

FeH

BeH, TiH (cncap)

1969

Swings P.,

6 7
VI 7356

Mem. Soc. Roy. Sci. Liege, Collect. 8, 1969,
18, N° 3, 26 pp (annu.)

Free radicals in astrophysics.

7



10

(+)

CB, 1970, 72, N° 2, 1162257

FeH

1972

171088d Spectrum of iron hydride. Laboratory and solar identification. Carroll, P. K.; McCormack, P. (Phys. Dep., Univ. Coll., Dublin, Ire.). *Astrophys. J.* 1972, 177(1)(Pt. 2), L33-L36 (Eng). A new complex mol. spectrum was obsd. under high resolu: in the blue-green region. The mol. responsible was identified as FeH, for which no spectrum has, up to the present, been reported. A King furnace was used in the expts., and observations were made in both emission and absorption. Comparison of the lab. wavelengths with those in the revised Rowland table shows many coincidences with weak unidentified solar lines, especially lines which either are enhanced in the sunspot spectrum or are obsd. only in the spot.

check

C.A. 1972, 77, N26

FeH

1972

Мастрюков В. С.

Ze

ж. структур. химии,
1972, 13, N 3, 379-383.

● (см SCH) III

FeH

1972

2 Б21. Основное и низколежащие возбужденные электронные состояния FeH. Walker J. H., Walker T. E. H., Kelly H. P. Ground and low-lying excited electronic states of FeH. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 5, 2094—2098 (англ.)

В рамках многочастичной теории возмущений проведен расчет потенциальных кривых 8 секстетных и 10, квартетных электронных состояний FeH при межъядерных расстояниях от 2,5 до 3,5 ат. ед. В качестве невозмущенных базисных функций использованы АО Fe; возмущение определялось взаимодействием с дополнительным электроном и протоном. Найдено, что основным состоянием является ${}^6\Sigma^+$, низшим квартетным — ${}^4\Sigma^+$ (эксперим. данные отсутствуют). Для каждого состояния получены значения терма, равновесного межъядерного расстояния и основной частоты колебаний. Отмечено, что вычисленные значения энергии должны давать верхнюю оценку хартри-фоковской энергии, а волновые

(м.п., до)

Х. 1972. №2 .

функции достаточно близки к функциям Хартри—Фока. Расчет корреляц. энергии не проводился, однако ряд факторов указывают, что ее изменение при образовании молекулы невелико. Поскольку все рассчитанные состояния (кроме одного) соответствуют одной и той же конфигурации объединенного атома, их корреляц. энергии не должны существенно различаться. Предсказаны энергия диссоциации (56 ккал/моль), типы и частоты основных переходов в спектре поглощения, направление изменения g -фактора и качеств. картина расщепления в нулевом поле.

Н. Ф. Степанов

FeH

1972

✓ 1 Д131. Основное и низковозбужденные электронные состояния FeH. Walker J. H., Walker T. E. H., Kelly H. P. Ground and low-lying excited electronic states of FeH. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 5, 2094—2098 (англ.)

В рамках многочастичной теории возмущений проведен расчет потенц. кривых 8 секстетных и 10 квартетных электронных состояний FeH. Полным набором невозмущенных базисных ф-ций служили ранее полученные орбитали атома Fe; возмущение определялось дополнительным электроном и протоном. Основным состоянием FeH является ${}^6\Sigma^+$, низшим квартетным — ${}^4\Sigma^+$ (эксперим. данные отсутствуют). Для каждого состояния получены значения терма T_e , равновесного межъядерного расстояния и основной частоты колебаний. Вычисленные значе-

Электр

сост.

(123):

Р. Ж. Ф. 1973. 1

ния энергии должны быть верхней гранью для хартри-фоковской энергии, а волн. ф-ции — достаточно близки к ф-циям Хартри — Фока. Расчет корреляционной энергии не проводился, однако ряд фактов свидетельствует в пользу того, что ее изменение при образовании молекулы должно быть малым. Кроме того, все рассчитанные состояния (кроме одного) соответствуют одной и той же конфигурации объединенного атома, так что их корреляционные энергии не должны существенно различаться. Предсказаны энергия диссоциации (56 ккал/моль), типы и частоты основных переходов в спектре поглощения (${}^6\Pi \leftarrow {}^6\Sigma + 5900 \text{ см}^{-1}$, ${}^4\Pi \leftarrow {}^4\Sigma + 6400 \text{ см}^{-1}$ и т. д.); направление изменения g -фактора по сравнению со значением для свободного электрона и качеств. картина расщепления в нулевом поле.

А. И. Дементьев

FeH

1972

М. П.
Кв. мех.
расчет

132603y Ground and low-lying excited electronic states of iron monohydride. Walker, J. H.; Walker, T. E. H.; Kelly, H. P. (Dep. Phys., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(5), 2094-8 (Eng). Many-body perturbation theory is used to carry out an approx. Hartree-Fock calculation on electronic states of FeH with a single-center basis set. Approx. potential curves are obtained and used to predict the main features of the spectrum. They are also employed to interpret the known spectra of the "isoelectronic" FeCl.

C.A. 1972. 77. 20

FeH ^{nummer N 14} 1973
Banche Stockholm. Univ.

Klynnig L; et al.

USIP Report 73-20, Dec. 1973
Univer. of Stockholm. Instit.
of Physics.

The spectrum of FeH between
 $\lambda 9896 \text{ \AA}$ and $\bullet \lambda 10200 \text{ \AA}$.

Fell

number 4641

1973

Smith R.E.

Proc. Roy Soc. London,
1973, A332, 113-127.

enclp.

● (see Sect) III

41126.7887
Ch, Ph, TC

96201 FeH^+O_2

1974

*4-7365

Melius C.F., Olafson B.D., Goddard W.A.,
III.

Fe and Ni ab initio effective potentials
for use in molecular calculations.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 4,
457-462 (англ.)

0243 ПИК

226 226

235

ВИНИТИ

FeH

*У - 10038

1975

3 Б208. Электронная структура FeH. Scott P. R. Richards W. G. Electronic structure of FeH. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 4, 1690—1691 (англ.)

В приближении Хартри-Фока вычислены спектроскопич. постоянные T_e , r_e и ω_e для пяти наименьших состояний молекулы FeH, с целью проверки результатов, сообщенных Уолкером и др. (РЖХим, 1973, 2Б21). Установлено, что в отличие от результатов Уолкера и др., основным состоянием является ${}^6\Delta$, а наиболее близко лежащими состояниями являются состояния ${}^6\Pi$ и ${}^6\Sigma^+$. Метод, использованный Уолкером и др., не обеспечивает достаточной точности расчета электронных состояний молекул типа FeH. С. Н. Мурзин

Электр.
Структ.

x 1976 N3

FeH

ТД138. Электронное строение FeH. Scott P. R., Richards W. G. Electronic structure of FeH. «J. Chem. Phys.», 1975, 63, № 4, 1690—1691 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение FeH (I) в состояниях ${}^6\Delta$, ${}^6\Sigma^+$, ${}^6\Pi$, ${}^4\Delta$ и ${}^4\Pi$. Для атома Fe использован двухэкспоненц. базис орбиталей слэйтеровского типа (по Клементи), дополненный двумя $4p$ - и одной $4f$ -ф-циями, а для атома H — две $1s$ - и по одной $2s$ -, $2p$ - и $3d$ -ф-ции. Приведены спектроскопич. постоянные и проведен анализ заселенностей. Обнаружено, что энергии высокоспиновых состояний возрастают в ряду ${}^6\Delta < {}^6\Sigma^+ \approx {}^6\Pi$, а низкоспиновые расположены на ~ 3 эв выше основного ${}^6\Delta$. Для основного состояния I длина связи оценена в $1,73 \text{ \AA}$ и колебательная частота $\omega_e = 1650 \text{ см}^{-1}$. Высшей занятой является дважды заполненная 6σ -МО, а следующая по энергии — однократнозаполненная 7σ -МО, основной вклад в которую вносит $3d$ -АО. Показано, что связь в гидридах переходных металлов осуществляется в основном $4s$ -, $4p$ - и $1s$ -АО, а $3d$ -АО остаются практически неизменными сравнительно со свободным атомом. Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов других авторов. В. Л. Лебедев

1975

10032

4

*

Электр.
Стройе

Ф1976
N1

FeH

43-10038

(u.n.)

vb. seen.

fraction

154845e Electronic structure of iron hydride (FeH). Scott, P. R.; Richards, W. G. (Phys. Chem. Lab., Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *J. Chem. Phys.* 1975, 63(4), 1690-1 (Eng). Calcns. on the low-lying states of FeH were performed in the matrix Hartree-Fock approxn. to give spectroscopic consts. and the orbital energies and population analyses of the valence orbitals of the ${}^6\Delta$ state at the equil. internuclear distance, resulting in the following conclusions: (1) the low-spin states lie at ~ 3 eV above the ground state, which is high-spin; and (2) the ordering of the high-spin states is predicted to be ${}^6\Delta < {}^6\Sigma^+ \sim {}^6\pi$; the calcd. splitting between the ${}^6\Sigma^+$ state and the ${}^6\Pi$ state is probably of a magnitude comparable to the accuracy of the calcn.; and the ground state of FeH is predicted to be ${}^6\Delta$ with 2 low-lying states, ${}^6\Pi$ and ${}^6\Sigma^+$. The calcd. spectroscopic consts. did not agree with those calcd. by J. H. Walker et al. (1972) who used a single center technique. This indicates that the single center method is not at present sufficiently accurate to be a useful tool for the investigation of the electronic states of transition metal hydrides. The results support the suggestion that the bonding in the early transition metal hydrides is mainly between the 4s, 4p, and 1s orbitals with the 3d orbitals remaining largely unchanged.

C.A. 1975, 83, 118

51003.3757
Ch, Ph, TC, MGU

40892
FeH (Эч. см. ун.)
1975
*4-10038

Scott P.R., Richards W.G.

Electronic structure of FeH.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 4, 1690-1691

(англ.)

0432

436 437

ВИНИТИ

FeH

1976

85:133973w Iron hydride: laboratory studies and solar identification. Carroll, P. K.; McCormack, P.; O'Connor, S. (Phys. Dep., Univ. Coll., Dublin, Ire.). *Astrophys. J.* 1976, 208(3, Pt. 1), 903-13 (Eng). The spectrum of FeH was studied under high resolu. at 2360-8900 Å. Its main features are 2 regions of complex structure in the blue and green centered at ~4920 and 5320 Å, resp., and a band degraded to longer wavelengths with a head at 8690.82 Å. The identity of the carrier as FeH is established on exptl. grounds, and in particular on the basis of the obsd. deuteride spectrum. The smallness of the vibrational isotope shifts for most of the features indicates

min;
Do

C.A. 1976 85 N18

that they are 0-0 bands or sequences. Coincidences were obsd. between lines in the blue and green regions and weak unidentified solar lines. These possible identifications have been subjected to a critical statistical anal., and the presence of FeH in both photosphere and spot has been established with a high degree of certainty. A search for the presence of the 8690.82 Å band with the available solar and lab. data proved neg. An attempt is made to correlate the intensities of the blue and green bands as obsd. in the photosphere, in sunspots, and in lab. spectra. The indications are that FeH has a rather low dissocn. energy (~ 1.0 eV), but that the oscillator strength for the blue and green features may be fairly large ($g_{el}f_{el} \approx 0.67$). The possibility of observing FeH in the spectra of cooler stars is briefly discussed.

FeH

1986

Chenip

126: 98398j Wavelengths and line intensities for the 4920 Å, 5320 Å and 8690 Å bands of Iron hydride (FeH). McCormack, P.; O'Connor, S. (Phys. Dep., Univ. Coll. Dublin, Dublin, Ire.). *Astron. Astrophys., Suppl. Ser.* 1976, 26(3), 373-80 (Eng). Absorption and emission spectra (4500-9000 Å) of FeH were photographed on a 10-m Eagle concave spectrograph and wavelengths and line intensities are presented for some 1700 lines from the most prominent features.

C.A. 1987. 86. 14 ●

ТеН

* 8-14740

1976

2 Б12. Численный метод проведения расчетов методом МК ССП, использующим связанные функции. Kendrick John, Hillier Ian H. A computational method of performing MC SCF calculations using bonded functions. «Chem. Phys. Lett.», 1976, 41, № 2, 283—286 (англ.)

Получены ур-ния, определяющие оптим. набор МО для волновой функции многоконфигурац. метода ССП (МК ССП), и предложен метод их решения, основанный на нахождении матрицы P инфинитезимального преобразования МО, минимизирующего энергию, с помощью первых и вторых пр-ных функционала энергии по элементам P . Ф-лы для пр-ных содержат значения молек. интегралов в базисе МО и элементы матриц плотности 1- и 2-го порядков. Эти ф-лы позволяют

сч. н

X 1977 N2

вести определение МО методом Ньютона — Рафсона или, при использовании лишь диагональных элементов матрицы вторых производных — методом, близким к методу сдвига уровней Хильера и Саундерса. Указано, что алгоритм расчета становится особенно простым при использовании в кач-ве конфигурац. базиса связанных функций Бойза (см. напр., РЖХим, 1958, № 24, 80233). Проведенные в двухконфигурац. приближении расчеты молекулы водорода показали эффективность предлагаемых алгоритмов. Метод применен также для расчета молекулы FeH при фиксированном межъядерном расстоянии $4,73 \text{ \AA}$. Отмечено, что во всех случаях сходимость итераций предложенного метода удовлетворительна.

В. И. Пупышев

G. H.

1976

Scott P. R., et al.

"Mol. Spectrosc. Vol. 4" London,
1976, pp. 95

Unimp.
circular.

FeH

1979

1 Д323. Молекула FeH при температуре 4° K. The FeH molecule at 4° K. Dendramis A., Van Zee R. J., Weltner W., Jr. «Astrophys. J.», 1979, 231, № 2, Part 1, 632—636 (англ.)

В ИК (1200—1700 см⁻¹) и видимой (400—500 нм)

областях получены спектры поглощения молекул FeH и FeD, изолированных в Ar-матрице при t = 4° K. Определены значения молекулярных констант в основном состоянии (в см⁻¹): $\omega_e = 1764$ и 1259, $\omega_e X_e = 46$ и 24 для FeH и FeD соответственно. Экстраполяция по Берджу—Шпонер дает значение энергии диссоциации ~2,0 эв в обоих случаях. Отмечено, что впервые зарегистрированные слабые полосы FeH и FeD в области 400—500 нм позволяют надежнее интерпретировать лабораторные и звездные спектры. Приведены соображения, позволяющие отнести основное состояние исследованных молекул к типу ⁶Δ. Библ. 30. М. Т.

М. Н.

9-1980-11

FeH
FeD

M.H.

1979
91:114813b The iron hydride (FeH) molecule at 4 K. Dendramis, A.; Van Zee, R. J.; Weltner, W., Jr. (Dep. Chem., Univ. Florida, Gainesville, FL 32611 USA). *Astrophys. J.* 1979, 231(2, Pt. 1), 632-6 (Eng). FeH and FeD mols. were trapped in solid Ar at 4 K. From the obsd. IR frequencies, for small solid-state effects, the gas-phase vibrational properties are predicted to be $\omega_e = 1764$ (10) and $\omega_{ex} = 46$ (5) cm^{-1} . D_0 is 2.0 eV from the Birge-Sponer approxn., but is more likely ≈ 1.7 eV on the basis of the application of that approxn. to other diatomic hydrides. Five weak electronic transitions (suggesting low g values) obsd. in absorption in the 4000-5000 Å region are probably counterparts of the blue and green band systems in the gas-phase lab. and stellar spectra. The strongest band occurs at 4190 Å, suggesting that the 4288 Å band studied by A. Heimer (1936) be reinvestigated. Failure to observe an ESR spectrum of FeH in the solid is interpreted as support for an orbitally degenerate ground electronic state, in agreement with the theor. derived $^6\Delta$ ground state.

C.A., 1979, 9, N14

FeH⁺

1979

10 Д181. Сравнение полулокального и нелокального вариантов метода модельного потенциала: расчет Fe и FeH⁺. Dixon R. N., Robertson I. L. A comparison of semi-local and non-local pseudo-potential techniques: calculations on Fe and FeH⁺. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 4, 1223—1237 (англ.)

Методом модельного потенциала рассчитаны электронные энергии систем Fe, Fe⁺, Fe²⁺, Fe³⁺, FeH⁺. В расчете использована новая схема параметризации псевдопотенциала для валентных электронов. Сравнение результатов расчета с результатами самосогласованной процедуры, включающей все электроны, показывает, что введение модельного потенциала приводит к ошибке 1% в орбитальных энергиях электронов, 0,5% в энергии ионизации и 2% в энергии связи молекулы. Проведено детальное сравнение методов, использующих два типа модельного потенциала: нелокальный и

расчет
электрон.
энергий
систем

9-1979/110

1980

FeH
CoH
NiH

17 B71. О корреляции между силовой постоянной и длиной связей МН ($M = \text{Fe, Co, Ni}$). Харитонов Ю. Я., Кварцова Г. В. «Координац. химия», 1980, 6, № 5, 810

Обсуждается найденная авторами корреляц. зависимость между силовыми постоянными (k) и равновесными длинами связей (r_e) в двухатомных гидридах и дейтеридах железа, кобальта и никеля $r_e = 2,35 k^{-1/3} - 0,30$ (1). На ряде примеров показано, что соотношение (1) применимо и к нек-рым гидридным комплексам указанных металлов, и м. б. использовано для расчетов или оценок неизвестных значений r_{MN} , k_{MN} или $\nu(\text{M}-\text{H})$ в этих комплексах. М. Г.

сил. пост.

(+2)



№ 1980 N 17

Ommuck 13156

1981

Do(R-Fe)

Armentrout P.B.,
et al.

R = H, CH₂, CH₃, O J. Amer. Chem. Soc.,
1981, 103, N21, 6501-
-6502.

FeH

omniua 11753

1981.

Kant A; et al.

(Do)

High Temp. Sci., 1981,
14, 23-31.

● (Cell. AlH, III)

FeH

[Ommuck 13561] 1982

meopem.
pacrem

⚡
+7

[96: 149375r Semiempirical calculation method for transition metals. Blyholder, George; Head, John; Ruetz, Fernando (Dep. Chem., Univ. Arkansas, Fayetteville, AR 72701 USA). *Theor. Chim. Acta* 1982, 60(5), 429-44 (Eng). A semi-empirical MO method capable of giving useful bond energy and bond geometry information about transition metal compds. is presented. In this method, which for the 1st time applies a MINDO procedure to transition metals, the 1 electron part of the off diagonal Fock matrix elements are put proportional to overlap divided by inter-nuclear distance rather than being proportional to overlap as is conventional. Good results are obtained for FeH, FeH₄, Fe₂, Fe₆, Fe(CO)₅, FeO, O-Fe-O, and FeO₂ (side- and end-bonded).

©: A. 1982, 96, N18

benzene with Na^+ were investigated by means of ab initio SCF calcs. For the hydrocarbon, the 4-31G basis set and, for the cation, a reoptimized STO-3G basis set were used. The interaction energy equals -49, -60, and -78 kJ/mol, resp. Discussion of the errors involved in the calcs. and comparison with related expts. show that these values are too low by $\sim 20\%$. The arrangement of the cation above the plane of the π -electron system is the most stable one. This is the optimum structure for the electrostatic ion-quadrupole contribution to the interaction energy. The charge transfer to the cation proves to be very small and amts. to a few hundredths of an electron. These characteristics are in agreement with what is known for the cation-donor complexes. On the basis of the ab initio results, the capability of CNDO/2 with such complexes is assessed.

FeM₄

[25.13561]

1982

Blyholder G., et al.

паркин
E

Theor. chim. acta,
1982, 60, N5, 429-
- 444.

•
/ сел. FeM ; III)

FeM

1 055. 13561

1982

7Д106. Полуэмпирический метод расчета соединений переходных металлов. Semi-empirical calculation method for transition metals. Blyholder George, Head John, Ruetle Fernando. «Theor. chim. acta», 1982, 60, № 5, 429—444 (англ.)

расчет E

46

Описана схема расчета электронного строения соединений переходных элементов, базирующаяся на валентном приближении МЧПДП/3. Для элементов с атомными номерами < 19 используется стандартная параметризация МЧПДП/3. Для остальных элементов используются следующие соотношения. Интегралы электрон-электронного взаимодействия различных электронных оболочек полагаются различными. Связевые параметры β^{AB} домножаются на $3/R$, где R — межатомные расстояния, и для p — и d — электронов дополнительно домножаются на эмпирич. коэф., определяемые калибровкой (найденно для атома Fe $K_p = 0,35$, $K_d = 1$). Величины β^{AB} и параметры α^{AB} в отталкивательной части соот-

Ф. 1982, 18, № 4.

ношения для полной энергии (оно такое же, как и в МЧПДП/3) калибровались по такой же схеме, что и в МЧПДП/3. Приведены значения параметров для связей Fe—H, Fe—O, Fe—C и Fe—Fe. По такой схеме рассчитаны FeH, FeH₄, Fe₂, Fe₆, Fe(CO)₅, FeO и различные структуры FeO₂ в различных электронных состояниях.

В. Л. Лебедев

FeH

от 13561

1982

13 Б49. Полуэмпирический метод расчета для переходных металлов. Blyholder George, Head John, Ruette Fernando. Semi-empirical calculation method for transition metals. «Theor. chim. acta», 1982, 60, № 5, 429—444 (англ.)

Предложен полуэмпирич. метод МО, позволяющий в рамках приближения МЧПДП для соединений переходных металлов получать удовлетворительные результаты при расчете энергии связей и их геометрии. Особенно-

расчет Δ_0 ,
геометрии,
структуры

стью параметризации является приближение $H^0_{\mu\nu} \sim S_{\mu\nu}/R$, где $H^0_{\mu\nu}$ — осто́вный резонансный интеграл; $S_{\mu\nu}$ — интеграл перекрывания, R — межъядерное расстояние. Представлены результаты расчетов FeH , FeH_2 , Fe_2 , Fe_6 , $\text{Fe}(\text{CO})_5$, FeO , $\text{O}-\text{Fe}-\text{O}$ и Fe_2O_3 , хорошо согласующиеся с экспериментом. В. И. Хлесков

⊠ (+7)

х. 1982, 19, N13.

FeD

[Om. 23 328]

1983

100: 42141k Rotational analysis of the 9877 and 8960 Å bands of iron deuteride (FeD). Balfour, Walter J.; Lindgren, Bo; O'Connor, Seamus (Inst. Phys., Univ. Stockholm, Stockholm, Swed.). *Phys. Scr.* 1983, 28(5), 551-60 (Eng). The many-line IR system of FeD was studied in absorption and thermal emission. Approx. 1000 lines in the (1,0) and (0,0) bands of a ${}^4\Delta\text{--}{}^4\Delta$ transition were assigned. All 4 subbands show Λ -splitting occurs in the lower electronic state. Rotational analyses were performed yielding the following rotational consts. (in cm^{-1}): for the lower ${}^4\Delta$ state: $B_0'' = 3.4357$, $D_0'' = 8.49 \times 10^{-5}$; for the upper ${}^4\Delta$ state: $B_0' = 2.9846$, $D_0' = 9.20 \times 10^{-5}$, $B_1' = 2.9076$, and $D_1' = 9.31 \times 10^{-5}$. Both ${}^4\Delta$ states are inverted. Values of $\omega_e' \approx 1070 \text{ cm}^{-1}$ and $\omega_e'x_e' \approx 19 \text{ cm}^{-1}$ are suggested for the $\Omega = 7/2$ component of the upper state and similar values are anticipated in the other 3 spin components. Although the system appears in absorption at high temps., the lower ${}^4\Delta$ state does not seem to be the ground state.

фрагмент
анал

C.A. 1984, 100, N 6

FeH

1983

Blyholder G., Mead J.,
et al.

ν_i , E, Surface Sci., 1983, 131,
 ΔH_s ; N2-3, 403-418.

(cur. Fe₂; III)

Fell

[Om. 20391]

1983

ell. n.,
Обзор

Sassenberg U.,
Inaugural dissertation,
Institute of Physics,
University of Stockholm
S-113 46 Stockholm,
● 1983.

Fell

[Cm. 16895]

1983

Fell

Stevens A., Feigerle C.S.,
et al.

некритич.
структура

J. Chem. Phys., 1983,
78, N 9, 5420-5431.

FeH

1983

meopem.
paarem,
muh
och.
coem.

Walch S. P., Baeschli -
Cher Ch. W. Fr.

J. Chem. Phys., 1983,
78 (7), 4597-4605.

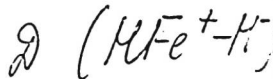
( Cher. TiH; III)

~~Дополнение~~

1984

21 Б4072. Свойства и реакции органометаллических фрагментов в газовой фазе. Исследования FeH^+ в ионном пучке. Properties and reactions of organometallic fragments in the gas phase. Ion beam studies of FeH^+ . Halle L. F., Klein F. S., Beauchamp J. L. «J. Amer. Chem. Soc.», 1984, 106, № 9, 2543—2549 (англ.)

Методом ионного пучка исследованы реакции ионов Fe^+ с H_2 и D_2 ионов FeH^+ с D_2 , NH_3 , PH_3 , CH_4 , C_2H_6 , C_4H_{10} , C_2D_4 , CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, CH_3CHO , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{O}$. Ионы Fe^+ получали разл. FeCl_3 и ионизацией атомов Fe на Пв рения при $t_{\text{ре}} \sim 2500 \text{ K}$. Ионы ускорялись и фокусировались системой электростатич. и квадрупольных линз на вход магнитного масс-спектра с 60° -ным магнитом. Селектированный ионный пучок замедлялся и проходил через ячейку, содержащую рассеивающий газ. Ионные продукты анализировались по массам и регистрировались квадрупольным масс-спектром с умножителем в режиме счета отдель-



(+3)

OH^-
"MM"

X. 1984, 19, N 21.

ных ионов. Для получения ионов FeH^+ исследовали источник с бомбардировкой электронами с энергией 70 эВ газ. 1,1-диметилферроцена. Ф-ция возбуждения р-ции $\text{Fe}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{FeH}^+ + \text{H}$ обладает ярко выраженным максимумом при энергии взаимодействия ~ 4 эВ и описывается выражением $\sigma(E) = \sigma_0 [(E - E_0)/E]^n$ (1) с параметрами $n=1$, $\sigma_0=1,70 \text{ \AA}^2$ и $E_0=2,0 \pm 0,15$ эВ. Величина энергии связи $D^0(\text{Fe}^+ - \text{H})$, определенная из значения E_0 и $D_0(\text{H} - \text{H})$ с учетом поправок на энергию нул. кол. составляет $2,55 \pm 0,15$ эВ. Увеличение энергии взаимодействия приводит к постепенному уменьшению $\sigma(E)$. Для р-ции с D_2 ур-ние (1) обладает параметрами $n=1$, $\sigma_0=0,84 \text{ \AA}^2$ и $E_0=2,0 \pm 0,15$ эВ. Величина $D^0(\text{Fe}^+ + D) = 2,60 \pm 0,2$ эВ. Определена величина сродства к протону атома железа, к-рая составляет 190 ± 5 ккал/моль. Единственным ионным продуктом взаимодействия FeH^+ с D_2 является FeD^+ . Ф-ция возбуждения этой р-ции резко возрастает от 0 при $E=1$ эВ до $\sigma \leq 0,54 \text{ \AA}^2$ при $E=6$ эВ и быстро спадает с увеличением энергии. В форме ур-ния (1) она описывается параметрами $n=3$, $\sigma_0=0,73 \text{ \AA}^2$ и $E_0=0,9$ эВ. Пороговая энергия практически равна энергии активации процесса. Обнаружено, что поперечное сечение передачи протона $\text{FeH}^+ + \text{V} \rightarrow \text{VH}^+ + \text{Fe}$ (2) возрастает в ряду $\text{V} = \text{H}_2\text{CO}$, НСООН , $\text{CH}_3\text{ОН}$, $\text{CH}_3\text{СНО}$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{ОН}$, CH_3CN , $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$. Пороговое сродство к протону, необходимое для осуществления р-ции (2) составляет $-16,0$ ккал/моль. Сечение р-ции (2) для $\text{V} = \text{NH}_3$ и PH_3 очень низкое несмотря на высокое сродство к протону. Другим каналом взаимодействия FeH^+ с углеводородом является р-ция $\text{FeH}^+ + \text{AH} \rightarrow \text{FeH}_2^+ + \text{A}^+$ (3). Обнаружено, что заметное сечение р-ции (3) имеет только для $\text{AH} = (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$, CH_3NH_2 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{СОН}$ и $\text{CH}_3\text{СНО}$. Определен нижний предел величины $D(\text{HFe}^+ - \text{H}^-)$, к-рый составляет 232 ккал/моль. Показано, что канал образования FeH^+ при низких энергиях для метана и этана не реализуется. Для бутана при $E=0,5$ эВ сечение образования $\text{Fe}(\text{C}_4\text{H}_9)^+$ составляет $3 \text{ \AA}^2$. Р-ция FeH^+ с C_2D_4 протекает с образованием FeD^+ и C_2HD_3 , причем ф-ция возбуждения резко падает от $20 \text{ \AA}^2$ при $E=0$ до $0,1 \text{ \AA}^2$ при $E>1$ эВ. Показано, что р-ции FeH^+ с кислородосодержащим орг. соединениями имеют сложный характер, и обладают несколькими каналами, составляющие от 5 до 80% полного сечения реакции.

Л. Ю. Русин

Fell

Om. 18577

1984

crekmp

Pasternak M.,
Heyden M. Van der,
et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1984, ● 104, N4,
398 - 400.

FeH($X^5_\Delta, \text{re}, \omega_e$) (OT 18849) 1984
SCF/MRSD Walch Stephen P.
CI pacrim Chem. Phys. Lett.
1984, 105(1), 54-57.

(see FeH(X^4_Δ, Ae); III)

FeH⁻

От 18849 1984

12 Б1014. Теоретическое доказательство, подтверждающее отнесение основного состояния FeH к ⁴Δ-типу. Theoretical evidence supporting the ⁴Δ ground-state assignment for FeH. Walch Stephen P. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 54—57 (англ.)

Электронное строение основного (⁵Δ) состояния аниона FeH⁻ исследовано с помощью комбинированного расчета методом обобщенных валентных схем (ОВС) и методом конфигурац. взаимодействия (КВ). Расчет выполнен в базе (16s12p6d1f/7s5p3d1f) сгруппированных гауссовых ф-ций для Fe и (8s4p/5s3p) для H. Волновая ф-ция метода ОВС использована для построения КВ в приближении одно- и двухкратных возбуждений из нескольких исходных конфигураций. Возбуждения высшего порядка учтены с помощью поправки Дэвидсона. Рассчитанное значение равновесного расстояния $R(\text{Fe}-\text{H}) = 1,72 \text{ \AA}$ и спектроскопич. постоянные ~~удовлетворительно~~ согласуются с эксперим. данны-

м.п., Ae

Х. 1984, 19, № 12 FeH

ми. Полученные результаты сопоставлены с результатами неэмпирич. расчета методом КВ нижний $^4\Delta$ - и $^6\Delta$ -состояний FeH (Walch S. P., Bauschlicher C. W., «J. Chem. Phys.», 1983, 78, 4597). Оцененное сродство к электрону FeH $E_A=0,78$ эВ на 0,15 эВ меньше эксперим. оценки. В согласии с фотоэмиссионными спектральными данными переход от FeH- к основному состоянию ($^4\Delta$) FeH сопровождается заметным (0,12 Å) изменением межъядерного расстояния, тогда как при переходе в состояние $^6\Delta$ расстояние Fe—H меняется незначительно ($<0,01$ Å).

О. Гриценко



FeH

X⁴Δ

Ае, м.п., Σ ;

90.1984, 18, 17

ОМ. 18849 1984

7 Д110. Теоретические основания, подтверждающие $^4\Delta$ отнесение для основного состояния FeH. Theoretical evidence supporting the $^4\Delta$ ground-state assignment for FeH. Walch Stephen P. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 105, № 1, 54—57 (англ.)

Для отнесения основного электронного состояния по результатам эксперим. исследования фотоприлипания электрона, выполнены неэмпирич. расчеты FeH⁻. Расчет низших электронных состояний FeH⁻ проведен с помощью метода обобщенных валентных схем с последующим учетом конфигурац. взаимодействия. Показано, что основным состоянием FeH⁻ является $^5\Delta$ -состояние. На основании полученных результатов и результатов расчета состояний $^4\Delta$ и $^6\Delta$ FeH многоконфигурац. методом ССП в полном пространстве активных орбиталей, сделан вывод о том, что состояние $^4\Delta$ является основным для FeH. Величина сродства к электрону и колебат. структура спектра фотоприлипания электрона, рассчитанные в рамках данной модели основного состояния, хорошо согласуются с эксперим. данными. Е. А. Ж.

FeH⁻ (м.п.)

FeH ($X^4\Delta$, Ae) (Om. 18849) 1984
meop. paper

GVB/MRSD CI
paper

100: 145197n Theoretical evidence supporting the $^4\Delta$ ground-state assignment for iron hydride (FeH). Walch, Stephen P. (Polyatomics Res. Inst., Mountain View, CA 94043 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 105(1), 54-7 (Eng). The results of GVB/MRSD (generalized valence bond/multiple single and double excitation) CI calcns. for the $^5\Delta$ state of FeH- are combined with the results of previous complete active space SCF/MRSD CI calcns. for the $^4\Delta$ and $^6\Delta$ states of FeH to provide theor. confirmation of the qual. arguments used by A. E. Stevens, et al., (1983), to assign the lowest state of FeH as $^4\Delta$. The calcd. electron affinity of FeH and the calcd. bond length and vibrational frequency for the $^5\Delta$ state of FeH- are in good agreement with exptl. ests.

(H) $\boxtimes$ FeH⁻ ($X^5\Delta$, 2e, We) 

SCF/MRSD CI paper

C.A. 1984, 100, N 18

FeH

(Om. 31122)

1985

Krassell, Stevens W. F.,

Электрон.
структура

J. Chem. Phys., 1985,
82, N 12, 5584-5596.

FeH(2)

DM-22 261a"

1985

Squires R. R.,

J. Amer. Chem. Soc., 1985,
107, N 15, 4385-4390.

No

Fell (17) Om. 21908 122190 1985

Sallans L., Lane K. R.,
Squire R. R., Freiser B. S.,

J. Amer. Chem. Soc., 1985, 107, N15,
4379-4385.

Do, Generation and Reactions of Atomic Metal Anions in the Gas Phase. Determination of

the Heterolytic and Homolytic
Bond Energies for VH , CrH , FeH ,
 CoH , and MoH .

FeH

1986

Bruna P. 7., Anglada 7.

керзке NATO ASI Ser., Ser.
воздуч. C 1986, 176, 67-78.
сведений.

(сер. ScH; III)

FeH

[Orn. 25942]

1986

CoH

Chong D.P., Langhoff S.R.,

Bauschlicher Ch. W., Jr.,

Walsh S.P., ~~et al.~~, Padridge R.

J. Chem. Phys., 1986, 85,

N5, 2850-2860.

u.n.,
meopen.
pacerem

(Cu. Se H; III)

FeH

1986

Elkind G. I.,
Armentrout P. B.

No; Inorg. Chem., 1986, 25,
n^o 8, 1078-1080.

($\text{Ce}^{\bullet} \text{ScH}^+; \text{III}$)

FeH^+

OM. 24230

1986

22 Б4046. Реагирует ли ион Fe^+ в основном состоянии с H_2 ? Does ground state Fe^+ react with H_2 ? Elkind J. L., Armentrout P. B. «J. Amer. Chem. Soc.», 1986, 108, № 10, 2765—2767 (англ.)

С помощью метода ионного пучка изучена кинетика взаимодействия иона Fe^+ в основном состоянии ^6D и 1-м электронновозбужденном состоянии ^4F с молекулами D_2 в газовой фазе. Ионы Fe^+ получали методами поверхностной ионизации и электронного удара. Установлено, что несмотря на то, что энергия возбуждения для состояния ^4F составляет лишь 0,25 эВ, ион $\text{Fe}^+(^4\text{F})$ оказывается в ~ 80 раз более р-ционноспособным при образовании иона FeD^+ . Вычислена величина энергии связи в ионе FeH^+ , составляющая $(2,06 \pm 0,2)$ эВ, что хорошо согласуется с результатами последних теорет. расчетов. Различие в р-ционной способности двух состояний иона Fe^+ проанализировано в рамках теории молек. орбиталей.

А. Б. Мазалецкий

Do

X. 1986, 19, ~22

FeH⁺

1986

(y) meopem,
pacnem

105: 121181e Orbital resonance in gaseous reactions between metal monohydride ions and methane. Kolbanovskii, Yu. A.; Gagarin, S. G. (Inst. Neftekhim. Sint. im. Topchieva, Moscow, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* 1986, (6), 1291-4 (Russ). From theor. calcs., the obsd. orbital resonance between MO of CH₄ and NiH⁺ explains the occurrence of reaction. CH₄ + NiH⁺, as opposed to FeH⁺ and CoH⁺ for which the acceptor level is higher than the top donor level of CH₄. The ionization potentials of FeH⁺, CoH⁺, and NiH⁺ from inner valence state 1σ were calcd. by SCF Xα method.

(12) CoH⁺,

NiH⁺

C. A. 1986, 105, N 14

FeH^+

1986

Schilling J. Bruce,
Goddard W. A., III; et al.

prop.
uncorr. J. Am. Chem. Soc. 1986,
108 (4), 582-4.

($\bullet$ Cu. CaH^+ ; III)

FeH(2) [Om. 25129] 1986

Tolbert M.A., Beauchamp
J.L.,

Do

J. Phys. Chem., 1986,
90, N21, 5015-5022.

FeH

1987

Davis Sumner P.

Publ. Astron Soc.

Pac. 1987, 99 (621),

1105-14.

(спектр)
обзор

( ArH^+ ; III)

FeH

1987

FeH⁻

Dolg M., Wedig U.
et al.

Arbeitsber. / Inst. Theor.
Chem. Univ. Stutt-
gart. 1987, N26, C.
95-103. (Cor. ScO ; III)

u.n.

Fell

[om. 26582]

1987

Fell

Dolg M., Wedig U.,
Stoll H., et al.

meopem.

parcem

M. N.,

We, Fe, De,

M

J. Chem. Phys., 1987,
86, N4, 2123-31.

FeH

1987

ab initio
pariem

' 107: 46508c Ground state properties of small matrix-isolated molecules: iron hydride (FeH), iron nitride (FeN), iron monocarbonyl and iron dicarbonyl. Marathe, V. R.; Sawaryn, A.; Trautwein, A. X. (Inst. Phys., Med. Univ. Luebeck, 2400 Luebeck, Fed. Rep. Ger.). *Lect. Notes Phys.* 1987, 269(PDMS Clusters), 182-92 (Eng). All electron ab initio MO calcs. were performed on the title compds. The results show the effect of the matrix on their spectroscopic properties. The correlation energy was calcd. using the Moeller-Plesset perturbation theory.

C.A. 1987, 107, N 6

FeH^{2+}

1987

по менш.
крупке,
теор. расч.

107: 28597b Charge transfer in collisions of doubly charged ions of iron and nickel with hydrogen atoms. Neufeld, David A.; Dalgarno, A. (Harvard-Smithsonian Cent. Astrophys., Cambridge, MA 02138 USA). *Phys. Rev. A: Gen. Phys.* 1987, 35(7), 3142-4 (Eng). The Landau-Zener approxn. is used to compute the charge-transfer recombination rate coeffs. of Fe^{2+} and Ni^{2+} in H at thermal energies. The energy sepns. of the adiabatic potential-energy curves of the quasimols. FeH^{2+} and NiH^{2+} are obtained from one-electron calcs. The rate coeffs. are of the order of $10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ or greater. Charge transfer of Fe^{2+} occurs preferentially into the ground state of Fe^+ so that the reverse process of charge-transfer ionization of Fe^+ in collision with H^+ also occurs rapidly above the reaction threshold.

(H) ☒

C.A. 1987, 107, N4

FeH

DM 28738

1987

№ 15 Б1265. Ближний инфракрасный спектр молекулы FeH. The near-infrared spectrum of the FeH molecule. Phillips J. G., Davis S. P., Lindgren B., Balfour W. J. «Astrophys. J. Suppl. Ser.», 1987, 65, № 4, 721—726, 728, 742, 744, 778 (англ.)

На ИК-фурье-спектрометре в обл. частот 7800—12800 см^{-1} с разрешением 0,05 см^{-1} измерено семь колебательно-вращат. полос системы ${}^4\Delta\text{--}{}^4\Delta$ молекулы FeH. Идентифицирована вращат. структура и определены начала полос (2—0) при 7786 Å, (1—0) при 8692 Å, (2—1) при 9020 Å, (0—0) при 9896 Å, (1—1) при 10253 Å, (0—1) при 11939 Å и (1—2) при 12389 Å. Для всех полос определены интенсивности линий и относит. силы полос. Анализ вращат. структуры полос выполнен с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения, спинового расщепления и удвоения Λ -типа. Вычислены вращат. и колебат. молек. постоянные. На основе полученных данных рассчитаны спектры полос (2—2) при 10639 Å и (0—2) при 14927 Å. Данные представляют интерес при анализе спектров атмосфер звезд.

С. Н. Мүрзин

М. П.

X. 1988, 19, N 15

FeH

Отм. 28738 1987

8 Л257. Спектр молекулы FeH в ближней ИК-области. The near-infrared spectrum of the FeH molecule. Phillips John G., Davis Sumner P., Lindgren Bo, Balfour Walter J. «Astrophys. J. Suppl. Ser.», 1987, 65, № 4, 721—778 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра (разрешение $0,05 \text{ см}^{-1}$) получены спектры испускания молекул FeH в пламени печи Кинга в области 778—1239 нм. Исследованы также спектры испускания образцов, обогащенных изотопом ^{54}Fe . Наблюдаемые линии отнесены к вращательной структуре 7 электронно-колебательных полос электронного перехода ${}^4\Delta-{}^4\Delta$. Определены энергии уровней, молекулярные постоянные, величины спин-нового и Λ -расщеплений. Предсказано также положение двух не наблюдавшихся переходов. К. Э. М.

М.А.

ср. 1988, 18, № 8

FeH

1987

2 Л71. Магниточувствительные линии FeI и линии FeH в области спектра Солнца $\lambda\lambda$ 525,0—525,9 нм. Порфирьева Г. А. «Кинемат. и физ. небес тел.», 1987, 3, № 5, 87—90

Приведены сведения о блендировании магниточувствительных линий Fe I 525,022, 525,065, 525,347 нм линиями FeH. В области 525,00—525,95 нм по Льежскому атласу солнечного спектра 1973 г. обнаружен ряд слабых линий, не указанных в Роуландовских таблицах 1966 г., приблизительно оценены их длины волн, 18 «новых» линий отождествлены с линиями гидрида железа FeH. Резюме

М.П.

ф. 1988, 18, № 2.

FeH⁺

(om. 28394)

1987

Schilling F. B., Goddard W. A., III,
Beauchamp J. L.,

meop.
pacrem

J. Phys. Chem., 1987, 91,
N22, 5616-5623.

FeH

Om. 28738 1987

108: 84459r The near-infrared spectrum of the iron hydride (FeH) molecule. Phillips, John G.; Davis, Sumner P.; Lindgren, Bo; Balfour, Walter J. (Dep. Astron., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Astrophys. J., Suppl. Ser.* 1987, 65(4), 721-78 (Eng). The rotational anal. was carried out on 7 bands of the $4\Delta-4\Delta$ system of FeH. In order of wavelength of the heads, they are (2-0) at 7786 Å, (1-0) at 8692 Å, (2-1) at 9020 Å, (0-0) at 9896 Å, (1-1) at 10,253 Å, (0-1) at 11,939 Å, and (1-2) at 12,389 Å. Mol. consts., term values, spin splittings, and Λ -type doublings were derived. Calcd. wavelengths and wavenumbers are presented for the (2-2) and (0-2) bands with heads at 10639 and 14927 Å, resp. Finding lists of lines in the obsd. bands are provided to aid in astronomical applications.

UK Cnckmp,
M.N.

C.A. 1988, 108, N10.

FeH

DM 29090

1988

17 Б1017. Теоретическое подтверждение типа симметрии $^4\Delta$ для основного состояния FeH. Theoretical confirmation of a $^4\Delta$ ground state for FeH. Pauschlicher C. W. Jr., Langhoff S. R. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 145, № 3, 205—210 (англ.)

Рассчитаны энергии электронных состояний $^4\Delta$ и $^6\Delta$ молекулы FeH при межъядерных расстояниях 3,0 и 3,2 ат. ед. соотв. Использованы базисные наборы $(20s15p10d6f4g)/[7s6p4d3f2g]$ для Fe и $(8s6p4d)/[4s3p2d]$ для H. В одном из вариантов расчета на первом этапе построены волновые ф-ции многоконфигурац. приближения ССП (в полном активном пространстве), а на втором на основе найденных МО и конфигурац. ф-ций учтено широкомасштабное конфигурац. взаимодействие. В другом варианте использовано модифицированное приближение функционала связанных пар. С волновыми ф-циями наиболее высокого уровня точности энергия состояния $^4\Delta$ оказывается ниже, чем $^6\Delta$. Рассчитываемая разность энергий состояний $^4\Delta$ и $^6\Delta$ находится в пределах 0,16 эВ. Полученный результат согласуется с эксперим. данными по фотоэлектронной спектроскопии.

А. В. Немухин

М.П.

Х. 1988, 19, N 17

FeH

1988

(Im. 29090)

109: 27777q Theoretical confirmation of $A^4\Delta$ ground state for iron hydride (FeH). Bauschlicher, Charles W., Jr.; Langhoff, Stephen R. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). Chem. Phys. Lett. 1988, 148(2), 205-10 (Eng). Large CAS SCF/multireference CI (MRCI) and modified coupled pair functional (MCPF) calcs. are carried out for the $^4\Delta$ and $^6\Delta$ states of FeH using very large Gaussian basis sets. At the MCPF level, 3s and 3p correlation preferentially lowers the $^4\Delta$ state by 0.19 eV. Adding this inner-shell correlation effect to a best CAS SCF/MRCI + Q valence treatment results in a $^4\Delta$ - $^6\Delta$ sepn. of 0.16 eV.

($^4\Delta - ^6\Delta = 0,16 \text{ eV}$,
модем. расчет
основн. состоян.)

C. A. 1988, 109, NY

FeH

DM 29090

1988

9 Д111. Теоретическое подтверждение симметрии $^4\Delta$ для основного состояния FeH. Theoretical confirmation of a $^4\Delta$ ground state for FeH. Bauschlicher Charles W., Langhoff Stephen R. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 145, № 3, 205—210 (англ.)

С помощью неэмпирич. расчетов выяснено относит. расположение термов $^4\Delta$ и $^6\Delta$ молекулы FeH. Расчеты проводились методом конфигурац. взаимодействия с исходной многоконфигурац. ф-цией, найденной по схеме ССП в варианте учета полного пространства активных орбиталей. Базис гауссовых ф-ций включал сгруппированные наборы $[8s7p5d3f2g]$ и $[4s3p2d]$ на ядрах Fe и H соответственно. Найдено, что состояние $^4\Delta$ лежит ниже состояния $^6\Delta$ на 0,16 эВ, что подтверждает отнесение фотоэлектронного спектра FeH, в котором разность между энергиями этих состояний составляет 0,25 эВ и состояние $^4\Delta$ считается основным.

А. И. Дементьев

М.П.

ср. 1988, 18, № 9

FeH

1988

5 Л140. Определение свободных радикалов FeH, CoH и NiH методом лазерного магнитного резонанса в далекой ИК-области. Detection of the free radicals FeH, CoH, and NiH by far infrared laser magnetic resonance / Beaton Stuart P., Evenson K. M., Nelis Thomas, Brown John M. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 7.— С. 4446—4448.— Англ.

В области $50-90 \text{ см}^{-1}$ для свободных радикалов FeH, CoH и NiH изучена структура вращательного спектра, полученного методом лазерного магн. резонанса в далекой ИК-области. Представлен анализ наблюдаемой вращательной структуры, выполненный с учетом эффектов Л-удвоения и сверхтонкого расщепления линий; определены частоты линий. В спектрах гидридов FeH и NiH в соответствии с природной распространенностью выявлены линии изотопозамещенных форм: ^{54}FeH , ^{56}FeH , ^{57}FeH и ^{58}NiH , ^{60}NiH , ^{61}NiH , ^{62}NiH .

М.Л.

(42) X

ф. 1989, № 5

^{64}NiH . Изученные гидриды являются важной составляющей межзвездной среды. Полученные данные могут быть использованы для определения гидридов в межзвездной среде на основе астрономических гетеродинных измерений. В. К.

лазе
ход

FeH

1988

108: 194891h Comparison of ab initio quantum chemistry calculations on matrix isolated molecules with Moessbauer effect studies. Bominaar, E.; Guillin, J.; Marathe, V. R.; Sawaryn, A.; Trautwein, A. X. (Inst. Phys. Med., Univ. Luebeck, Leubeck, Fed. Rep. Ger.). *Hypersine Interact.* 1988, 40(1-4), 111-22 (Eng). All-electron ab initio calcns. were performed for free FeX mols., X = H, C, N, O, CO, (CO)₂. Geometry optimization was obtained at SCF level and correlation effects on electronic configurations were studied at MP4 level. Calcd. electron densities and elec. field gradients of FeX were compared with measured isomer shifts and quadrupole splittings of matrix-isolated mols. The influence of a solid noble-gas matrix on Fe⁰, Fe⁺ and FeC was estd. from mol. clusters including Ne or Ar atoms.

ab initio
param

(45) ~~14~~ FeC, FeN, FeO, FeCO, Fe(CO)₂

C.A. 1988, 108, N22

FeH

(Dm. 31202)

1988

Ик-лазер-
матрич-
ный
резонанс,
франсизм
спектр в
ФЛ. 50-90 см⁻¹

Beaton J.P., Evenson K.M.,
et al.,

J. Chem. Phys. 1988,
89, N 7, 4446-4448

1988

FeH

18 Б1276. О вращательном и колебательно-вращательном спектре FeH. On the rotation and vibration-rotation spectrum of FeH. Phillips J. G., Davis S. P. «Astrophys. J. Suppl. Ser.», 1988, 66, № 2, 227—232 (англ.)

На базе молек. постоянных нижнего электронного состояния ${}^4\Delta$ FeH, полученных из анализа колебательно-вращат. структуры электронного перехода ${}^4\Delta\text{--}{}^4\Delta$ молекулы в ближней ИК-обл. («Astrophys. J. Suppl. Ser.», 1987, 65, 721) рассчитаны энергии чисто вращат. переходов ($J \leq 23$) молекулы FeH (${}^4\Delta$) в подсостояниях с $\Omega = 7/2, 5/2, 3/2, 1/2$ (30—310 см^{-1}) и колебательно-вращат. переходов в обл. фундаментальной полосы 1—0 ($J \leq 23$) этого электронного состояния (подсистемы $7/2\text{--}7/2, 5/2\text{--}5/2, 3/2\text{--}3/2, 1/2\text{--}1/2, 7/2\text{--}5/2, 5/2\text{--}7/2, 5/2\text{--}3/2, 3/2\text{--}5/2, 3/2\text{--}1/2, 1/2\text{--}3/2, 1500\text{--}2380 \text{ см}^{-1}$). Отмечено, что поскольку ${}^4\Delta\text{--}{}^4\Delta$ FeH обнаружена в спектрах звезд М и S-типа, результаты проведенного расчета могут оказаться полезны при идентификации переходов FeH в указанных диапазонах. В. М. Ковба

М.А.

X. 1988, 19, N 18

FeH.

1988

10 Д86. О вращательном и колебательно-вращательном спектре FeH. On the rotation and vibration-rotation spectrum of FeH. Phillips John G., Davis Sumner P. «Astrophys. J. Suppl. Ser.», 1988, 66, № 2, 227—232 (англ.)

Приведены расчетные значения частот линий, колебательно-вращательных переходов $v''=1 \rightarrow v''=0$ нижнего электронного состояния ${}^4\Delta$ молекулы FeH (в области $1000-2400 \text{ см}^{-1}$) и чисто вращательных переходов в колебательном состоянии $v''=0$ нижнего электронного состояния (в области $40-320 \text{ см}^{-1}$). Рассмотренные колебательно-вращательные переходы подчиняются правилу отбора $\Delta\Omega=0$ и $\Delta\Omega=\pm 1$ ($\Omega=7/2, 5/2, 3/2$ и $1/2$ — квантовые числа оператора полного электронного момента импульса), т. е. каждый колебательный уровень разделен на 4 подуровня. В свою очередь каждый из подуровней представляет собой Λ -дублет (a - и b -состояния). Отмечается, что линии чисто вращательных переходов образуют 4 подполосы в соответствии

М.П.

Ф. 1988, 18, N 10

со значениями $N=J-1,5$; $J-0,5$; $J+0,5$, $J+1,5$, где N — квантовое число оператора орбитального момента импульса, J — квантовое число оператора полного момента импульса. Приведенные частоты чисто вращательных линий и вращательных компонент колебательно-вращательных полос соответствуют переходам с вращательных подуровней с квантовыми числами J от 1,5 до 25,5.

В. А. Морозов



FeH

1988

$^4\Delta - ^4\Delta$

гармонич
и к спектр,
и.п.

108: 121276b On the rotation and vibration-rotation spectrum of iron hydride (FeH). Phillips, John G.; Davis, Sumner P. (Univ. California, Berkeley, CA USA). *Astrophys. J., Suppl. Ser.* 1988, 66(2), 227-32 (Eng). Calcns. are presented of the far-IR rotation and fundamental vibration-rotation spectra of the $^4\Delta - ^4\Delta$ system of FeH.

С.А. 1988, 108, N 14

FeH

(Dm. 29214)

1988

Schultz R.H., Elkind J.L.,
et al.,

(No.)

J. Amer. Chem. Soc.,
1988, 110, N2, 411 - 423.

FeH^+

(DM. 31286)

1988

природные
материалы,

Tran Q., Kabellas N.S.,
et al.,

масс-
спектры

Can. J. Chem. 1988,
66, N9, 2216 - 2218

Ion chemistry of transition
metals in hydrocarbon

glumes. I Cations ~~of~~ Fe, Co,
Ni, Cu and Zn.

Fell

1989

Lipus K., Baehem E., et al,

W. K. Knecht
Infrared Spectroscopy of
Transition Metal Hydrides.

Eleventh Colloquium On High
Resolution Molecular
Spectroscopy, Giessen, 1989

September 18-22, 1989, A1,
L19.

FeH⁺

1989

/ 111: 102952c Ground and low-lying states of hydroiron(1+) (FeH⁺) as derived from ab initio self-consistent field and configuration interaction calculations. Sodupe, M.; Lluch, J. M.; Oliva, A.; Illas, F.; Rubio, J. (Dep. Quim., Universitat Auton. Barcelona, Barcelona, Spain 08193). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(11), 6436-42 (Eng). The electronic states of FeH⁺ dissociate into Fe⁺ (⁶D) and H (²S) have been studied at the restricted open-shell Hartree-Fock (ROHF) and CI level of theory, using a pseudopotential approach and considering or not relativistic effects. The ground state appears to be a ⁵Δ at the ROHF level, but inclusion of correlation effects leads to a ⁵H ground state. Nevertheless, both states exhibit in all cases a near degeneracy. The calcd. *D₀* is about 90% of the exptl. value at the CI level; whereas, ROHF calcs. account only for about 25% of the exptl. dissociation energy.

ружкне
бод. со см.
мод. пацен

C.A. 1989, 111, N12

FeH

OM 34624

1990

21 Б1030. Теоретическое изучение спектроскопических свойств FeH. Theoretical study of the spectroscopy of FeH / Langhoff Stephen R., Bauschlicher (Jr.) Charles W. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 141, № 2.— С. 243—257.— Англ.

Рассчитаны потенциальные кривые ряда квартетных и секстетных электронных состояний молекулы FeH с энергиями до $25\,000\text{ см}^{-1}$. Расчеты проведены методом конфигурац. взаимодействия с учетом однократных и двукратных возбуждений по отношению к нескольким исходным конфигурациям. Орбитали получены методом ССП в полном активном пространстве с усреднением по состояниям. Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций $(20s15p10d6f)/[7s6p4d2f]$ на Fe и $(9s7p4d)/[5s4p2d]$ на H, основанный на базисе атомных натуральных орбиталей. Определены спектроскопич. постоянные рассмотренных состояний. Энергия диссоциации основного состояния $X^4\Delta$ составила 2,05 эВ. Для ряда переходов рассчитаны моменты переходов, силы осцил-

М.П.

X. 1990, N 21

лятора, коэф. Эйнштейна и излучат. времена жизни состояний. Экспериментально наблюдавшаяся полоса в ближней ИК-области спектра отнесена к переходу $F^5\Delta - X^4\Delta$, для которого получена сила осциллятора 0,018. Большие значения силы осциллятора получены для переходов $e^6\Pi - a^6\Delta$ и $g^6\Phi - a^6\Delta$ в зеленой и синей областях спектра.

А. А. Сафонов



FeH

DM.35837

1990

24 Б1239. Зеленая система FeH, зарегистрированная при высоких температурах. The green system of FeH recorded at ambient temperatures / Fletcher David A., Carter Robert T., Brown John M., Steimle Timothy C. // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 12.— С. 9192—9193.— Англ.

С помощью спектроскопии лазерного возбуждения изучена зеленая система FeH, получавшихся р-цией $\text{H}_2 + \text{Fe}(\text{CO})_5$ при общем давл. 2 Торр. Атомы водорода генерировали микроволновым разрядом H_2 . Для каждой линии обнаружено сильное Λ -удвоение, значение постоянной низшего состояния этих пар лежит в области $5,5\text{--}6,0\text{ см}^{-1}$, для большинства линий наблюдались (0,1) колебат. переходы. Основные переходы лежат в полосах (0,0). Наблюдались два колебат. интервала — 1623 и 1568 см^{-1} . Основное состояние $^4\Delta$ не является низшим для зеленой системы. Им является состояние $^6\Delta$, что согласуется с неэмпирич. расчетами.

Г. В. Чертихин

М.Н.

Х. 1991, № 24

FeH⁺

Om. 34 789

1990

Iritura K.K., Goddard WA
Beauchamp J.L.,

Int. g. Mass Spectrom.
and Ion Process. 1990,
99, N3, 213 - 222
(Am. Ha 88.)

Prospects for the involvement
of transition metals in the
chemistry of diffuse inter-
stellar clouds: formation
of FeH^+ by radiative
association? ●

FeH

On 34624

1990

№ 11 Д124. Теоретическое исследование спектроскопических свойств FeH. Theoretical study of the spectroscopy of FeH / Langhoff Stephen R., Bauschlicher Charles W., Jr // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 141, № 2.— С. 243—257.— Англ.

М.Н.
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с включением корреляции электронов в модели полного активного пространства с последующим учетом конфигурац. взаимодействия в базисе гауссовых ф-ций $20s15p10d-6f/9s7p4d$, сгруппированном в $7s6p4d2f/5s4p2d$, исследовано электронное строение FeH в 9 квартетных и 9 секстетных состояниях с энергиями менее $25\,000\text{ см}^{-1}$. Система полос в ближней ИК-области отнесена к переходу $F^4\Delta-X^4\Delta$. Приведены потенц. кривые, спектроскопич. постоянные ω_e , ωx_e , T_e , коэф. Энштейна для $v' \leq 3$, энергии диссоциации. Проведена интерпретация видимого спектра в зеленой и синей областях. В. Л. Л.

ф. 1990, № 11

FeH

OM 34624

1990

113: 31307m Theoretical study of the spectroscopy of iron hydride (FeH). Langhoff, Stephen R.; Bauschlicher, Charles W., Jr. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 141(2), 243-57 (Eng). The quartet and sextet states of FeH below 25,000 cm^{-1} were studied using the state-averaged CASSCF/MRCI method. Einstein coeffs. are presented for the near-IR system, which is assigned as $F^4\Delta-X^4\Delta$. An electronic oscillator strength of 0.018 for the near-IR system in conjunction with $X^4\Delta$ dissociation energy (D_e) of 2.05 eV is recommended in assessing the feasibility of detecting FeH in astrophysical sources. The $e^6H-a^6\Delta$ and $g^6\Phi-a^6\Delta$ transitions have the largest oscillator strength in the green and blue spectral regions. These 2 transitions, as well as the $H^4\Delta-X^4\Delta$ transition, probably account for most of the emissions observed in the green and blue. Perpendicular transitions dominate the sextet manifold, while only parallel transitions carry appreciable oscillator strength in the quartet manifold. These observations can be explained in terms of the fact that all of the low-lying sextet states derive from a $3d^6s^2$ configuration on Fe, whereas the excited quartet states derive from a $3d^7s^1$ configuration on Fe.

Ti, parent

C.A. 1990, 113, NY

FeH^-

1990

Lin Jyh-Shing, Ortiz J. V.

Chem. Phys. Lett. 1990.

(I) 171, N.B.C. 197-200.

( CeH^- ; III)

FeH
FeH⁺

1990

19 B1032. Неэмпирическое исследование взаимодействия Fe, Fe⁺ и HFe с H, CH, CH₂, CH₃ и C₅H₅. Ab initio study of the interaction of Fe, Fe⁺, and HFe with H, CH, CH₂, CH₃, and C₅H₅ / McKee Michael L. // J. Amer. Chem. Soc.— 1990.— 112, № 7.— С. 2601—2607. — Англ.

Энергии
связей,
равновесная
геометрия

Энергии связей ($E_{св}$) и равновесная геометрия комплексов Fe, Fe⁺, HFe с H, CH, CH₂, CH₃ и C₅H₅ рассчитаны неэмпирически с использованием эффективного основного ПТ атома Fe. Геометрия оптимизировалась в рамках метода ССП МО ЛКАО в двухэкспонентном базисе. Расчет оптим. структур проводился с учетом кулоновской корреляции электронов в рамках теории возмущений Меллера—Плессета 3-го порядка со спин-новым проектированием. Полученные результаты ка-

X. 1990, N 19

1) FeH₂, FeH₂⁺
2) FeCH, FeCH⁺ и др.

чественно согласуются с эксперим. оценками энергии связей и результатами неэмпирич. расчетов более высокого уровня. Так в нейтр. комплексе связь $\text{Fe}-\text{CH}_3$ слабее, а в катионном — прочнее связи $\text{Fe}-\text{H}$. Основным для комплексов $\text{H}-\text{Fe}-\text{X}$ (I), $\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{C}_5\text{H}_5$ является квинтетное состояние с линейной геометрией. Значения $E_{\text{св}}$ для связей $\text{Fe}-\text{X}$ в I в случае, когда эта связь рвется первой, существенно больше соотв-щих значений для комплексов $\text{Fe}-\text{X}$. В то же время абс. значения $E_{\text{св}}$ систематически недооцениваются в сравнении с экспериментом, причем эта недооценка возрастает с ростом кратности связей. О. В. Гриценко

FeH.

(Om 34333)

1990

112: 145855y Ab initio study of the ground and low-lying states of iron hydride (FeH). Sodupe, M.; Lluch, J. M.; Oliva, A.; Illas, F.; Rubio, J. (Dep. Quim., Univ. Auton. Barcelona, Bellaterra, Spain 08193). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(4), 2478-80 (Eng). The electronic state of FeH dissocg. into Fe (5D) and H (2S) has been studied at the restricted open-shell Hartree-Fock (ROHF) and CI levels of theory, using a relativistic pseudopotential approach and including or not f functions in the basis set. The relative energies and spectroscopic properties obtained are in very good agreement with the exptl. results found in the literature. This work provides a new theor. confirmation of a $^1\Delta$ electronic ground state for FeH. The effect of including or not f functions in the basis set is discussed.

ncop.
pacem

C.A. 1990, 112, N16

FeH

М 34333

1990

12 Д136. Неэмпирическое исследование основного и низлежащих состояний FeH. Ab initio study of the ground and low-lying states of FeH / Sodupe M., Lluch J. M., Oliva A., Illas F., Rubio J. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 4.— С. 2478—2480.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в рамках ограниченного хартри-фоковского подхода с использованием псевдопотенциала в базисе гауссовых ф-ций $4s3p6d/5s2p$, сгруппированном в $3s2p3d/3s2p$, а также с учетом f -ф-ции атома Fe и конфигурац. взаимодействия исследовано электронное строение FeH в состояниях ${}^6\Delta$, ${}^6\Pi$, ${}^6\Sigma^+$, ${}^4\Delta$, ${}^4\Pi$ и ${}^4\Sigma^+$. Приведены длины связей, частоты колебаний, энергии диссоциации. Основным найдено состояние ${}^4\Delta$ (без учета f -ф-ции — ${}^6\Delta$) с длиной связи 1,600 Å, частотой 1737 см^{-1} и энергией диссоциации 28,7 ккал/моль (на Fe 5D и H 2S).

В. Л. Лебедев

М.П.

Ф. 1990, № 12

FeH

DM 34333

1990

23 Б1025. Неэмпирическое исследование основного и низших возбужденных состояний FeH. Ab initio study of the ground and low-lying states of FeH / Sodupe M., Lluch J. M., Oliva A., Illas F., Rubio J. // J. Chem. Phys.— 1990.— 92, № 4.— С. 2478—2480.— Англ.

Методами Хартри—Фока и конфигурац. взаимодействия рассчитаны фрагменты потенциальных кривых шести низших квартетных и секстетных состояний симметрии Σ , Π и Δ молекулы FeH, отвечающих диссо-

циационному пределу $\text{Fe}(^5D) + \text{H}(^2S)$. Влияние внутр. электронов Fe учтено с помощью псевдопотенциала, включающего релятивистские поправки. Базисы составлены из ф-ций $(5s2p)/[3s2p]$ для H и $(4s3p6d)/[3s2p3d]$ для Fe. Отдельно исследован вопрос о влиянии дополнит. базисных ф-ций f -типа для Fe. Приведены равновесные расстояния, энергии диссоциации и гармонич. частоты кол. для всех шести состояний. В вариантах с расширенным за счет набора f -ф-ций базисом основному состоянию отвечает тип симметрии $^4\Delta$, что согласуется с эксперим. результатами.

А. В. Немухин

М.А.

Х. 1990, N 23

FeH⁺

Om 36221

1991

92 Д125. Теоретическое изучение спектроскопии FeH⁺.
Theoretical study of the spectroscopy of FeH⁺ / Langhoff S. R., Bauschlicher C. W. // Astrophys. J.— 1991.— 375, № 2, Pt 1.— С. 843—845.— Англ.

Методом полного активного пространства ССП исследованы некоторые триплетные, квинтетные и септетные состояния FeH⁺. Порядок следования квинтетных состояний, возникающих из основного состояния ⁶D иона Fe⁺, определяется как X⁵Δ, A⁵Π и B⁵Σ, что согласуется с правилом Хунда. Расщепление A⁵Π—X⁵Δ составляет ~600 см⁻¹, а низшее триплетное состояние a³Σ лежит на ~10 000 см⁻¹ выше основного состояния. Определена энергия диссоциации FeH⁺, равная 2,29 эВ (52,8 ккал/моль). Возбужденные квинтетные состояния Fe⁺ являются отталкивательными во франк-кондоновской области состояния X⁵Δ. Сделан вывод, что FeH⁺ фотодиссоциирует в ИК- и видимой частях спектра.

М.Н.

ф. 1992, N 2

FeH

1992

» 12 Б1099. Оптический спектр радикала FeH, зарегистрированный при температурах окружающей среды. The optical spectrum of the FeH radical recorded at ambient temperatures /Carter R. T., Steimle T. C., Fletcher D. A., Brown J. M. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992 .—Columbus (Ohio), 1992 .—С. 121 .—Англ.

Методом спектроскопии лазерного возбуждения исследованы две системы в электронном спектре молекул FeH в зеленой (530 нм) и голубой (490 нм) областях. Молекулы моногидрида железа получали при вз-вии атомарного водорода с пентакарбонилем железа. Для облегчения анализа наиболее интенсивных линий спектра возбуждения измерены спектры диспергированной ФЛ. Найдено, что обе системы относятся к переходам перпендикулярного типа и соответствуют правилам отбора $\Delta\Lambda = -1$ (зеленая система) и $\Delta\Lambda = +1$ (голубая система). Предполагается, что нижнее состояние в обеих системах одинаковое, но является не основным электронным состоянием молекулы. Зафиксирована также ранее неизвестная система в области 450 нм, отнесенная к переходу $a^6\Phi - X^4\Delta$.

В. М. Ковба

М. Н.

X. 1993, N 12

Fe H

1993

Brown John M., Beaton
S. P. et al.

частоты
линейных
вращений.
переходов
в осн. эл.
состоянии.

Astrophys. J. 1993, 414
(2, Pt. 2), L 125 - L 127.

● (сер. GrH; III)

FeH⁺

1993

118: 241290e Comparison of the widely used Hartree-Fock pseudopotentials: hydroiron(1+), hydroruthenium(1+), and hydroosmium(1+) (MH⁺ (M = Fe, Ru, Os)). Leininger, T.; Riehl, J.-F.; Jeung, G. H.; Pelissier, M. (Lab. Chim. Quantique, Inst. Le Bel, Univ. Louis Pasteur, 4 rue Blaise Pascal, 67000 Strasbourg, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 205(2-3), 301-5 (Eng). Comparisons were made of the mol. characteristics (electronic structures and spectroscopic consts.) of FeH⁺, RuH⁺, and OsH⁺ that were calcd. with the Hartree-Fock pseudopotentials given by R. B. Ross, et al., (1990), P. J. Hay and W. R. Wadt (1985), M. Kraupp, et al., (1991), and others. At. basis functions having comparable quality optimized for each pseudopotential were used, and extensive CI were done. Although similar nos. were obtained for the spectroscopic consts. and the wave functions in most cases, substantial deviations were shown for some.

м. структура,
спектрост.
восстановлен
мор. параметров

② RuH⁺ ● OsH⁺

© A. 1993, 118, N24

FeH^+

1994

7 Б1032. Комментарий к статье «Сравнение широко используемых псевдопотенциалов XH^+ ($M=Fe, Ru, Os$)». Comment on «Comparison of the widely used HF pseudo-potentials: MH^+ ($M=Fe, Ru, Os$)» / Andrae Dirk, Dolg Michael, Stoll Hermann, Ermiler Walter C. // Chem. Phys. Lett. .—1994 .—220, № 3—5 .—С. 341—344 .—Англ.

Квазирелятивистским методом XH и релятивистским методом XH с учетом различных видов псевдопотенциала рассчитаны ПТ ионизации атомов $Fe(^5D(d^6s^2) \rightarrow ^6D(d^6s^1))$ и $Ru(^7F(d^7s^1) \rightarrow ^7F(d^7))$. Результаты расчета сопоставлены с эксперим. данными и результатами Ленингера с сотр. (// Chem. Phys. Lett. .—1993 .—205 .—С. 301). Показано, что ошибки расчета Ленингера, отнесенные авторами к недостаткам использованного псевдопотенциала, скорее всего связаны с недостатками трактовки валентных взаимодействий.

Е. А. Рыкова

(3)

ⓧ (12)

RuH^+



OsH^+

X.1995, N 7

1994

FeH.

$g^6\phi_{1/2} - \chi^4\Delta_{7/2}$
 $\Omega=2$
 подгруппа

Carder R.T., Brown J.M.

J. Molec. Spectrosc. 1994, 166, 1,
 249-250

Observation of the $g^6\phi_{1/2} - \chi^4\Delta_{7/2}$ $\Omega=2$
 Subband in FeH.

$g^6\phi_{1/2} - \chi^4\Delta_{7/2}$ надг. не группа - Записи и классификация ряда
 спектров FeH при 4930 Å при естественном свете. Наиболее

индекс миним. ореска $K(0,0)$ носсе $g^b \Phi - a^b \Delta [3]$ паузеи зм
 глыв $b^b \Delta 7/2$ и $b^b \Delta 5/2$ еос. Набл. 2 верб и рад Р и R мис в $g^b \Phi 1/2 - a^b \Delta 1/2$
 и паузеи змат, глыв $a^b \Delta 5/2$ и $g^b \Phi 1/2$. Миним. бр авт.
 $b^b \Phi 1/2$ соф. Писун мине на 152 см² колмачеи $b^b \Phi 9/2$.
 Подосы в селене при 4480 В. орески $K^b R$ вербее $g^b \Phi 1/2$
 миним 2 и Р вербее не одкачуют
 $SR 7/2$ вербее ореске и $\Delta \Omega = +2$ керху, заурезеннаи по Рн
 Баундактал условия климатиче заурез
 1. Lardner, Steimle JCP 1993, 993166-3173; 2. Phillips... Hystoroplas. J. Supp
 3. Carter, Brown JCP in press.

FeH

1994

* 3 Б1154. Наблюдения и идентификация перехода $g^6\Phi - a^6\Delta$ в голубой системе FeH при 493 нм. Observation and identification of the $g^6\Phi - a^6\Delta$ transition in the blue system of FeH at 493 nm /Carter Robert T., Brown John M. //]. Chem. Phys. .—1994 .—101 ,№ 4 .—С. 2699—2709 .—Англ.

Методом электроскопии лазерного возбуждения исследована вращат. структура голубой системы FeH в области 493 нм, связанной с переходом $g^6\Phi - a^6\Delta$ (полосы 0—0). Радикалы FeH получены при вз-вии пентакарбонила железа ($\sim 0,01$ мм) с атомарным водородом (смесь 0,2 мм рт. ст. H_2 и 2,5 мм рт. ст. He пропускали через микроволновой разряд). Состояние $a^6\Delta$ лежит на ~ 1890 cm^{-1} выше основного состояния $X^4\Delta$. Дано отношение переходов в $\Delta\Omega = 0, +1$ для трех нижних спиновых компонент состояния $a^6\Phi$ и компоненты $^6\Phi_{11/2}$ верхнего электронного состояния. Состояние $a^6\Delta$ инвертировано. Значения колебат. интервала $\Delta G_{1/2}$ (в cm^{-1}): $^6\Delta_{7/2} - 1569$, $^6\Delta_{5/2} - 1582$, $^6\Delta_{3/2} - 1622$. Состояние $a^6\Delta$ возмущено уровнями близлежащих электронных состояний. Время жизни двух самых нижних спиновых компонент состояния $g^6\Phi$ составляет 39 ± 2 нс ($\Omega = 11/2$ и $9/2$). В. М. Ковба

М.П.

X.1995, N3

FeH

OT.42266

1997

Vincenzo Barone, Carlo Adamo
First-row transition-metal
hydrides: a challenging playground
for new theoretical approaches

Quantum Chemistry. Vol. 61. 443-451
(1997)

FeH

1998

128: 173538w Rotational analysis and assignment of the 630 nm band system of FeH to the $e^6\Pi - c^6\Sigma^+$ transition. Goodridge, Damian M.; Hullah, Daniel F.; Brown, John M. (The Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, South Parks Road, Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(2), 428-435 (Eng), American Institute of Physics. A study of the electronic spectrum of FeH at ~ 630 nm using dispersed and undispersed laser induced fluorescence techniques is reported. Eighty lines were assigned to the (0,0) vibrational band of the $e^6\Pi - c^6\Sigma^+$ transition. The transitions can be arranged in 3 subbands with all 6 spin components of the $c^6\Sigma^+$ state accessed. This has allowed the $c^6\Sigma^+$ state to be fully characterized and provides parity assignments of individual rotational levels. The energy levels of the $c^6\Sigma^+$ state conform approx. to a Hund's case (a') coupling scheme with significant Ω -type doubling ($1-10\text{ cm}^{-1}$). An attempt was made to simulate the levels using an effective Hamiltonian. Although the simulation failed to reproduce the results to within exptl. uncertainty ($\sim 0.007\text{ cm}^{-1}$), the residuals are sufficiently small to confirm the correctness of the assignments.

($e^6\Pi - c^6\Sigma^+$)

CA-1998, 128, N14

FeH

om, 41049

2001

135: 216196x Ab initio study of the lower few states of FeH:
Application of the multireference coupled pair approximation.
Tanaka, Kiyoshi; Sekiya, Masahiro; Yoshimine, Megumu (Division of
Chemistry, Graduate School of Science, Hokkaido University, Kita 10,
Nishi 8, Kita-ku, Sapporo, Japan 060-0810). *J. Chem. Phys.* 2001,
115(10), 4558-4564 (Eng), American Institute of Physics. Multirefer-
ence coupled pair approxn.(4) [MRCPA(4)] was applied to describe the
ground state and the lower excited states of FeH. This study demon-
strates that the $\alpha^6\Delta$ state is 0.27 eV above the ground state, $X^4\Delta$,
which is in good agreement with the observation (0.25 eV). The ground
state is much more highly correlated than the $\alpha^6\Delta$ state and the use of

ab initio
param
multiref
M. CPCM.

C.A. 2001, 135, N15

the size-consistent method is important to predict the relative stability accurately. In addn. to the above results, spectroscopic data of the second $^4\Delta$, the lowest $^4\Pi$, the lowest $^4\Phi$, the lowest two $^6\Pi$, and the lowest $^6\Sigma^+$ states are reported. The calcd. excitation energies of the lowest $^6\Sigma^+$ state and the second $^4\Delta$ state are in good agreement with results of expt. The total energies of the lowest $^4\Delta$, $^4\Pi$, $^6\Delta$, $^6\Pi$, and $^6\Sigma^+$ states are in the order of $^4\Delta < ^4\Pi < ^6\Delta < ^6\Pi < ^6\Sigma^+$, which supports what was anticipated previously.

F: FeO

P: 3

133:315105 Identification of new bands in the orange system of FeO. Lei, Jie; Dagdigian, Paul J.

Department of Chemistry, The Johns Hopkins University Baltimore, MD 21218-2685, USA J. Mol.

Spectrosc., 203(2), 345-348 (English) 2000. The orange system of FeO was investigated by laser fluorescence excitation spectroscopy in a free-jet expansion and .apprxeq.35 new bands with .OMEGA.' = 4 and 3 were assigned. Several isotope shift measurements were also made. Many of the bands involve excitation from the .delta. = 1-3 lower vibrational levels, allowing the observation of excited vibronic level with excitation energies .ltoreq.21,000 cm-1. Several new vibrational assignments were made. The previously unobserved D5.DELTA.3v' = 0 fine-structure level was located.

FeH

[Om. 41121]

2001

Catherine Wilson,
Helen M. Cook et al.

J. Chem. Phys., 2001,
115, N13, 5943-5956.

Complete characterization of
the $a^6\Delta$ state of the FeH
radical