change of the mol. quantum state when the Stark shifts are comparable with the energy for the transition.

нб члкрп

✱

(H) PH₃

C.A. 1982, 97, N4

AsH_3

1982

Belov S. P., Kazakov V. P.
et al.

с. 11, J. Mol. Spectrosc.,
Спектр. 1982, 94, N2, 264-282.

(с.  NH₃; III)

AsH₃

Оттиск 14843

1982

2 Д424. Субмиллиметровый спектр и спектроскопические константы молекулы арсина в основном колебательном состоянии. Submillimeter spectrum and spectroscopic constants of the arsine molecule in the ground vibrational state. Burenin A. V., Kazakov V. P., Kurnov A. F., Mel'nikov A. A., Shapin S. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 94, № 2, 253—263 (англ.)

И. М. П.

На радиоспектрометре с акустич. детектором с чувствительностью до 10^{-9} см⁻¹ по коэф. поглощения в диапазоне 200—900 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы AsH₃. Идентифицированы линии 50 разре-

Ф. 1983, 18, № 2

шенных вращательных переходов R -ветви и ~~48~~ запрещенных вращательных переходов с $\Delta k=3$ в основном колебательном состоянии, а также ядерная сверхтонкая структура линий: точность измерения частот составляет 50—100 кГц для разрешенных и 300 кГц для запрещенных переходов. Измерены также уширение и сдвиг линий давлением: параметры уширения и сдвига составляют 3,4 и 0,15 МГц/мм рт. ст. ($J=1-0$) соответственно, причем параметр сдвига уменьшается с ростом J . Определены значения вращательных постоянных, постоянных кватертичного, секстичного и октичного центробежного искажения и постоянных квадрупольной связи и спин-вращательного взаимодействия ядра As.

М. Р. Алнев

AsH₃

Оттиск 14843

1982

3 Б276. Субмиллиметровый спектр и спектроскопические постоянные молекулы арсина в основном колебательном состоянии. Submillimeter spectrum and spectroscopic constants of the arsine molecule in the ground vibrational state. Burenin A. V., Kazakov V. P., Krupnov A. F., Mel'nikov A. A., Sharin S. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 94, № 2, 253—263 (англ.)

На МВ-спектрометре РАД со спец. системой для точных частотных измерений измерен в области частот 220—900 ГГц субмиллиметровый спектр арсина, AsH₃, в основном колебательном состоянии. Идентифицированы 51 разрешенный переход R-ветви ($J+1 \leftarrow J$, $K \leftarrow K$, $\Delta F=0$, ± 1) со значениями $J=0, 1, 2, 3$ и дополнительно 46 запрещенных переходов трех Q-ветвей ($J \leftarrow J$, $\Delta F=0$) для $|K|=4 \leftarrow 7, 5 \leftarrow 8, 6 \leftarrow 9$. Частоты разрешенных переходов измерены с точностью 50—100 кГц, запрещенных переходов — с точностью 300 кГц. Анализ спектра выполнен в приближении модели полужесткого симм. волчка с учетом центробежного искажения,

М.П.

X, 1983, 19, №3

К-удвоения и сверхтонкого расщепления из-за квадрупольного и магнитного взаимодействий. С учетом ранее опубликованных МВ-данных определены величины 17 спектроскопич. постоянных. Вращательные постоянные в основном состоянии равны (МГц): $B = 112470,61500(2340)$, $C = 104884,0805(1264)$. Для спектроскопич. постоянных вычислена корреляционная матрица. Полученные результаты согласуются с известными МВ-данными.

С. Н. Мурзин



AsH₃

Ommuck 14843

1982

97: 100988z Submillimeter spectrum and spectroscopic constants of the arsine molecule in the ground vibrational state. Burenin, A. V.; Kazakov, V. P.; Krupnov, A. F.; Mel'nikov, A. A.; Shapin, S. M. (Inst. Appl. Phys., Gorkiy, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1982, 94(2), 253-63 (Eng). The submillimeter spectrum of the arsine mol., AsH₃, of both the allowed R-branch transitions ($J + 1 \leftarrow J, J = 0, 1, 2, 3$) and forbidden transitions of the Q branches, $[K] = 4 \leftarrow 7, 5 \leftarrow 8, 6 \leftarrow 9$, is investigated in the frequency range from 220 to 900 GHz. Weak absorption lines were obsd. by using the spectrometer RAD with sensitivity increased by a nontunable cavity cell. On the basis of the results obtained and microwave data available in the literature, the rotational spectrum of the arsine mol. in the ground state is analyzed.

MB crekmp

C.A. 1982, 97, N 12

As MD₂

1982

McKear. D.C., et al.

Vi, u. u. J. Phys. Chem., 1982,
86, N3, 307-309.

●
(see. PHD₂; III)

AsH₃

1982

Сидоров Г. А.

геометр;
структ.,
ссыл. пост.

Докл. АН СССР, 1982,
264, № 6, 1440-1444.

● (ссыл. CH₄; III)

AsH₃

От 18 881

1983

8 Л152. Длинноволновый инфракрасный спектр и спектроскопические постоянные молекулы AsH₃ в основном состоянии. Far infrared spectrum and spectroscopic constants of AsH₃ in the ground state. Carloti M., Di Leonardo G., Fusina L. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 102, № 2, 310—319 (англ.)

С помощью интерферометра Майкелсона с разрешением $0,004 \text{ см}^{-1}$ исследован чисто вращательный спектр поглощения основного колебательного состояния молекулы AsH₃ в области $25\text{—}100 \text{ см}^{-1}$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 12$ основного состояния. Обработка спектра выполнена с учетом квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения, включая недиагональные матричные элементы с $\Delta K = \pm 3$ и ± 6 вращательного гамильтониана. При этом использованы также комбинационные разности для основного состояния, полученные по ИК-полосам (всего около 2000 частот). Определены значения вращательных и центробежных постоянных. М. Р. Алиев

М.П.

ф. 1984, 18, N 8

AsH₃

Um. 12881 1983

16 Б1249. Длинноволновый инфракрасный спектр и спектроскопические константы AsH₃ в основном состоянии. Far infrared spectrum and spectroscopic constants of AsH₃ in the ground state. Carlotti M., Lonardo G. D., Fusina L. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 102, № 2, 310—319 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получен вращат. ИК-спектр (25—100 см⁻¹) газ. AsH₃ (I) с разрешением ~0,004 см⁻¹. Проведены измерение и отнесение наблюдаемых линий к вращат. переходам с $\Delta I = +1$ и $\Delta K = 0$ до $I'' = 12$. В спектре I наблюдается расщепление на две компоненты A₁ и A₂ линий вращат. переходов, включающих уровни с K=3, что теоретически возможно для всех переходов с уровнями с K=3n. Расщепление составляет 0,04 см⁻¹ при $I'' = 11$ и 0,08 см⁻¹ при $I'' = 12$. Полученные эксперим. данные, дополненные лит. данными МВ и субмикроволнового спектров, а также данными по комбинац. разностям в колебательно-вращат.

Vi; см. пост.
геометр. структура

X. 1984, 19, N 16

спектре газ. I в области $740\text{--}1200\text{ см}^{-1}$, обработаны по МНК, с использованием различных теорет. моделей. Получены спектроскопич. константы для основного состояния молекулы I. Определены равновесные структурные параметры I: $r(\text{As—H}) = 1,511060\text{ \AA}$, $\alpha = 92,0690(14)^\circ$.

И. А. Гарбузова

AsH₃

Im. 18881

1983

100: 42090t Far infrared spectrum and spectroscopic constants of arsine in the ground state. Carlotti, M.; Di Lonardo, G.; Fusina, L. (Ist. Chim. Fis. Spettrosc., 40136 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 102(2), 310-19 (Eng). The far IR spectrum of AsH₃ was recorded at 25-100 cm⁻¹ with a resolu. of ~0.004 cm⁻¹, $\Delta J = +1$, $\Delta K = 0$ rotational transitions were measured and assigned up to $J'' = 129$. These transitions, together with the presently available microwave and submillimeter-wave data and ground state combination differences, were analyzed on the basis of a rotational Hamiltonian which includes $\Delta k = \pm 3$ and $\Delta k = \pm 6$ interaction terms. The derived ground state mol. parameters reproduced the transition frequencies of both allowed and perturbation allowed transitions within the accuracy of the measurements. The equil. structure was detd. for the AsH₃ mol.

(uk, u.n.)

c.A. 1984, 100, N 6

AsH₃

[Om. 16754]

1983

20 Б228. Лазерная штарковская спектроскопия AsH₃ с использованием излучения 9,4 и 10,6 мкм CO₂ лазера. Laser stark spectroscopy of AsH₃ using 9,4 and 10,6 μ m CO₂ laser. Nakagawa Kuniaki, Neda Yoshifumi, Kuchitsu Kozo. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1983, 56, № 3, 937—938 (англ.)

(Vi)

Исследована сверхтонкая штарковская структура полос ν_2 и ν_4 молекулярного AsH₃ с использованием полей до 90 кВ/см и полос 9,4 и 10,6 мкм ($\Delta m_J = 0,1$) одночастотного CO₂ лазера. Наблюдалось около 1000 штарковских из к-рых 100 относятся к шести $\Delta(k-l)=0$, шести $\Delta(k-l)=\pm 3$ и трем $\Delta(k-l)=\pm 6$ переходам.

А. Т. Суходольский

X. 1983, 19, № 20

AsH_3 , AsD_3 , AsT_3

1983

Natarajan A., Chinnappan V. A.

Proc. Indian Acad. Sci.
Chem. Sci., 1983, 92, N3,
211-220.

($Cu \cdot NH_3$; III)

AsH₃

[OM. 21276]

1984

Arlinghaus R.T.,
Andrews L.,

UK спектр
вращение

J. Chem. Phys., 1984, 81,
N10, 4341-4351.

$H_2 H_3$

1984

Baldecchi M. G., Carli B.,
et al.

Pyrie-
cremp

Int. J. Infrared Milli-
meter Waves 1984, 5(3),
381-401.

● (car. CO; III)

AsH₃

Om. 21 613 1984

№ 21 Б1191. Полосы ν_2 и ν_4 —AsH₃. The ν_2 and ν_4 bands of AsH₃. Di Leonardo G., Fusina L., Johns J. W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 2, 282—301 (англ.)

Спектр поглощения AsH₃ в области 750—1200 см⁻¹ зарегистрирован с помощью фурье-спектрометра с разрешением 0,006 см⁻¹ и абс. точностью для неперекрывающихся линий 0,0004 см⁻¹. Более 2400 колебат.-вращат. линий с $J' \leq 21$ отнесено к полосам $\nu_2(A_1)$ и $\nu_4(E)$. Для обработки эксперим. данных использован эффективный колебат.-вращат. гамильтониан, учитывающий в явном виде кориолисово взаимодействие между ν_2 и ν_4 , а также ряд резонансных членов более высокого порядка. При совместной обработке всех эксперим. данных определены 38 спектроскопич. параметров, к-рые описывают положения линий со среднеквадратичным отклонением 0,0005 см⁻¹.

Б. И. Жилинский

М.П.

Х. 1984, 19, № 21

AsH₃

Om. 21613 1984

100: 164572x The ν_2 and ν_4 bands of arsine. Di Lonardo, G. Fusina, L.; Johns, J. W. C. (Ist. Spettrosc. Mol., CNR, 40132 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 104(2), 282-301 (Eng). The IR absorption of AsH₃, between 750 and 1200 cm⁻¹ was recorded at a resolu. of 0.008 cm⁻¹. Altogether, 2410 transitions, including nearly 700 perturbation allowed transitions with $\Delta|k - l| = \pm 3, \pm 6$, and ± 9 , were assigned to the $\nu_2(A_1)$ and $\nu_4(E)$ bands. Splitting of the transitions for $K'' = 3, 6$, and 9 was also obsd. To fit the rotational pattern of the $\nu_2 = 1$ and $\nu_4 = 1$ vibrational states up to $J = 21$, all the exptl. data were analyzed simultaneously on the basis of a rovibrational Hamiltonian which took into account the Coriolis interaction between ν_2 and ν_4 and also included several essential resonances within them. The derived set of 38 significant spectroscopic parameters reproduced the 2328 transition wavenumbers retained in the final fit within the accuracy of the exptl. measurements.

(ν_i)

C.A. 1984, 100, N20

AsH₃

Om. 216L3 1984

2 Л209. Полосы ν_2 и ν_4 AsH₃. The ν_2 and ν_4 bands of AsH₃. Di Leonardo G., Fusina L., Johns J. W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, № 2, 282—301 (англ.)

Получен спектр ИК-поглощения AsH₃ в области 750—1200 см⁻¹ с разрешением 0,006 см⁻¹. 2419 переходов, включая около 700, «разрешенных возмущением» переходов $\Delta|k-l| = \pm 3, \pm 6$ и ± 9 отнесены к полосам $\nu_2(A_1)$ и $\nu_4(E)$. Достигнутое эксперим. разрешение позволило установить наличие расщепления переходов при $k'' = 3, 6$ и 9 , причем разделение компонент дублетов быстро растет с увеличением J . В связи с тем, что рассмотрение системы вращательных уровней вплоть до $J=21$ колебательных состояний $\nu_1=1$ и $\nu_4=1$ осложнено различными вращательно-колебательными взаимодействиями и расщеплением переходов, одновременный анализ всех колебательных данных был проведен на основе вращательно-колебательного гамильтониана с

Di, M. P.

ср. 1985, 18, № 2

учетом кориолисового взаимодействия между колебательными состояниями A_1 и E , а также резонансных взаимодействий между уровнями внутри этих состояний. Экспериментально измеренные длины волн переходов использованы для определения эффективных спектроскопич. параметров и постоянных взаимодействия между колебательными состояниями $\nu_2=1$ и $\nu_4=1$. Приведены численные значения 38 параметров. Точность проведенных измерений длин волн составила не более $0,0004 \text{ см}^{-1}$. А. М. М.



AsH₃

1984

(Im. 20 197)

101: 200518r The electric dipole moment of arsenic hydride (AsH₃) by saturation laser Stark spectroscopy. Di Lonardo, G.; Fusina, L.; Trombetti, A. (Ist. Spettroscop. Mol., 40136 Bologna, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 110(5), 513-16 (Eng). Inverse Lamb dips of the P(4, 3) and R(3, 3) transitions of the ν_2 band of AsH₃ at 11 μm were measured with a Stark cell inside the cavity of a CO₂ laser. The dipole moments of AsH₃ in the ground vibrational state $\mu_0 = 0.217 \pm 0.003$ D and in the $\nu_2 = 1$ state $\mu_1 = 0.218 \pm 0.003$ D were obtained.

(14)

C.A. 1984, 101, N 22

AsH₃

1 Oct. 20 197 / 1984

2 Л1355. Измерение электрического дипольного момента AsH₃ методом лазерной ~~штарковской~~ спектроскопии насыщения. The electric dipole moment of AsH₃ by saturation laser Stark spectroscopy. Di Leonardo C., Fusina L., Trombetti A. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 110, № 5, 513—516 (англ.)

измерение
электрич. дипольного
момента

На штарковской ячейке, помещенной в резонатор ¹³C¹⁶O₂-лазера, наблюдались инвертированные лэмбовские провалы на переходах P(4,3) и R(3,3) полосы ν_2 молекулы AsH₃. При изменении напряженности электрич. поля в ячейке от 2400 до 8500 В/см получено более 10 резонансов, обусловленных поглощением на различных компонентах сверхтонкой структуры. Определены дипольные моменты основного и возбужденного ($\nu_2=1$) колебательных состояний, равные соответственно $(0,217 \pm 0,003)$ и $(0,218 \pm 0,003)$ ед. Дебая, причем точность измерений в основном лимитировалась стабильностью частоты CO₂-лазера.

К. Б.

ср. 1985, 18, № 2

AsH₃

1984

101:160355b A contribution to the laser spectroscopy of arsine. Fusina, L.; Di Leonardo, G. (Ist. Spettrosc. Mol., CNR, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 107(2), 419-20 (Eng). The anal. of the radio-frequency-IR double resonance and 2-photon spectrum of AsH₃ by F. Scappini and T. Oka (1981) is cor. and supplemented in view of recent high-resoln. IR results. Some rovibrational assignments are reassigned.

лазер.

Спектроскопия.

С.А. 1984, 101, N 18

AsH₃

(Dm. 20331) 1984

Grodzicki dr., Walther H.,
Elbel Susanne.

фотометр.
спектр.,
структ.,
У, гитовы.
момент.

Z. Naturforsch., 1984,
B39, N 10, 1319-1330.

● (сер. NH₃; III)

АзМз

1984

1 Б1018. Теоретическое исследование газофазной основности молекул, содержащих кратные связи мышьяк—углерод. A theoretical study of the gas-phase basicity of molecules containing arsenic—carbon multiple bonds. Lohr L. L., Scheiner A. C. «J. Mol. Struct.», 1984, 109, № 3—4, Suppl.: «Theochem», 18, № 3—4, 195—200 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ, 3—21ГФ с полной оптимизацией геометрич. параметров и учетом корреляц. эффектов в рамках процедуры Меллера — Плессета 2-го порядка проведены расчеты AsH_3 (I), H_2CAsH (II) и HCAs (III), а также их протонированных по As и C форм. Из полученных данных следует, что газофазная основность рассмотренных соединений должна изменяться в ряду $\text{I} > \text{II} > \text{III}$, при этом если для II протонированные по C и As формы энергетически примерно эквивалентны, то в III протонирование практически полностью должно проходить по атому C.

И. Абронин

расчет
структур

☒ (H)

Х. 1985, 19, № 1.

AsH₃

(Ом. 20436)

1984

6 Л178. Вклад в лазерную спектроскопию арсина.
A contribution to the laser spectroscopy of arsine. Scarpini F., Fusina L., Di Leonardo G. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 2, 419—420 (англ.)

Выполнено уточнение интерпретации и проведен дополнительный анализ данных по двойному микроволн. ИК-резонансу и двухфотонному спектру AsH₃, которые обсуждаются в (Scarpini F. et al. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, 390). Дана интерпретация ряда неотнесенных ранее линий и уточнены константы сверхтонкого расщепления.

М. В. Т.

М. П.

Ф. 1985, 18, № 6.

AsH₃

10M. 20436 | 1984

7 Б1236. Сообщение, касающееся лазерной спектроскопии арсина. A contribution to the laser spectroscopy of arsine. Scarpini F., Fusina L., Di Leonardo G., «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 107, № 2, 419—420 (англ.)

Исправлено отнесение и проведен повторный совместный анализ результатов, выполненных авторами ранее; измерений вращательной и СТ структуры полос ν_2 и ν_4 AsH₃ методами РЧ-ИК двойного резонанса и двухфотонного поглощения («J. Mol. Spectrosc.», 1981, 85, 390) и ИК-спектроскопии поглощения высокого разрешения («J. Mol. Spectrosc.», 1984, 104, 282). Значения параметров СТС eqQ , C_N , C_K , χ_J , χ_K , χ_d AsH₃ (МГц): основное колебательное состояние — 162,648; 0,1105; 0,077; 0,0049; 0,076; 0,024; состояние $\nu_4=1$ — $eqQ=-160,96$ (остальные полагаются равными параметрам основного состояния). В. М. Ковба

М. П.

X. 1985, 19, № 7

AsH₃

[Om. 19956]

1984

Trinquier G., Daudley J.,
et al.,

J. Amer. Chem. Soc.,
1984, 106, N17,

● 4794-4799.

реуемр,
емроукмypo,
ab initio
рæрем.

АзНЗ

[ом. 21592]

1985

Богдурев А.И.,

Чаркин О.П.,

Ж. структур. де-
мее, 1985, 26, №3,

● 158-181.

полнотр.,
структ.,
теор.
расчет,
инверсион.
барьеры

As H₃

1985

Chau F.T., McDowell
C.A.

cer. no cer.,
Y, Re;

Y. Mol. Struct.
1985, 129 (1-2), 169-
-73.

●
(cer. F₂; III)

AsH₃

1985

8 Л103. Микроволновое исследование спектра перехода $J=1 \leftarrow 0$ AsH₃ в возбужденных колебательных состояниях $V_2 \leq 1$ и $V_4=1$. Казakov В. П., Мельников А. А. «Изв. вузов. Радиофиз.», 1985, 28, № 3, 379—382

М.П.

ф. 1985, 18, № 8

AsH₃

1985

103: 95313m Microwave study of spectra of the transition $J = 1 \leftarrow 0$ of arsenic hydride in excited vibrational states of $v_2 = 1$ and $v_4 = 1$. Kazakov, V. P.; Mel'nikov, A. A. (Inst. Prikl. Fiz., Gorkiy, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Radiofiz.* 1985, 28(3), 379-82 (Russ). Investigation of microwave spectra of AsH₃ gave the pressure dependence of individual hyperfine quadrupole components of lines of the $J = 1 \leftarrow 0$ rotational transition for the $v_2 = 1$ and $v_4 = 1$ excited vibrational states. The pressure coeffs. of the frequency shift and line broadening were derived. The former coeff. is more sensitive to mol. interactions than the other one. Anal. of the spectra gave also the quadrupole coupling const. eQq and the magnetic spin-rotational coupling const. C_N .

(NB check,
Li. N.)

C. A. 1985, 103, N 12

AsH₃

От 21987

1985

2 Л161. Прямые переходы между компонентами l -удвоения AsH₃ в состоянии $v_4=1$. Direct l -type doubling transitions in the $v_4=1$ state of AsH₃. Scappini F., Di Leonardo G., Guarnieri A., Krupnov A. F., Kazakov V. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 2, 377—383 (англ.)

Получены микроволн. спектры поглощения газообразного AsH₃ в области 9—300 ГГц. Наблюдаемые линии связаны с переходами между расщепленными l -удвоением компонентами уровней $J=1, 2, 3, 6, 7, 8$ колебательного состояния $v_4=1$. Наблюдено сверхтонкое расщепление линий за счет квадрупольных взаимодействий. Приведены частоты линий. Определены константы l -удвоения и сверхтонкого расщепления. М. Б. Т.

М.П.

ср. 1986, 18, №2

AsH₃

Ом. 21987

1985

3 Б1294. Непосредственные переходы между компонентами удвоения l -типа для AsH₃ в состоянии $\nu_4=1$. Direct l -type doubling transitions in the $\nu_4=1$ state of AsH₃. Scappini F., Di Leonardo G., Guarnieri A., Krupnov A. F., Kazakov V. P. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 112, № 2, 377—383 (англ.)

В области 9—300 ГГц с использованием трех различных МВ-спектрометров измерены переходы между компонентами (A_1 — A_2) l -расщепления AsH₃ в состоянии $\nu_4=1$. Всего наблюдалось 6 групп переходов с $J=1, 2, 3, 6, 7, 8$. В переходах с $J=1, 2$ измерена СТС линий ($\Delta F=0, 1$), в др. переходах наблюдались компоненты СТС только с $\Delta F=0$. Рассчитаны положения «центров» линий $J=1, 2, 3$, соотв. переходам между компонентами l -расщепления в отсутствие сверхтонкого расщепления (9772,17; 29061,08 и 57380,61 МГц), постоянные

и.п.

X. 1986, 19, N 3

1-удвоения q_4 , q_4' и q_4'' (4907,78, —10,918 и 0,0344 МГц),
а также постоянные сверхтонкого взаимодействия $\eta e q Q$,
 $e q Q$, C_N , C_K , χ_K , σ равные —1,093(50), —158,31(17),
0,1244(93), 0,1224(64), —0,476(55), 0,580(61) и
0,035 МГц соотв. Переходы $J=6, 7, 8$ сильно возму-
щены кориолисовым взаимодействием между колеба-
ниями ν_2 и ν_4 и плохо описываются набором постоян-
ных, вычисленных из переходов с $J=1, 2, 3$.
С. Б. Осин

AsH₃

(Om. 21987)

1985

103: 95347a Direct l-type doubling transitions in the $\nu_4 = 1$ state of arsine. Scappini, F.; Di Lonardo, G.; Guarnieri, A.; Krupnov, A. F.; Kazakov, V. P. (Ist. Spettrosc. Mol., CNR, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 112(2), 377-83 (Eng). Direct l-type doubling transitions $J = 1, 2, 3, 6, 7, 8$ were measured by microwave spectroscopy in the $\nu_4 = 1$ state of AsH₃. From the lowest J transitions, the l-type doubling const. and the hyperfine consts. were detd. The $J = 6, 7, 8$ transitions appear strongly perturbed by ν_2, ν_4 Coriolis interactions.

(l-угвоение
переходов
соем. $\nu_4=1$)

C. A. 1985, 103, N 12

AsH₃

(CM - 22238)

1985

Spirko V., Civiš S., Beran S.,
et al,

попытки
привести,
теорет.
расчет.

Collect. Czechosl. Chem.
Commun., 1985, 50, N 7,
1519-1536.

AsH₃

[om. 23329]

1986

Graber G., Bürger H.,

J. Mol. Spectrosc., 1986,

115, 112, 393-418.

Dj^o;

AsH₃

1986

Г) 8 Б1387. Исследование запрещенного субмиллиметрового спектра AsH₃ в состояниях $\nu_2=1$ и $\nu_4=1$ и объединенный анализ данных по субмиллиметровому и инфракрасному спектрам. Investigation of forbidden submillimeter spectrum of AsH₃ in $\nu_2=1$ and $\nu_4=1$ states and joint analysis of submillimeter and infrared data. Kazakov V. P., Krupnov A. F., Saveljev V. N., Ulenikov O. N. «Proc. 9th Int. Conf. High Resolut. Infrared Spectrosc., Liblice near Prague, Sept. 8—12, 1986. Progr. Sess. Abstr. Pap.» Prague, s. a., 87 (англ.)

За счет использования опич. ячейки многократного прохождения удалось наблюдать «запрещенные» вращат. переходы (обл. 200—940 ГГц) молекулы AsH₃ в состояниях $\nu_2=1$ и $\nu_4=1$. Анализ данных выполнен с учетом взаимодействия между колебат. уровнями.

В. М. Ковба

М.П.

Х. 1987, 19, N 8.

AsH_3

1986

Karlcek R. F., Hammar-
lund B. et al.

Уф ефект
помощи.

J. Appl. Phys. 1986,
60 (2), 794-9.

(сеч. PH_3 ; III)

AsH₃

1986

Kazakov V.P., Krupnov A.F.,
et al.,

трансам-
построен.

Proceeding of the IXth Inter-
national Conference on High
Resolution Infrared Spectro-
scopy, Liblice near Prague
September 8-12, 1986,

87.

87

As H₃

Am. 25857

1986

Spirko V., Civis S.,
et al.

nomerus.

q-1008

D₂(XH₃,

XH₂D, XHD₂

XD₃, XH₂,

HD₄, XHD₃)

J. Mol. Spectrosc.

1986, 119(2), 426-32.

(cur. PH₃ ; III)

ASH₃

1987

Berkowitz Joseph,
Greene John P.

(Do)

13 Int. Conf. Photo-
chem., Budapest, Aug.
9-14, 1987: Abstr. Vol.
1. S.L.,  S.A.C. 251-252.
(see PH₂; I)

As H₃

1987

Dixon David A, Arden
engo Anthony J. III.

V₃;
J. Am. Chem. Soc. 1987,
109(2), 338-41.

(see. PH₃; III)

AsH₃

Im. 29045

1987

8 Д59. Молекулярные колебания пирамидальных C_{3v} -молекул: применение деформаций Китинга. Molecular vibrations of pyramidal C_{3v} molecules: Application of the Keating bendings. Fleming G. Díaz, Cyvin S. J., Cyvin B. N. «Spectrosc. Lett.», 1987, 20, № 11, 881—897 (англ.)

Сопоставлено применение трех различных наборов колебательных координат, используемых при описании силового поля пирамидальных молекул XY_3 . Эти наборы соответствуют валентно-силовому полю, центрально-силовому полю и силовому полю Китинга (Keating P. N. «Phys. Rev.», 1966, 145, 637). Исследованы также различные «точные» силовые поля с применением валентных, центральных и китинговских координат. Малость величины недиагональных силовых постоянных рассматривалась как критерий пригодности соот-

М.А.

(43)



ф. 1988, 18, № 8

ветствующего выбора координат. С использованием этих трех видов координат вычислены силовые постоянные колебаний типов A и E в молекулах AsH_3 , SbH_3 , PF_3 , NF_3 и др. Сделан вывод, что использование координат Китинга в расчетах силового поля этих молекул имеет преимущество по сравнению с использованием валентных или центральных координат.

В. А. Морозов

AsH₃

(Om. 26878)

1987

Kazakov V.P., Krupnov
A.F. et al;

субмм.-вол-
новой спектр
и спектр-
постоеж.

У. Мол. Spectrosc.,
1987, 123, N 2,

340 - ● 355.

AsH₃

1987

№ 21 Б1293. Субмиллиметровый спектр и спектроскопические постоянные AsH₃ в колебательных состояниях (0100) и (0001) и совместный анализ субмиллиметровых и инфракрасных данных. Submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of AsH₃ in the (0100) and (0001) vibrational states and joint analysis of submillimeter and infrared data. Kazakov V. P., Krupnov A. F., Saveliev V. N., Ulenikov O. N. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 2, 340—355 (англ.)

На субмиллиметровом спектрометре РАД с квазиоптич. многоходовой ячейкой поглощения в обл. частот 200—940 ГГц измерен вращат. спектр AsH₃ в возбужденных колебат. состояниях (0100) и (0001). Идентифицирована сверхтонкая структура разрешенных переходов $(J+1) \leftarrow J$, $K \leftarrow K$ и слабых запрещенных переходов $J \leftarrow J$ ($\Delta K=2$, $\Delta K=3$). В результате совместного анализа полученных субмиллиметровых данных вместе с ИК-, МВ- и РЧ-данными на основе улучшенной теор.

М.А.

X. 1987, 19, N 21

модели определены спектроскопич. параметры AsH_3 в колебат. состояниях (0100) и (0001). Получены уточненные значения параметров сверхтонкой структуры, вращат., центробежных и резонансных постоянных, к-рые позволили описать все известные эксперим. данные в пределах точности измерений. С. Н. Мурзин



AsH₃

1987

субмиллиметр.
спектр

* 11 Л181. Субмиллиметровый спектр и спектроскопические константы молекулы AsH₃ в колебательных состояниях (0100) и (0001) и совместный анализ субмиллиметрового и инфракрасного спектров. Submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of AsH₃ in the (0100) and (0001) vibrational states and joint analysis of submillimeter and infrared data. Kazakov V. P., Krupnov A. F., Saveliev V. N., Ulenikov O. N. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 2, 340—355 (англ.)

На МВ-спектрометре с квазиоптич. резонатором и акустич. детектором исследован МВ-спектр молекулы AsH₃ в диапазоне 200÷940 Ггц. Идентифицирована ядерная СТС линий ряда разрешенных ($\Delta K=0$) и запрещенных ($\Delta K > 3$) вращательных переходов в основном колебательном состоянии и в первых возбужденных состояниях колебаний ν_2 и ν_4 . Анализ спектра выполнен с учетом кориолисова резонанса между колебаниями ν_2 и ν_4 , As и колебательно-вращательных взаимодействий вплоть до 4-го порядка. Определены значения вращательных и центробежных постоянных и параметров этих взаимодействий. М. Р. Алиев

ср. 1987, 18, № 11

AsH₃

1987

/ 106: 223358f Submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of arsine in the (0100) and (0001) vibrational states and joint analysis of submillimeter and infrared data. Kazakov, V. P.; Krupnov, A. F.; Savel'ev, V. N.; Ulenikov, O. N. (Inst. Appl. Phys., 603600 Gorkiy, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 123(2), 340-55 (Eng). The sub-mm-wave spectra of AsH₃ in the excited vibrational states (0100) and (0001) were investigated for both allowed *R* branches ($J + 1 \leftarrow J$, $K \leftarrow K$) and weak-intensity forbidden *Q* branches ($K = 3 \leftarrow 1$, $3 \leftarrow 0$, $2 \leftarrow 0$). Weak forbidden transitions of AsH₃ in the (0001) state were obsd. due to the increase of sensitivity of a RAD-spectrometer by using quasi-optical cavity absorption cells. As a result of joint anal. of new sub-mm recordings together with the known IR, microwave; and radiofrequency data, the set of spectroscopic parameters obtained allows one to describe all the available spectroscopic data for the (0100) and (0001) vibrational states of the AsH₃ mol. within exptl. uncertainties.

(148 чекмп)

C. A. 1987, 106, N 26

AsH₃

1987

† 21 Б1292. Микроволновые спектры дейтерированных арсинов: переходы AsD₃ за счет центробежного момента, микроволновые спектры AsH₂D и AsHD₂ и структура арсина. Microwave spectra of deuterated arsines: distortion moment transitions of AsD₃, microwave spectra of AsH₂D and AsHD₂, and the structure of arsine. McRae G. A., Gerry M. C. L., Wong M., Ozier I., Cohen E. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 123, № 2, 321—339 (англ.)

На штатковском микроволновом (МВ) спектрометре высокой чувствительности (10^{-11} см⁻¹) в обл. частот 9—400 ГГц измерены вращат. переходы $(J+1) \rightarrow J$, $K \rightarrow K$ и переходы индуцированные центробежным искажением $J \rightarrow J$, $K = \mp 1 \leftarrow \pm 2$ AsD₃ и вращат. переходы AsH₂D и AsHD₂ в основном колебат. состоянии. Индуцированные центробежным искажением переходы AsD₃ измерены впервые. Анализ МВ-спектров выполнен с учетом ⁷⁵As — ядерной сверхтонкой структуры в приближении модели C_{3v}-симм. волчка с учетом оптичных членов центробежного искажения в случае AsD₃ и с

М.П.

Х. 1987, 19, № 21

использованием гамильтониана Уотсона в S -редукции
в случае AsH_2D и AsHD_2 . Определена усредненная и
равновесная структура молекулы, а также гармонич.
силовое поле молекулы арсина. С. Н. Мурзин



AsH₃

1987

/106: 223357c Microwave spectra of deuterated arsines: distortion moment transitions of arsine-d₃, microwave spectra of arsine-d and arsine-d₂, and the structure of arsine. McRae, Glenn A.; Gerry, M. C. L.; Wong, M.; Ozier, I.; Cohen, E. A. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 123(2), 321-39 (Eng). Microwave spectra of 3 deuterated arsines were measured and analyzed. For AsD₃ distortion moment transitions were obsd. in the form of the $K = \pm 1 \leftarrow \mp 2$ cluster, their frequencies were combined with those of previously obsd. normal transitions to give rotational, centrifugal distortion, and ⁷⁵As hyperfine consts. For AsH₂D and AsHD₂, the measurements were extended considerably and now include R-branch transitions; similar spectroscopic consts. were evaluated. The data were combined with earlier results for AsH₃ and with vibrational data in a harmonic force field anal. Both ground state av. (r_z) and equil. (r_e) structures were estd.

(14% creep)

(H) 



AsHD₂, AsH₂D

C.A. 1987, 106, N26

AsH₂D

(OM-26864)

1987

AsH₂D₂

McRae G.A., Gerry M.C.L.,
et al.

Уг. спектр.,
Грассман
переход,
М.П.

J. Mol. Spectrosc., 1987,
123, N2, 321-339.

М.П.

(Coll. AsH₃; IV)

AsH₃

1987

Nordholm S.

Austral. J. Chem.

M. N. 1987, 40, N8, 1465-
-1470.

(Cv.  NH₃; III)

AsH₃

[om. 31641]

1988

Berkowitz J.,

Do, Δ_fH; J. Chem. Phys., 1988, 89,
N12, 7065-7076.

Photoionization mass
spectrometric studies of
AsH_n (n=1-3).

As H_3^+ [om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.
Data, 1988, 17, v2, 355.

AsH₃

1988

Д8 Л172. Механизмы «запрещения» появления субмиллиметрового спектра арсина в состоянии (0001). Mechanisms of the «forbidden» submillimeter spectra formation in the (0001) state of arsine. Cheglov A. E., Saveliev V. N., Ulenikov O. N., Kazakov V. P., Krupnov A. F. «J. Mol. Spectrosc.», 1988, 128, № 1, 299—303 (англ.)

Измерены интенсивности сверхтонких компонент двух субмиллиметровых «запрещенных» переходов $(J, \bar{K}) = (5, 3) \leftarrow (5, 1)$ и $(J, \bar{K}) = (6, 3) \leftarrow (6, 1)$ (J и $\bar{K}$ — вращательные квантовые числа) в возбужденном состоянии (0,001) молекулы AsH₃. Обсуждены возможные причины снятия запрета на эти переходы. Показано, что значение наблюдавшихся коэф. поглощения сверхтонких компонент хорошо согласуются со значениями расчета, учитывающего присутствие R -операторов в эффективном дипольном моменте молекулы. В. А. Морозов

М.П.

ср. 1988, 18, № 8

AsH_3

(OM-28927)

1988

Clotet A., Rubio J., Illas F.,

инверсион.
барьер,
ab initio
расчет.

J. Mol. Struct. (Theochem),
1988, 164, 351-361.



[OM 34 253]

1989

Berkowitz J., Ruscic B.,
et al.,

$\Delta_0(\text{H}_2\text{As-H})$ J. mol. struct. Theo-
chem. 1989, 202, 363-
-373.

AsH₃

1989

110: 162600n Reduced sextic rotational Hamiltonian for C_{3v} molecules that are quasi-spherical tops (arsine, phosphine, phosphoryl fluoride). Sarka, Kamil (Fac. Pharm., Comenius Univ., 832 32 Bratislava, Czech.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 133(2), 461-6 (Eng). Redn. of the sextic rotational Hamiltonian for mols. of symmetry C_{3v}, that are quasispherical tops is carried out. The sextic distortion consts. are not independent and one of them has to be constrained. This result explains the correlation problems obsd. in fitting the rotation spectra of AsH₃ and PH₃. The formula giving the parameters of the reduced Hamiltonian in terms of the parameters of the unreduced one are also presented.

meop. param

⊗ (4) PH₃

C.A. 1989, 110, 118

AsH₃

1989

16 Б1053. Приведенный секстичный вращательный гамильтониан для молекул симметрии C_{3u} , относящихся к квази-сферическим волчкам (AsH_3 , PH_3 , OPF_3). Reduced sextic rotational hamiltonian for C_{3u} molecules that are quasi-spherical tops (AsH_3 , PH_3 , OPF_3) / Sargka K. // J. Mol. Spectrosc.— 1989.— 133, № 2.— С. 461—466.— Англ.

Для молекул симметрии C_{3u} , представляющих собой квазисферич. волчки, с помощью контактного преобразования выполнено приведение секстичного вращат. гамильтониана, альтернативное имеющемуся в литературе. Показано, что секстичные постоянные не являются независимыми, и одна из них должна быть исключена. Получены ф-лы, выражающие параметры приведенного гамильтониана через параметры исходного гамильтониана. На основе этих ф-л объяснена отмеченная ранее сильная корреляция параметров секстичного гамильтониана для AsH_3 и PH_3 и дано строгое обоснование того, как вводить ограничения на постоянные.

Н. Ф. Степанов

М. П.

(H) ☒

Х. 1989, N 16

AsH₃

1989

/ 110: 143706k Molecular constants appearing in reduced Hamiltonian for C_{3v} molecules. Sarka, Kamil (Fac. Pharm., Comenius Univ., 832 32 Bratislava, Czech.). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 133(2), 467-8 (Eng). The results E.I. Lovodenko et al. (1987), showing how to avoid correlation problems in fitting the parameters of the rotation-vibration Hamiltonian to exptl. data for Coriolis-interacting $\nu_n(A_1), \nu_l(E)$ states of C_{3v} mols., are complemented by specifying in more detail some of the parameters appearing in the reduced Hamiltonian and the modifications are shown which should be made if a mol. is a quasi-spherical top, such as AsH₃ or PH₃. If the detn. combinations of mol. parameters are used to calc. the mol. force fields, it should be kept in mind that the values of some parameters are modified.

u.n., mol. param

(7) PH₃

C.A. 1989, 110, n 16

AsH₃
AsH₃⁺

1990

8 Д160. Геометрия и энергия электронных состояний молекул AsH₃, SbH₃ и BiH₃ и их положительных ионов. Geometries and energies of electronic states of AsH₃, SbH₃, and BiH₃ and their positive ions / Dai Dingguo, Balasubramanian K. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 3.— С. 1837—1846.— Англ.

Многоконфигурационным методом ССП в сочетании с последующей процедурой конфигурац. взаимодействия рассчитаны равновесные геометрич. конфигурации, поверхности потенц. энергии (ППЭ), энергии связей, потенциалы ионизации (ПИ) и дипольные моменты систем MH₃ и ME₃⁺ (M=As, Sb, Bi) в различных электронных состояниях. В расчете использовано приближение релятив. псевдопотенциала; на атомах М выбран валентный базис (4s4p4d1f), на атоме Н — набор (5s1p)/[3s1p]. Рассчитаны ППЭ 6 электронных состояний AsH₃ и SbH₃ и 3 состояний молекулы BiH₃. Основ-

М.А.

(+2) 

ср. 1991, № 8

1) SbH₃, SbH₃⁺
2) BiH₃, BiH₃⁺

ное состояние для всех систем MH_3 имеет терм 1A_1 ; геометрич. конфигурация — правильная треугольная пирамида. Приведены геометрич. параметры. Ионизированные системы MH_3^+ имеют геометрич. параметры. Ионизированные системы MH_3^+ имеют практически плоское строение. Отмечено очень хорошее согласие в расчетах геометрии, ПИ и энергии связи молекулы AsH_3 с эксперим. данными. А. Ю. Ермилов



AsH_3 , AsH_3^+

1990

14 Б1058. Геометрия и энергия электронных состояний AsH_3 , SbH_3 и BiH_3 и их положительных ионов. Geometries and energies of electronic states of AsH_3 , SbH_3 , and BiH_3 and their positive ions / Daia Dingguo, Balasubramanian K. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 3.— С. 1837—1846.— Англ.

Методом конфигурационного взаимодействия с учетом всех одно и двукратных возбуждений и использованием волновых ф-ций многоконфигурац. метода ССП в полном активном пространстве орбиталей, с учетом спин-орбитального вз-вия и релятивистских эффектов путем расчета по методу релятивистского конфигурац. вз-вия (Chem. Phys.— 1988.— 89.— С. 5731) рассчитаны равновесные геометрич. параметры, энергии связи, дипольные моменты, ПТ ионизации и барьеры инверсии соединений MH_3 и MH_3^+ ($M=As, Sb$ и Bi). Рассчитаны поверхности потенциальной энергии шести низлежащих состояний AsH_3 (I) и SbH_3 (II), а также трех электронных состояний BiH_3 (III). Используются релятивистские основные ПТ. Для валентных ($n-1$) $d^{10}ns^2np^3$ орбиталей As, Sb и Bi использован базис типа

М.П.

(42)

SbH_3 , SbH_3^+ , BiH_3 , BiH_3^+
X. 1991, N 14

(4s4p4d1f). Показано, что основные состояния Mn_3 обладают симметрией $X'A_1(C_{3v})$ с пирамидальной геометрией. Ионы Mn_3^+ имеют плоскую равновесную структуру. Найдено хорошее согласие с экспериментом рассчитанных ПТ ионизации и энергий связи I. Отмечено, что в случае III существенны как спин-орбитальное взаимодействие, так и релятивистские эффекты.

Н. В. Харчевникова

сч.
эргии
и АС

AsH₃

1990

113: 178513j Geometries and energies of electronic states of arsine, stibine, and bismuthine (AsH₃, SbH₃, BiH₃) and their positive ions. Dai, Dingguo; Balasubramanian, K. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(3), 1837-46 (Eng). Geometries, potential energy surfaces, bond energies, dipole moments, ionization potentials and other properties of MH₃ and MH₃⁺ species (M = As, Sb and Bi) are obtained using complete active space SCF (CASSCF) followed by full second-order CI (SOC) and relativistic CI (RCI) methods. Potential energy surfaces of six electronic states of AsH₃ and SbH₃ and three states of BiH₃ are obtained. The ground states of MH₃ species are found to be of X¹A₁ symmetries (C_{3v}) with pyramidal geometries. The equil. geometries of MH₃⁺ ions are close to planar. For AsH₃ the agreement in IP and bond energy between the present theor. results and the exptl. values obtained recently by Berkowitz (1988) is excellent.

geom. and
D₀, I, T_i,
ab-init. par.

(+2) 

C.A. 1990, 113, N20.



SbH₃, BiH₃

AsH₃

1991

7 Д100. Неэмпирический расчет гармонического силового поля и колебательных спектров фторарсинов $\text{AsH}_n\text{F}_{3-n}$ ($n=0-3$) и фторарсоранов $\text{AsH}_n\text{F}_{5-n}$ ($n=0-5$). Ab initio calculation of harmonic force fields and vibrational spectra of the fluoroarsines $\text{AsH}_n\text{F}_{3-n}$ ($n=0-3$) and the fluoroarsoranes $\text{AsH}_n\text{F}_{5-n}$ ($n=0-5$) / Breidung Jürgen, Thiel Walter, Komornicki Andrew // Inorg. Chem.— 1991.— 30, № 5.— С. 1067—1073.— Англ.

Для молекул, указанных в заголовке, проведены неэмпирич. расчеты с использованием эффективных основных потенциалов и поляризованного двухэкспонентного базиса. Наиболее стабильные тригонально-бипирамидальные изомеры фторарсоранов имеют максим. число аксиальных атомов F, аналогично случаю фторфосфоранов. Для известных молекул AsH_3 , AsF_3 и AsF_5 рассчитанные геометрии и колебательные частоты согласуются с эксперим. данными. Для пока не известных молекул предсказаны колебательные спектры. Рассчитаны ИК-спектры в газовой фазе при 300 К для спектроскопич. идентификации молекул AsH_5 , AsH_4F и AsH_3F_2 .

колебат.
спектр;

расчет силов.
поля

ф. 1991, № 7

(45)

Н. В. В.

AsH₃

Edwards. A. H.,

1991

u.n.

J. Chem. Phys. 1991.

94, NY. C. 2894-2905.

(cell. ● NH₃; III)

AsH₃

1992

смысл

116: 1592187 Ab initio theoretical study of arsine and trimethylgallium: the formation of gallium arsenide by a stable adduct. Graves, Richard M.; Scuseria, Gustavo E. (Dep. Chem., Rice Univ., Houston, TX 77251-1892 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(5), 3723-31 (Eng). Theor. calcns. for the closed-shell ground state of AsH₃, GaMe₃, and AsH₃-GaMe₃ Ga(CH₃)₃, and are carried out at the SCF Hartree-Fock level of theory. In addn., the SCF results are compared with theor. predictions obtained at the coupled cluster level of theory including all single and double excitations (CCSD). The equil. structure of AsH₃ is of C_{3v} symmetry, while GaMe₃ and the adduct are C₃ symmetry. Ab initio calcns. are also performed on D_{3h} GaH₃ and H₃Ga-AsH₃ of C_{3v} symmetry. The adduct binding energies and vibrational frequencies (SCF) are also obtained resulting in two stable bonded adduct species AsH₃-GaMe₃ AsH₃-GAH₃. Theor. predictions support a slightly exothermic gas-phase reaction yielding GaAs through a AsH₃-GaMe₃ which is formed without an activation barrier.

(4) □



Ga(CH₃)₃

C.A. 1992, 116, N 16

АзНз

011 3758+

1992

7 Б1098. Неэмпирическое теоретическое исследование арсина и триметилгаллия. Образование GaAs через стабильный аддукт. Ab initio theoretical study of arsine and trimethylgallium: The formation of GaAs by a stable adduct /Graves Richard M., Scuseria Gustavo E. //J. Chem. Phys. .—1992 .—96 ,№ 5 .—С. 3723—3731 .—Англ.

Методами Хартри—Фока и связанных кластеров рассчитаны энергии арсина AsH_3 , триметилгаллия $Ga(CH_3)_3$ и их аддукта, при распаде к-рого образуется GaAs и метан. Определены равновесные геометрич. конфигурации и частоты гармонич. колебаний. Найдено, что образование аддукта проходит без потенциального барьера. Расчеты стадии образования GaAs демонстрируют существенную роль учета электронной корреляции. Суммарный энергетич. эффект р-ции $AsH_3 + Ga(CH_3)_3 \rightarrow GaAs + 3CH_4$ с наилучшим вариантом расчета составляет $-1,4$ ккал/моль. Полученные теор. оценки св-в аддукта, в частности, сдвиги частот колебаний реагентов, хорошо согласуются с эксперим. данными. Аналогичные расчеты выполнены также для галлана GaH_3 и его аддукта с арсином, образующегося с выделением энергии $7,3$ ккал/моль. А. В. Немухин

М.А.

4

X. 1993, № 7

AsH₃

Om. 36605

1992

116:244042v Stretching vibrational overtone spectrum of arsine and stibine. Halonen, Marjo; Halonen, Lauri; Buerger, Hans; Moritz, Peter (Dep. Phys. Chem., Univ. Helsinki, SF-00170 Helsinki, Finland). *J. Phys. Chem.* 1992, 96(11), 4225-31 (Eng). Medium-resoln. Fourier transform IR spectra of AsH₃ and SbH₃ were measured in at 1800-8000 cm⁻¹. The strongest bands obsd. are due to stretching vibrations, but also stretch/bend combination bands were obsd. The stretching vibrational energy level patterns with close degeneracies are typical of mols. close to the local-mode limit. A 3-parameter local-mode model which consists of coupled Morse oscillators was successfully used to explain the obsd. stretching vibrational spectra. The measured fundamental and overtone intensities are well accounted for by a simple bond dipole model which contains just 1 adjustable parameter.

Спектр
растяжения
колебательных

(11) SbH₃

C.A. 1992, 116, N24

As H₃

1992

Lin L. F., Bancroft
G. M. et al.

фотоспектр.
спектры,
колебания
структура

Phys. Rev. A. 1992,
46 (3), 1688-91.

●
(сер. Si H₄; III)

АзНЗ

[ом. 36724]

1992

Нестеренко А.М., Осенский В.И.
и др.,

электрон.
структура,
расчет

М. структурн. химии, 1992,
33, № 4, 135-137.

AsH₃

1992

Ruda Harry E.,
Ping Jiang Guo.

Phys. Rev. B: Condens.
Matter 1992, 46(24),
15936-45.

(see GaH₃; 101)

ab initio
pacrēm
сѣтрѣкѣуѣрѣт,
Vi

AsH₃

Dom. 37399 (1992

Барьер
универс-
сум

Schwerdtfeger P, Zaakko-
nen L. J.; et al.,

J. Chem. Phys., 1992,
96, N 9, 6807-6819

(много ● temp)

AsH₃

1393

119: 17200p Absolute infrared intensities in the fundamentals ν_1 and ν_2 of arsine. Dana, V.; Mandin, J. Y.; Tarrago, G.; Olson, W. B.; Bezard, B. (Lab. Phys. Mol. Appl., Univ. Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 159(2), 468-80 (Eng). FT spectra were recorded with a resolu. of 0.006 cm⁻¹ (apodized FWHM), to det. intensity parameters relative to the fundamentals ν_1 and ν_2 of AsH₃. The resolu. now available allowed to improve the line position anal. over that in previous work by Olson et al. A dyad system was used to account for the strong Coriolis coupling between ν_1 and ν_2 which induces, through a large element in $\Delta(K_1 - K_2) = 4$, many perturbation allowed transitions. Abs. intensities were measured for 387 lines corresponding to 494 transitions of ν_1 and ν_2 . Only 343 of these were retained for the intensity fit because of blendings. Band strengths of ν_1 and ν_2 were estd. as 265.9 (8.6) and 737.5 (9.5) cm² atm⁻¹ at 296 K, resp. The energy and intensity parameters thus derived were used to produce a new prediction of line positions and intensities, much more reliable than those previously available, for further planetary applications.

(ν_1 & ν_2)

C. A. 1993, 119, N2

AsH₃

1993

118: 69212t Hyperfine structure analysis of arsine in the ground, $v_2 = 1$, and $v_4 = 1$ states. Fusina, L.; Scappini, F.; Dinelli, B. M. (Dip. Chim. Fis. Inorg., Univ. Bologna, 40136 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 157(2), 413-18 (Eng). A no. of pure quadrupole resonances in the ground and $v_4 = 1$ states of AsH₃ were measured using the radiofrequency-IR double-resonance technique in a CO₂ laser cavity. The ground state resonances were fitted together with all available radiofrequency and microwave data using the std. treatment. Strong vibration-rotation interactions between the $v_2 = 1$ and $v_4 = 1$ states affect the obsd. spectrum in the $v_4 = 1$ state. The Hamiltonian model by M.R. Aliev and J.T. Hougen (1984) was used, in the form of a computer program, to describe within the exptl. uncertainties the new measurements in a combined anal. with all known exptl. data in the $v_2 = 1$ and $v_4 = 1$ states.

v_4, v_2 ,
сверхтонкая
структура

с. А. 1993, 118, № 8

A3H3

1993

Ishizawa H., Fujima K.,
et al.,

Y, mono-
electron.
circuit

Material

Comput. Aided Innovation
New Mater. 2, Proc. Int.
Cong. Exhib. Comput. Appl.
Nat. Sci. Eng. 2nd 1992,
(Pub. 1993) (Pt. 7),
797-800.
(Call. PH3; III)

As H₃

1994

Sennikov P. G.

J. Phys. Chem. 1994,
98 (19), 4973-81.

ab initio
(обзор)

(ср.  PH₃ ; III)

AsH₃

1994

120: 176700p Quadrupole hyperfine and A₁-A₂ splitting in the ν_2 fundamental of arsine. Spiegl, G.; Hoehe, W.; Haering, U.; Kreiner, W. A. ; (Abt. Chem. Phys., Univ. ULM, D-89069 Ulm, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 163(2), 349-63 (Eng). The authors have investigated the satn. spectrum of the ν_2 fundamental of arsine, AsH₃, at 906.75157863 (85) cm⁻¹ with a resohn. of 200 kHz. CO₂ laser sidebands at microwave modulation frequencies were used for the measurements between 890 and 988 cm⁻¹. Quadrupole hyperfine structure as well as vibration-rotation splitting of K = 3 and K = 6 levels have been investigated. In addn., an interaction between these two effects has been obsd. Both effects have been included into the diagonalization of the energy matrix. The std. deviation of the fit, including MW and RF data, is 111 kHz. This work was partly undertaken to contribute to calibration stds. for Fourier transform and diode laser spectrometers.

постает.
сверхмощного
расщепления

с. А. 1994, 120, N 1/4

1995

F: AsH₃

P: 3

5B1313. Ангармонические силовые поля арсина, стибина и висмутина. The anharmonic force fields of arsine, stibine, and bismutene / Breidung Jurgen Thiel Walter // J. Mol. Spectrosc. - 1995. - 169, N 1. - С. 166-180. - Англ.

а теоретических уровнях ХФ ССП и МП2 с использованием трех различных типов эффективных ядерных потенциалов (AREP, ECP, RCEP, и поляризованных дубль-зета валентных базисных наборов, проведенные неэмпирич. расчеты оптимизированных структур и ангармонич. и гармонич. силовых полей арсина AsH₃ (I), стибина SbH₃ (II) и висмутина BiH₃ (III) с использованием программных комплексов GPADSCF и GAUSSIAN 92. Для I-III все использованные наборы эффективных ядерных потенциалов дают близкие численные результаты как для гармонич. и ангармонич. силовых полей, так и для спектроскопич. постоянных. абсорб. теор. молек. постоянных сравнен с известными эксперим. данными для I и II. Библ. 75.

P. Ж. Х. NS, 1996

AsH₃

1995

122:115504x The anharmonic force fields of arsine, stibine, and bismuthine. Breidung, Juergen; Thiel, Walter (Organisch-Chemisches Institut, Universitaet Zuerich, CH-8057 Zuerich, Switz.). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 169(1), 166-80 (Eng). The cubic and quartic force fields of AsH₃, SbH₃, and BiH₃ were detd. from ab-initio calcns. by using effective-core potentials and polarized double-zeta valence basis sets. The computed geometries, dipole moments, rotational consts., vibration-rotation interaction consts., l-doubling consts., anharmonicity consts., vibrational wave nos., centrifugal-distortion consts., and Coriolis-coupling consts. are compared with the available exptl. data for AsH₃ and SbH₃. The vibrational wave nos. and other spectroscopic consts. for the BiH₃ mol. are predicted.

Calc. NCM,
M.N., Meop.
Param

(12) 

SbH₃, BiH₃

C.A. 1995, 122, N10

1995

F: AsH₃

P: 3

7Б192. Резонансы Ферми и локальные колебания в пирамидальных молекулах XH[3]: приложение к обертоному спектру AsH[3]. Fermi resonances and local modes in pyramidal XH[3] molecules: An application to arsine (AsH[3]) overtone spectra / Lukka Tuomas, Kauppi Esa, Halonen Laur. // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 13. - С. 5200-5206. - Англ. Апробированная ранее на изогнутых трехатомных молекулах модель ферми-резонансного локального колебания, непосредственно учитывающая ферми-резонансное вз-вие вал. и деформац. колебаний, распространена на пирамидальные молекулы XH[3]. а примере AsH[3] показано, что используемая модель воспроизводит и дополняет х-ки наблюдаемого обертоного спектра, а также параметры поверхности потенциальной энергии основного состояния, полученные из неэмпирич. расчетов. Кроме того, она может быть использована для более полного анализа ангармоничности, ровибронных вз-вий и т. д.

Р. Ж. Х. № 7, 1996.

AsH₃

1995

122: 225544t Fermi resonances and local modes in pyramidal XH₃ molecules: an application to arsine (AsH₃) overtone spectra. Lukka, Tuomas; Kauppi, Esa; Halonen, Lauri (Lab. Phys. Chem., Univ. Helsinki, FIN-00014 Finland). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(13), 5200-6 (Eng). A simple vibrational Hamiltonian expressed in terms of curvilinear internal coordinates has been used to model both stretching and bending vibrations in pyramidal XH₃ mols. The pure stretching part is expressed as harmonically coupled anharmonic oscillators and the pure bending parts as harmonically coupled harmonic oscillators. The stretching and the bending modes are coupled with each other by Fermi resonance terms which contain contributions both from the kinetic and potential energy part of the full vibrational Hamiltonian. Only resonance couplings are included. The Hamiltonian matrixes are symmetry factorized by employing symmetrized basis functions which consists of products of stretching oscillator and valence angle bending oscillator functions. This model is applied to obsd. vibrational term value data of arsine (AsH₃). The least squares method is sued to optimize potential energy parameters. The results obtained are in good agreement with ab initio calcns. All obsd. arsine overtone and combination bands have been assigned.

Пермун рего-
HARC

C.A. 1995, 122, N 18

1995

F: AsH₃

P: 3

14Б1281. Фурье-спектры высокого разрешения AsH₃. Переходы на взаимодействующие подуровни состояния 'ню'[4]=2. High-resolution fourier transform spectra of AsH₃: Transitions to the interacting sublevels of the 'ню'[4]=2 state / Ulenikov O. N., Malikova A. B., Winnewisser B. P., Winnewisser M. [Journal of Molecular Spectroscopy] // J. Mol. Spectrosc. - 1995. - 172, N 2. - С. 330-343. - Англ.

РМХ 1997

Исследованы ИК-фурье-спектры поглощения газообразного AsH_3 (I) (при 300К, давление паров 3,0 мбар, длина хода лучей 284 см, разрешение $0,0015 \text{ см}^{-1}$) в области обертона $2\nu_4$. Интерпретация спектров проведена методом комбинационных разностей основного состояния, предложено отнесение 'ЭКВИВ'900 переходов к двум компонентам полосы $2\nu_4$. С использованием формализма неприводимых тензорных представлений проведен теор. анализ исследованных спектров, получены наборы 86 молек. параметров I, воспроизводящие эксперим. данные для состояний (0101, E), (0002, E), (0200, A), (0002, A) и их взаимодействий со среднеквадратичным отклонением $0,006 \text{ см}^{-1}$.

AsH₃

1995

123: 126024n High-resolution Fourier transform spectra of AsH₃: transitions to the interacting sublevels of the $v_4 = 2$ state. Ulenikov, O. N.; Malikova, A. B.; Winnewisser, B. P.; Winnewisser, M. (Lab. Mol. Spectroscopy, Phys. Dep., Tomsk State Univ., Tomsk, Russia 634050). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 172(2), 330-43 (Eng). The high-resoln. Fourier transform spectra of the $2\nu_4$ absorption band of the AsH₃ mol. is analyzed. About 900 transitions (about 55% of them "forbidden") are assigned to the two components of the $2\nu_4$ band. A set of parameters, including rotational and centrifugal distortion consts. and splitting and resonance parameters, is obtained which reproduces the initial exptl. data within an rms deviation of 0.006 cm⁻¹.

Pype lk
C.A.K.M.P.

C.A. 1995, 123, N10

1996

AsH₃

Смесь

J. Chem. Phys. 1996, 105, 17

p. 7310

Фурье ИК спект.

AsH₃

1996

UK
crump

Sennikov P. G.,
Raldugin D. A. et al.
Spectrochim. Acta,
Part A 1996, 52A
(4), 453-463.

(see PH₃ ; III)

AsH₃

1996

№ 24Б1640. Уровни вращательной энергии ар-
сина в основном состоянии. Ground state rotational
energies of arsine / Tarrago G., Dana V., Mandin J.-Y.,
Klee S., Winnewisser B. P. // J. Mol. Spectrosc.— 1996.—
178, № 1.— С. 10-21.— Англ.

В результате совместного анализа литературных дан-
ных по спектрам поглощения в средней и дальней ИК-
области, в радиочастотном и микроволновом диапазонах
получен набор молекулярных постоянных AsH₃, воспро-
изводящий с высокой точностью положение эксперимен-
тально наблюдаемых переходов. Рассчитаны частоты и
интенсивности всех вращательных переходов с $\Delta J=1$,
 $\Delta |K|=0$, $\Delta F=0, \pm 1$ и $\Delta J=0$, $\Delta |K|=0, \pm 3$, $\Delta F=0, \pm 1$ для
 $J \leq 20$. В. М. Ковба

М.П.

Х. 1997, № 24

AsH₃

1996

126: 81408j High resolution spectroscopic study of arsine: $3\nu_1$ and $2\nu_1 + \nu_3$ dyad: The tendency of symmetry reduction. Ulenikov, Oleg N.; Sun, Fu-ge; Wang, Xiao-gang; Zhu, Qing-shi (Dep. Chem. Phys., Univ. Sci. Technol. China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(17), 7310-7315 (Eng), American Institute of Physics. The high resolu. spectrum of AsH₃ $3\nu_1$ and $2\nu_1 + \nu_3$ stretching overtone dyad was recorded and analyzed. The major vibration-rotation parameters of these overtones were obtained. These overtone vibrational states are close to the local mode limit and the rotational levels show the tendency to approach an asym. top.

$3\nu_1, 2\nu_1 + \nu_3$

C. A. 1997, 126, N 6

AsH₃

чек
рекорд
параметры.

1998
130: 58579q The high resolution spectrum of AsH₃ (4 0 0) local mode state: symmetry reduction and rotational re-quantization. Cheng, Ji-Xin; Wang, Xiao-Gang; Lin, Hai; Zhu, Qing-Shi (Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Anhui, Peop. Rep. China 230026). *Spectrochim. Acta, Part A* 1998, 54A(12), 1947-1960 (Eng), Elsevier Science B.V.. The (4 0 0) stretching overtone band of AsH₃ at 7900-8100 cm⁻¹ was recorded by a Fourier transform spectrometer with a resolu. of 0.01 cm⁻¹. The A₁ or A₂ - E degeneracy of the upper state rotational levels up to J' = 8 was obsd. It is interesting to find that this spectrum resembles an A, C hybrid band of an asym. top and can be assigned by only one set of quantum nos. J, K_a and K_c. The rotational levels were detd. by combination difference method and fitted in both the sym. top and the asym. top models. In the latter case, the effective rotational consts. A, B and C are in good agreement with the values predicted by a simple local mode model, indicating that the dynamical symmetry of AsH₃ in the (4 0 0) local mode state has reduced to that of an asym. top. The transition from normal mode to local mode vibration from v = 1 to 4 in AsH₃ was discussed.

C. A. 1999, 130, N5

AsH₃

1998

128: 236505f High-resolution spectroscopic study of the (310) local mode combination band system of AsH₃. Lin, Hai; Ulenikov, Oleg N.; Yurchinko, Sergi; Wang, Xiao-gang; Zhu, Qing-shi (Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 187(1), 89-96 (Eng), Academic Press. The high-resoln. spectra of AsH₃ in the 8130-8340 cm⁻¹ region, which were assigned to the (310;A₁), and (310;E₁), and the (310;E₂) local mode combination bands, were recorded at a resoln. of 0.01 cm⁻¹ and rotationally analyzed. The spectroscopic parameters were obtained by least-squares fitting. The rotational energy levels were fitted for the (310;A₁) state (21 levels in all) up to J = 5, for the (310;E₂) state (43 levels in all) up to J = 7, and for the (310;E₁) state (43 levels in all) up to J = 5. The complication of the rotational structure indicates rotational perturbation.

срешно
нечок.
пазреш.

C.A. 1998, 128, N19

AsH₃

1998

129: 348700t Two photons excited 4d Rydberg state of AsH₃.
Qin, Ran; Pei, Lin-sen; Fei, Wang; Yang, Chen; Cong-xiang, Chen;
Yu, Shu-qin; Ma, Xing-xiao (Department of Chemical Physics, Uni-
versity of Science and Technology of China, Hefei, Peop. Rep. China
230026). *Acta Phys. Sin. (Overseas Ed.)* 1998, 7(8), 567-571 (Eng),
Chinese Physical Society. By using resonance enhanced (2+1) multipho-
ton ionization (REMPI) of AsH₃ and detecting the daughter mol. ions
AsH⁺ and As⁺, a long progression discrete structure was obtained from
267 to 291 nm, which obeys the formula $\nu_0(\text{cm}^{-1}) = 68875.3 + 504.1\nu'_2 + 5.26\nu'^2_2$. Anal. of the spectrum revealed that it belongs to 4d Ryd-
berg state transition. Assignment yields the 4d Rydberg state parameters
 $T_0 = 67881.1 \text{ cm}^{-1}$, $\omega'_0 = 495.1 \text{ cm}^{-1}$ and $\delta = 0.962$. Finally the 4d
Rydberg state structure of AsH₃ was discussed.

4d Rydberg-
core, n

C.A. 1998, 129, n 26

AsH₃

1998

128: 223096y Saturation spectrum of the ν_2/ν_4 dyad of AsH₃.
Spiegl, G.; Kreiner, W. A. (Abteilung Chemische Physik, Universitat
Ulm, D-89069 Ulm, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 187(2), 142-
152 (Eng), Academic Press. The ν_2/ν_4 dyad of AsH₃ was studied at
875-1100 cm⁻¹ by laser sideband spectroscopy. In total 189 transitions
were obsd. with sub-Doppler resoln. (≈ 300 kHz) and measured to an
abs. accuracy of ~ 100 kHz. These data may be useful to serve as a
secondary frequency std. The observations include 4 perturbation-
allowed transitions with $\Delta(k-l) = 3$. Satn. spectra of dipole forbidden
transitions was not previously reported for AsH₃. Quadrupole hyperfine
structure, as well as vibration-rotation splitting of $|k-l| = 3N$ levels in
both fundamentals, was analyzed. Combining the results with MW and
RF data (239 frequencies) reported in the literature, a total of 882 transi-
tion frequencies were available to fit 15 ground state parameters and 48
excited state parameters of the ν_2/ν_4 dyad. The std. deviation of the fit
is 245 kHz.

($\nu_2 - \nu_4$)

C.A. 1998, 128, N18

AsH₃

1999

(cnekmp)

130: 188650s High resolution spectroscopic study of arsine in the region 6000–6500 cm⁻¹. Wang, Dong; Lin, Hai; Wang, Xiao-Gang; Zhu, Qing-Shi (Open Laboratory of Bond-Selective Chemistry and Institute for Advanced Study, University of Science and Technology of China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Spectrochim. Acta, Part A* 1999, 55A(1), 109–119 (Eng), Elsevier Science B.V.. A high resolu. Fourier transform spectrum in the 2nd stretching overtone manifold of arsine was recorded at a resolu. of ~0.017 cm⁻¹ in the region 6000–6500 cm⁻¹. The stretching combination bands of (210;A₁), (210;E), (210;hE) and (111;A₁) in the local mode notation are rotationally analyzed. The vibrationally off-diagonal H₂₂ resonance terms are important for these combination bands. Thirty-nine vibration-rotational parameters are derived from the weighted nonlinear least-squares fitting with 376 upper state levels included. The simulated spectrum based on the fitted vibration-rotational parameters agrees well with the obsd. one. The parameters obtained are discussed from three local mode models.

C.A. 1999, 130, N14

2000

F: AsH3

P: 3

133:65367 False lines due to folding in Fourier
transform spectroscopy. Chen, Xiyi; Lin, Hai;
Wang, Dong; Zhu, Qingshi Open Research Laboratory
for Bond Selective Chemistry and Advanced Institute of
Research, Universi Science and Technology of China
Hefei 230026, Peop. Rep. China Huaxue Wuli
Xuebao, 13(2), 129-134 (Chinese) 2000 The
phenomenon of false lines due to folding in Fourier
Transform Spectroscopy is explained using by Nyquist
sampling theorem. The charact false lines are

discussed. The key to avoid false lines is to use suitab filters to remove the signal outside the wanted spectral region. Two kin filters, optical and electronic filters namely, are compared to serve thi purpose. Both kind of filters should be combined to prevent folding as w secure a good signal to noise ratio. Some exptl. parameters setting rule advanced. The method proved to be successful in the expts. of recording 3 and $v = 4$ highly vibrational spectra of AsH_3 .

2000

F: ASH3

P: 3

132:214123 Local mode spectroscopic study of the
AsH3 molecule: the perturbed (500) local mode
overtone. Hai, Lin; Ulenikov, Oleg N.;
Olekhnovitch, Igor M.; Dong, Wang; Chen, Xi-Yi; Hao,
Lu-Yuan; Zhu, Qing-S Laboratory of Bond Selective
Chemistry, University of Science and Technology of
China Hefei 230026, Peop. Rep. China Chin.
Phys. (Beijing), 9(2), 113-118 (English) 2000
The high resolu. Fourier transform spectra of

C.A. 2000, 132

AsH₃ at 9720-9900 cm⁻¹, which had been recorded at a resolu. of 0.015 cm⁻¹, were assigned to the (500; A₁) and (500; E) local mode overtones and rotationally analyzed. The effective spectroscopic parameters were obtained by nonlinear least-squares fitting the vibration-rotational Hamiltonian with the rotational energy levels up to J = 6 (98 levels in all) included. The evolution of the rotational energy patterns from v = 1 to v = 6 shows that the tendency of normal mode to local mode vibration evolution was stopped by perturbation relatively high energy region.

F: AsH₃

P: 3

2001

134:372013 **Density Functional Studies on the Lone Pair Effect of the Trivalent Group (V) Elements: I. Electronic Structure, Vibronic Coupling, and Chemical Criteria for the Occurrence of Lone Pair Distortions in AX₃ Molecules (A=N to Bi; X=H, and F to I).** Atanasov, M.; Reinen, D. Fachbereich Chemie, Philipps-Universitaet und Zentrum fuer Materialwissenschaften, Marburg, Germany. J. Phys. Chem. A (2001), 105(22), 5450-5467. in English.

The energetic, steric, and bonding properties of mols. AX₃ (A = N to Bi; X = H, F to I) are analyzed using d. functional theory. It is found that the "lone pair" in the initial D_{3h} geometry is of central atom pz character for the NX₃ and AH₃ mols., whereas it possesses s symmetry in all other cases - here generally with a strong delocalization toward the ligands. The stabilization of the distorted C_{3v} geometry is due mainly to covalency effects, whereas steric interaction forces according to the Gillespie-Nyholm model do not seem to play a significant role. The



application of the conventional vibronic pseudo Jahn-Teller coupling approach (PJT), here for the $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ transition [$A_1' \otimes (\alpha_2'' + \alpha_1') \otimes A_2''$ interaction], is an appropriate means for inorg. chemists to predict trends for the extent of distortion and for the corresponding energy gain. The vibronic coupling const. and the vibronic stabilization energies, which mainly det. the total $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ energy gain, vary according to the sequences $F > H > Cl > Br > I$ (A: N to Bi), and $N > P > As > Sb > Bi$ (X: H, F), the dependence on A being only small or not present (X: Cl to I). Thus, the hardest mols. are the most susceptible to vibronic coupling, the latter energy being approx. imaged by the hardness difference $\eta(C_{3v}) - \eta(D_{3h})$. A roughly inverse trend is obsd. if the extent of the angular distortion $\tau\alpha$ from D_{3h} to C_{3v} symmetry is considered; here, the softest mols. such as $Sb(Bi)Br_3$ exhibit the largest and NH_3 the smallest deviations from D_{3h} geometry. The different sequences for $\tau\alpha$ are due to the strong influence of the force const., which represents the $C_{3v} \rightarrow D_{3h}$ restoring energy. It is remarkable that the vibronic coupling energy is strongly correlated with the chem. hardness η (an observable quantity), while the stabilization energy for the $D_{3h} \rightarrow C_{3v}$ transition is not directly reflected by η , in contrast to what is generally called the "principle of max. hardness".
