

TELH

TLH

(Bo, Do

1937
BP-V 632

Grundström B.

Nature 1937, 140, 365-6

"Band ~~spect~~ spectrum of thallium hydride"

CA., 1937, 7752⁹

J

F

ЕСТЬ Ф. Н.

ТЕМ (смерь, и.и.)

1938

Grundström B,

Valberg P.

7. Phys, 188, 326 (1938)

113, 721 (1939). (?)

Катюша дана



В.Б. Петовос

Л.Б.О. (v, 0-4); 215ед.

преж. 2,18

Примеч. 2,0 ± 0,2

46 ман/мес /

ТЕН | *издана*

[6897-VI]

1940

*издана 2-й.
издана*

Grundström B.,

Z. Phys., 1940, 115, 120-139

ТЕН.

ТЕН
№

Bulewicz E. M., Sugden T. M. 1958
Trans. Farad. Soc. 1958, 54, 830, №6

Визначення K_p і ΔH_{027} молекул
с поєднанням фотометричних пламени. Частина
Стійкість GaOH , TiOH і TeH

см. III, GaOH

ТЧК

Neuhaus H. Muhl V.

1959

ТЧД

Z. Phys., 1959, 153, 14, 412-22

ВФ-631-V

Колосафевский эффект
дейтерия галлия

Исслед. эффект, когда ТЧК и ТЧД
в обл. 4000-6000 Å при больших
дисперсиях. Эффект ТЧД, по-
лученный впервые, был детально
проанализирован. Для этого

РЖФ, 1959
18, 1959

набл. по лоску принадлежащая $3P_0 - \chi^2 \Sigma^t$ черной

TEH
Cuepp

No

BP-V-633

The band spectrum of TlH. T. Larsson and H. Neuhaus. *Arkiv Fysik* 23, 461-9(1963)(in English). Four new bands were found in the spectrum of TlH in the region 4210-4300 Å. Through rotational analysis, 3 of these were identified as the (0,0), (1,0), and (2,0) bands assigned to the electronic state transition $^1\Pi - X^1\Sigma^+$, while the 4th was ascribed to a transition between $\Omega = 2$ and the lower state of the mol. based on a perturbation between the levels $^1\Pi, v = 1$ and $\Omega = 2, v = 0$. Rotational consts. were evaluated for both lower and upper states; the values for the latter are considered uncertain, owing to the perturbation and the extremely small no. of lines. The fewness of the lines is explained by assuming that the potential curve corresponding to the at. states $^3P_{3/2}(Tl) + ^3S_{1/2}(H)$, which give rise to the upper electronic states of these bands, is very shallow. The energy of the disocn. limit belonging to these at. states was taken as approx. that of the highest observed level (rotational quantum no. $J = 6$ in $^1\Pi, v = 1$), and the disocn. energy of the ground state in TlH was calcd. as $D_0'' = 15,927 \text{ cm.}^{-1}$. No hyperfine structure was observed in TlH. The multiplet splittings in the $^3\Pi$ electronic states (or equiv.) of all the B-group hydrides and the corresponding at. doublet splittings and the mol. to at. splitting ratios are tabulated.

Radko C. Chudacek

1963

BP-3071-V

C.A. 1963 · 58 · 13

13296 ab

1963

ТИН

4 Б86. О полосатом спектре ТИН. Larsson T., Neuhaus H. On the band spectrum of TlH. «Arkiv fys.», 1963, 23, № 5, 461—469 (англ.)

Спектр

D₀

BP-V-633

Получен спектр поглощения в области 4210—4300 Å с дисперсией 2,17 мм/Å ТИН, возбужденного в графитовой трубке, содержащей металлич. Тl и нагретой до 1150° в печи Кинга в атмосфере чистого Н₂. Спектр состоит из 4 полос с красным оттенением, содержащих Р-, Q- и R-ветви. 3 полосы отнесены к переходам 0—0, 1—0 и 2—0 системы ¹Π—X¹Σ⁺, а четвертая — к переходу 0—0 системы ³Π₂(с)—X¹Σ⁺. Для всех трех состояний определены вращательные постоянные. Исследованы возмущения в верхних состояниях наблюдавшихся систем, проведена корреляция этих состояний с атомными состояниями и вычислена энергия диссоциации ТИН в основном состоянии $D_0'' = 15\,927\text{ см}^{-1}$. Обсуждены причины отсутствия сверхтонкой структуры в спектре.

В. Юнгман

BP-3071-2

X.1964.4

Тек

12 Д228. Полосатый спектр ТiН. Larsson T., Neuhaus H. On the band spectrum of TlH. «Arkiv fys.», 1963, 23, № 5, 461—469 (англ.) 1963

На дифракционном спектрографе с дисперсией 2,17 мм/Å получены спектры поглощения молекулы ТiН, образованной в печи Кинга, содержащей металлич. Тi в атмосфере Н₂ при 1150°С. В области 4200—4300 Å найдены и проанализированы четыре новые полосы. Три из них идентифицированы как полосы (0,0), (1,0) и (2,0) перехода 'Π—X'Σ⁺, четвертая отнесена к переходу между состояниями с Ω=2 и основным. Для всех состояний 'Σ⁺, 'Π и Ω=2 определены соответственно следующие вращательные константы (в см⁻¹): B₀=4,726; D₀=2,54·10⁻⁴; B₀=2,030; B₁=1,84; B₂=0,7; D₀=0,27×10⁻²; D₁=0,60·10⁻² и B₀=1,53, D₀=0,35·10⁻². Вследствие возмущений и малого числа линий значения для верхних уровней недостаточно точны. Приведена схема энергетич. уровней молекулы ТiН и их корреляция с атомными состояниями. Для основного состояния получен диссоциационный предел 15 927 см⁻¹. Сопоставлены спектры ТiН и других гидридов группы В. Сверхтонкая структура в спектре ТiН не обнаружена. Ф. Ортенберг

ВФ-1-633

ВФ-3071-1

Ф. 1963. 12А

ТЕН Zinter Marshall L., Battino 1965
Rubin.

J. Chem. Phys., 42, 19, 3222-3229.

Обобщенные потенциалы
кривых методом Ридберга - Клейна
Риса. I. Экспериментальные огра-
нижения, инструкция по новой
процедуре и применение к
моделям Эммонса и Гейтмана
функций. (см. 02).

Te H

Ginter M. L.

11966

(39-5430-V)

J. Molec. Spectrosc., 20, n3,
240-47.

интерференция $a^3\Pi_0-(0^-) \rightarrow$

$\rightarrow X'\bar{\Sigma}^+(0^+)$ - перекода, в
молекуле

Te H.

(см. Gate)

TELH

A - 576

1966

(We)

Hussain Z.,

Can. J. Phys., 1966, 44,
N4, 917-19.

ТЛ Н

ВОР - 4596 - V

1966

ТЛ К

1 Б80. О возмущениях в спектрах T1H и T1D. L a r s -
s o n T o r, N e u h a u s H i n r e k. On the perturbations in
the spectra of T1H and T1D. «Arkiv fys.», 1966, 31, № 4,
299—305 (англ.)

В спектре поглощения T1D не найден запрещенный пе-
реход $^3\pi_2 \rightarrow X'\pi^+$, ранее наблюдавшийся в спектре T1H.
Др. отличие спектра T1D от спектра T1H заключается в
отсутствии полосы 0,0, связанной с переходом $\pi \rightarrow X'\Sigma^+$,
что объясняют наличием возмущения, вызываемого пре-
диссоциацией типа c^- по Малликену. Рассматривается
возможное влияние преддиссоциации на более высокие
колебательные уровни π -состояния. С. Христенко

X: 1967.1

B90-4596-V

1966

TLH

TRD

Minu. vol.

On the perturbations in the spectra of T1H and T1D. Tor Larsson and Hinrek Newhaus (Univ. Stockholm). *Arkiv Fysik* 31(21), 299-305(1966)(Eng). The ' Π -X' Σ^+ transition in T1D, the shape of the $^3\Pi_0$ potential curve, and perturbations in the ' Π state are discussed. A search for the forbidden $^3\Pi_2$ -X' Π^+ transition (previously observed in T1H) in T1D resulted in the finding of another perturbation of the ' Π state of this mol. This new perturbation is interpreted as causing a predissocn. of Mulliken's type c^- . Robert W. Rinehart, Sr.

C.A. 1966. 65. 5
65019

Te 8

1966

предисс.

У 2 Д 181. О возмущениях в спектрах T1H и T1D.
Larsson Tor, Neuhaus Hinrek. On the perturbations in the spectra of T1H and T1D. «Arkiv fys.», 1966, 31, № 4, 299—305 (англ.)

Исследован спектр поглощения T1D (4000—5000 Å). Показано, что в отличие от спектра T1H в спектре T1D запрещенный переход $^3\Pi_2 - X^1\Pi^+$ не наблюдается. В спектре T1D также отсутствует полоса (0,0)-перехода $^1\Pi - X^1\Sigma^+$. Появление этих полос в спектрах T1H объяснено возмущением, вызываемым преддиссоциацией типа c- по Малликену. С. Христенко

ф. 1967. 22

Тв Н

Генс Р.

1964

Вср - 5822 - V

Г. Мовс. Spectrosc., 24, n 3,
284.

Приведенные ниже кривые
основных состояний
2-хатомных молекул.



(см. Гал)

TELH

BQP-908-XV

1972

130942j Potential energy curves and dissociation energies of diatomic hydrides of gallium and thallium. Nair, K. P. R.; Amma, R. Ammini (Dep. Spectrosc., Banaras Hindu Univ., Varanasi, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1972, 10(2), 93-5 (Eng). The dissocn. energies of diat. hydrides of Ga and Tl were computed by fitting empirical potential functions to the exptl. potential-energy curves of the mols. The Lippincott 3-parameter function and the Szoeké and Baitz electronegativity potential functions were used for this purpose. The estd. dissocn. energies compare well with the values calcd. by other methods.

(Do)

(+1) GaH.,

C.A. 1972, 77, N20.

X

6117

TEH
TED

(A-209) /

1973

Miller, Carl S. et al. ~~et al.~~
At. Data 1973, 5(I), 1-49.

M.H.

● (Carl S. Miller, III)

1974

TELH₄

Оммуек 2549

Hensen Karl, Schatz Manfred
et. al.

Theor. chim. acta " 1974, 34, №
" 327-337 (Russ. phys. chem.)

H-TE

num. 4884 1975

Kerr F. A., et al.

Handbook Chem. Phys.,
55th Ed., 1974-75.

(Do)

70104.8449

Ph, .TC, MGU

34457

TELH

1976

X 476109

Dongre M. B. On the application of
the method for the rapid computation of
true potential energy curve of certain
diatomic molecules. "Indian J. Phys.",
1976, 50, N 3, 409-415 (SITA.)

(см. МГН; III)

0784-1111

744 744 776

ВИНИТИ

TEK

1976

Pyykkö P., et al.

Chem. Phys. Lett. 1976,
42, N 3, 545-9.

(all. G.)

venustus

coetatus

Ze

Donoso



(all. BM; IV)

TELH

number 8729

1979.

Gogawalla S. R., et al.

(Do, paeer.)

Chem. Phys. Lett; 1979,

67 (2,3), 514-16 .

TEH

amusea 8901

1979

cas. no. 1

Ohwada K.

Spectrochim. acta,
1979, A35, I353-57.

ТЕН

Оттиск 11123

1980

8 Д121. Электронная структура ТН в основном состоянии по данным релятивистских расчетов в многоконfigurационном приближении ССП. Electronic structure for the ground state of TH from relativistic multi-configuration SCF calculations. Christiansen Phillip A., Pitzer Kenneth S. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 5160—5163 (англ.)

Рассчитана потенц. кривая для основного состояния молекулы ТН. Расчеты проводились в рамках метода ω — ω -связи в релятив. приближении; использовался релятивистский эффективный потенциал («J. Chem. Phys.», 1979, 71, 4445). Учет корреляционных эффектов осуществлялся путем проведения расчетов в многоконфигурац. приближении ССП (учитывалось до 5 конфигураций). Получены следующие значения спектроскопич. постоянных (в скобках — эксперим. значения): R_e (Å) = 1,96 (1,87), D_e (эВ) = 1,66 (1,97) ω_e см⁻¹ = 1330 (1391). σ -Связь ТН является слегка ионной ($Ti^{+0,3}H^{-0,3}$). Результаты данной работы заметно лучше согласуются с эксперим. данными, чем полученные в ранних исследованиях.

В. И. Барановский

расчет
потенц.
кривой,

и т.д.

Ф.1981/18

Оттиск 11123

1980

ТЕН

12 Б46. Электронная структура основного состояния ТН из релятивистских расчетов многоконфигурационным методом ССП. Christiansen Phillip A., Pitzer Kenneth S. Electronic structure for the ground state of TH from relativistic multiconfiguration SCF calculations. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 10, 5160—5163 (англ.)

Эл. структура.
Рел. вост.

В области межъядерных расстояний от 3 до 15 ат. ед. рассчитана потенциальная кривая основного состояния молекулы ТН. Использован формализм релятивистского эффективного потенциала (см. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, 360), в к-рый введены след. усовершенствования. В рамках релятивистской ω — ω -связи приближение ССП заменено на многоконфигурац. метод ССП (МК ССП). Эффективный потенциал типа Филлипса — Клейнмана заменен на потенциал замороженного остова. Использован базисный набор слейтеровских ф-ций, близкий по кач-ву к двухэкспонентному с учетом поляризац. орбиталей. Сопоставлены результаты расчетов с одной конфигурацией (метод ССП), с двумя и пятью configura-

Х. 1981. N12

циями (МК ССП). Определены и сопоставлены с эксперим. данными равновесное межъядерное расстояние, энергия диссоциации и основная частота колебаний. С пятидетерминантной волновой ф-цией воспроизводится 85% эксперим. энергии диссоциации. Найдено,

что связь в молекуле является слабо ионной с небольшим смещением отриц. заряда к водороду.

А. В. Немухин

TLH

number 11123

1980

kb, acc,
fact,
nominal.

sp - user

' 94: 20744q Electronic structure for the ground state of thallium(I) hydride from relativistic multiconfiguration SCF calculations. Christiansen, Phillip A.; Pitzer, Kenneth S. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(10), 5160-3 (Eng). The disocn. curve for the ground state of TLH was computed using a relativistic ω - ω coupling formalism. The relativistic effects represented by the Dirac equation were introduced using effective potentials generated from at. Dirac-Fock wave functions by a generalization of the improved effective potential formulation of P. A. Christiansen, et al., (1979). The multiconfiguration SCF treatment used is a generalization of the 2-component mol. spinor formalism of Y. S. Lee, et al., (1978). With a 5 configuration wave function approx. 85% of the exptl. disocn. energy was obtained. The bond is principally σ in form, despite the large spin-orbit splitting in at. Tl. The bond appears to be slightly ionic (Tl⁺H⁻) with about 0.3 extra electron charge on the H.

C.A. 1981. 94 N 4

TELH

(common 10320)

1980

кб. нек.
факт

Lee L.S., et al.

E; J;

J. Chem. Phys., 1980, 73
(1), 360-366.

● (an nu_2^+ ; IV)

TRH

Lammuck 11753 1981.

Kant A, et al.

(Do)

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

ΔH ,

K_p



(all. ALH; III)

ТЧН

Оттиск 11024

1981

8 Д122. Изменение ковалентной связи в соединениях тяжелых элементов вследствие релятивистских эффектов. Расчеты ТЧН. Relativistic modifications of covalent bonding in heavy elements. Calculations for TCH. Pitzer Kenneth S., Christiansen Phillip A. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 77, № 3, 589—592 (англ.)

В многоконфигурационном приближении ССП рассчитаны потенц. кривые ТЧН. Расчеты проводились методом эффективного потенциала в двойном экспоненц. базисе в трех вариантах: а) без учета вклада компоненты $p_{3/2}$; б) с вариац. учетом этого вклада и в) для «нормальной» σ -связи с исключением спин-орбитального взаимодействия, но сохранением остальных релятив. эффектов. В случае а) энергия связи составляет $\sim 1/3$ от полученной в случае в) и $\sim 1/2$ от полученной в случае б). Расчеты показывают, что «орто-

гональная триплетная связь (Purser N. C. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 73, 385) дает лишь незначительный вклад в связывание.

О. В. Сизова

расчет
потенциальных
кривых;

Ч.Н.

ф. 1981 N 8

Оттиск 11024 1981

ТЕН

13 Б28. Релятивистские модификации ковалентной связи в тяжелых элементах. Расчеты для ТlH. Pitzer Kenneth S., Christiansen Philip A. Relativistic modifications of covalent bonding in heavy elements. Calculations for TlH. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 77, № 3, 589—592 (англ.)

В рамках релятивистского многоконфигурац. метода ССП с учетом ω — ω -связи и использованием приближения эффективного релятивистского основного Пт рассчитана потенциальная кривая основного состояния молекулы ТlH. Расчеты проводились с учетом возможного промотирования электрона с валентной $p_{1/2}$ -орбитали на $p_{3/2}$ -орбиталь Тl (рассматривается один валентный релятивистский p -электрон), без учета этого промотирования и при исключении из рассмотрения спин-орбитального расщепления $p_{1/2}$ — $p_{3/2}$. В последнем случае оказывается возможным построить «нормальную» связь между атомами Тl и H. Результаты расчетов

м.п.;
расчет
потенциал.
кривых



2-1981. N 13

проанализированы с учетом мнения Пайпера («Chem. Phys. Lett.», 1980, 73, 385) о том, что при учете релятивистских эффектов в тяжелом атоме $p_{1/2}$ -спинор имеет σ - и π -компоненты, и π -компонента $p_{1/2}$ -спинора может взаимодействовать с атомами H, образуя «ортогональную триплетную связь» (ОТС). Данные расчетов ТН, а также анализ лит. данных по гидридам тяжелых элементов показали, что в химически интересных случаях с ns^2 -оболочкой ОТС (вопреки выводу Пайпера) является весьма слабым взаимодействием. Связь в ТН изменяется при учете релятивистских эффектов, включая существенную величину энергии, необходимую для промотирования из $p_{1/2}$ - в $p_{3/2}$ -валентную орбиталь Тl, однако ОТС при этих изменениях связи является мало-существенным эффектом.

И. А. Тополь

TEH

ommuck 11024 1981

94: 90775z Relativistic modifications of covalent bonding in heavy elements. Calculations for thallium hydride. Pitzer, Kenneth S.; Christiansen, Phillip A. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). - *Chem. Phys. Lett.* 1981, 77(3), 589-92 (Eng). To det. whether the orthogonal triplet bond proposed by N.C. Pyper (1980) is an important factor in the bonding of H to a very heavy element with a single $P_{1/2}$ valence electron, disson. curves for TlH were calcd. by using fully relativistic quantum methods. The present results and literature information indicate that the orthogonal triplet interaction makes no significant contribution to bonding.

~~nomatus~~
Kpukas
Guccas



C.A. 1981-94 N/12

ТМ

1982

11 Д115. Неэмпирические релятивистские расчеты молекулярной структуры с учетом конфигурационного взаимодействия с применением к ТН. Relativistic ab initio molecular structure calculations including configuration interaction with application to six states of ТН. Christiansen Phillip A., Balasubramanian K., Pitzer Kenneth S. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 5087—5092 (англ.)

расчет
молекулярной
структуры

Предложен метод расчета электронной структуры молекул с учетом спин-орбитального взаимодействия (СОВ) и электронной кулоновской корреляции. Вычислительная процедура этого метода включает следующие этапы: расчет векторов МО с использованием усредненного по спину релятивистского эффективного потенциала (РЭП); преобразование интегралов; расчет матричных элементов оператора СОВ, представленного в виде разности точного и усредненного по спину РЭП;

ср. 1982, 18, № 11

построение матрицы конфигурац. взаимодействия, сложение ее с матрицей СОВ и диагонализация получаемой комплексной эрмитовой матрицы. Проведен расчет низколежащих электронных состояний ТН. Остов $(1,2,3s,2,3p)Ti$ считался замороженным; для описания валентного подпространства использовался двухэкспонентный базис действительных слэтеровских орбиталей. Построены потенц. кривые, определены спектроскопич. постоянные и энергии нескольких электронных переходов. Результаты находятся в хорошем согласии с данными электронно-колебательной спектроскопии.

А. В. Зайцевский

ТХМ

1982

21 Б26. Релятивистские неэмпирические расчеты молекулярной структуры, включающие учет конфигурационного взаимодействия с применением к шести состояниям ТlH. Christiansen Phillip A., Balasubramanian K., Pitzer Kenneth S. Relativistic ab initio molecular structure calculations including configuration interaction with application to six states of TlH. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 5087—5092 (англ.)

М.П., пометки
Кривые

Предложен метод учета эффектов спин-орбитального взаимодействия (COB) в рамках метода ограниченного конфигурац. взаимодействия (КВ) при расчетах структуры и электронного строения молекул, содержащих очень тяжелые атомы. Оператор COB определен по разности эффективных основных потенциалов, различных для состояний с $j=l+1/2$ и $j=l-1/2$, где j — полный момент атомного состояния, а l — угловой момент. Необходимые интегралы COB вычисляются и добавляются к обычному массиву интегралов после проведения расчетов на стадии метода ССП МО ЛКАО и

X.1982, 19, №21

преобразования интегралов для дальнейших расчетов на стадии приближения КВ. Метод позволяет избавиться от комплексных коэф. в процессе преобразования интегралов и учитывает СОВ на том же качеств. уровне, что и эффекты электронной корреляции. Диагонализация результирующей комплексной матрицы КВ+СОВ требует примерно в 2 раза больше времени, чем диагонализация обычной матрицы КВ. Метод применен для расчета потенциальных кривых двух низших O^+ и J^- , а также низших O^- и 2^- -состояний молекулы ТН. Спектроскопич. параметры рассчитанных состояний ТН хорошо согласуются с эксперим. данными и позволяют интерпретировать ряд особенностей эксперим. оптич. спектров.

И. А. Тополь



TLH

1982

сверх-орбит.
электр. спек.
гашение,
расчет

' 97: 12150q Relativistic ab initio molecular structure calculations including configuration interaction with application to six states of thallium(I) hydride. Christiansen, Phillip A.; Balasubramanian, K.; Pitzer, Kenneth S. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(10), 5087-92 (Eng). A system for the inclusion of spin-orbit coupling along with moderate scale CI in calcns. for mols. contg. very heavy elements is demonstrated. In this effective potential procedure, rigorous ab initio spin-orbit integrals are computed and added to the conventional integral set after the SCF and integral transformation steps of the calcn. This avoids the use of complex coeffs. in the integral transformation and yet includes spin-orbit corrections on an equal footing with electron correlation. The diagonalization of the resulting complex CI plus spin orbit matrix requires only about twice the time of a real CI diagonalization. Present calcns. on the two lowest 0^+ and 1 states and the lowest 0^- and 2 states of TLH indicate that this procedure allows adequate flexibility in the electronic coupling, resulting in bonding curves which are in good agreement with the exptl. established curves. The results also help to understand and to confirm previously conjectural interpretations of other spectra data.

C.A. 1982, 94, 121

ТМ

[Om. 18459]

1982

Pitzer K. S.,

Int. J. Quantum Chem., 1984,
25, n1; Proc. Symp. Relativ.
Eff. Quantum Chem., Abo,
June 21-23, 1982, 131-148.

расчет
кривых и
поверхн.
потенц.
энергии,
 D_0 , D_e ,
ab initio
расчет.

TLH

1983

Pitzer K. S.

Preprint
ser. n. Relativistic Eff. Atoms,
Mol., and Solids. Proc.
NATO Adv. Study Inst., Van-
couver, 10-21 Aug., 1981. New
York; London, 1983, 403-
420. (cur. F₂; III)

TEH

1984

Pitzer Kenneth S.

Int. J. Quantum Chem.,

1984, 25, N1: Proc. Symp.

Relativ. Eff. Quantum

Chem., Abo, June 21-23,

1982, 131-148.

(Cu_2 ; III)

ТЕН

DM. 22295,

1985

Jens F. Brandt B.A.,

номериз.
изд.,
очень-
мелко,

Chem. Phys., 1985,

99, N 2, 285-291.

М.А.

ТЕН⁺
ТЕН

1987

11 Б1012. Релятивистские эффекты в молекулах: расчеты с псевдопотенциалом для TiH^+ , TiH и TiH_3 . Relativistic effects in molecules: pseudopotential calculations for TiH^+ , TiH and TiH_3 / Schwerdtfeger P. // Arbeitsber. / Inst. Theor. Chem. Univ. Stuttgart.— 1987. — № 26.— С. 151—179.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием псевдопотенциала для остовных электронов металла, включая $5d^{10}$ -оболочку, и с учетом конфигурац. взаимодействия, рассчитана электронная структура и св-ва молекул $TiH^+(I)$, $TiH(II)$ и $TiH_3(III)$ в основном состоянии. На основе расчетов атома Ti методами ССП и Дирака—Фока подобраны параметры нерелятивистского, релятивистского и полуэмпирич. псевдопотенциалов остова и проведено сравнение результатов для атома и ионов Ti^{n+} и для молекул I—III, полученных с использованием различных псевдопотенциалов. Показано, что результаты релятивистских расчетов при учете перекрывания остовов хорошо согласуются с имеющи-

М.П.

(+1) ~~12~~

Х. 1989, № 11

ТЕН₃

мися эксперим. данными. Найдено, что релятивистское сжатие связи Ti—H составляет 3,5 и 5,3% для II и III соотв.; это связано с большим участием $s\text{-AO Ti}$ в хим. связи в III. Для I релятивистские эффекты приводят к резкому удлинению (на 0,65 Å) и ослаблению связи Ti—H (энергия диссоциации уменьшается с 7,4 до 2,3 ккал/моль) из-за сжатия $6s\text{-AO}$. Обсуждено влияние релятивистских эффектов на силовые постоянные, дипольный и квадрупольный моменты и P_t ионизации молекул.

В. К. Михалко

з. П.
чтов

ТИН⁺

ТИН

ТИН₃

М.А.

ф. 1988, 1412

1987

№ 12 Д142. Релятивистские эффекты в молекулах. Расчеты ТИН⁺, ТИН и ТИН₃ в приближении псевдопотенциала. Relativistic effects in molecules. Pseudopotential calculations for ТИН⁺, ТИН and ТИН₃. Schwerdtfeger P. «Phys. scr.», 1987, 36, № 3, 453—459 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Строение молекул ТИН⁺, ТИН и ТИН₃ в основных электронных состояниях исследовано в валентном приближении с использованием неэмпирических релятивистских и нерелятив. псевдопотенциалов атомного остова Тl³⁺, а также полуэмпирического остовного потенциала, позволяющего воспроизводить основные эффекты остовно-валентной корреляции. Вычислены равновесные геометрич. параметры, энергии диссоциации, силовые постоянные, дипольные моменты и их производные по смещениям ядер, потенциалы ионизации. Результаты демонстрируют достаточно высокую надежность трехэлектронной модели атома Тl. Показано, что спин-орбитальные взаимодействия почти не влияют на равновесные длины связей, но их учет необходим при оценке стабильности молекул. Библ. 80. А. В. Зайцевский

TLH

1988

Ramos A. F., Pyper N. C.
et al.

γ , meop. Phys. Rev. A: Gen. Phys.
paerâm 1988, 36 (6), 2729-39.

(cit. Auth; III)

JRH

(DM 34169)

1989

m.n. Balasubramanian K.,
Kryukov Chem. Rev. 1989, 89, N8,
nomenz. 1801-1840.
merum

Spectroscopic Properties and
Potential Energy Curves for
Heavy p-Block Diatomic
Hydrides, ● Halides and
Chalconides.

TEH 1989
Magg H., Birk H., et al.,

Diode Laser Spectroscopy of
Transient Diatomic Metal
Hydrides.

Eleventh Colloquium On High
Resolution Molecular
Spectroscopy, ● Giessen, Septem-

Per 18-22, 1989, A1, 28-29.

TEL

(Dm. 32648)

1989

111: 104725s The diode laser spectrum of thallium hydride (^{205}TlH and ^{203}TlH) in its ground electronic state. Urban, Rolf Dieter; Bahnmaier, Albert H.; Magg, Ulrich; Jones, Harold (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 158(5), 443-6 (Eng). The gas-phase IR spectrum of 2 isotopic forms of TlH (^{205}TlH 70.5% and ^{203}TlH 29.5%) in their ground electronic states was obsd. using a diode laser spectrometer. The waveno. of transitions with $J \leq 32$ were detd. in the fundamental and hot bands up to $v = 3 \leftarrow 2$. A total of 98 transitions were measured with a nominal accuracy of $\pm 0.001 \text{ cm}^{-1}$. These data were used to obtain accurate values for the ground-state Dunham parameters for TlH . Attempts to fit the exptl. data of TlH and those obtained previously for GaH and InH directly to the Dunham potential function revealed some unexpected problems.

(UK chempr)

C.A. 1989, 111, N12

TLH

1989

Balasubramanian K.

(оозор)
и.н.

Chem. Rev. 1989, 89,
N8. C. 1801 - 1840.

(see. Geth; III)

РЕН

ОМ 32648

1989

12 Л170. Дiodно-лазерный спектр гидрида таллия (^{205}TlH и ^{203}TlH) в основном электронном состоянии. The diode laser spectrum of thallium hydride (^{205}TlH and ^{203}TlH) in its ground electronic state / Urban Rolf-Dieter, Bahnmaier Albert H., Magg Ulrich, Jones Harold // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 158, № 5.— С. 443—446.— Англ.

М.П.

С использованием диодно-лазерного спектрометра получены ИК-спектры поглощения двух изотопов гидрида таллия (процентное соотношение в газе: ^{205}TlH — 70,5%, ^{203}TlH — 29,5%) в основном электронном состоянии. Определены волн. числа переходов на уровни с вращательным квантовым числом J до 32 в фундаментальных и горячих полосах вплоть до $\nu=3\leftarrow 2$. На основании волн. чисел для 98 переходов, измеренных с точностью $0,001\text{ см}^{-1}$, определены параметры Данхема для потенц. кривой основного состояния. Обсуждены затруднения, возникающие при непосредственном применении анализа Данхема к эксперим. данным для гидридов элементов III группы: Ga, In и Tl.

Е. П. Смирнов

ф. 1989, N 12

ТЕН

DM 32648

1989

➤ 24 Б1416. Диодный лазерный спектр гидрида таллия (^{205}TlH и ^{203}TlH) в основном электронном состоянии. The diode laser spectrum of thallium hydride (^{205}TlH and ^{203}TlH) in its ground electronic state / Urban R. D., Bahnmaier A. H., Magg U., Jones H. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 158, № 5.— С. 443—446.— Англ.

Методом диодной лазерной спектроскопии измерены фрагменты вращат. структуры полос 1—0, 2—1 и 3—2 в ИК-спектрах поглощения ^{205}TlH и ^{203}TlH в газ. фазе ($J \leq 32$). Из анализа спектров получены след. значения (в см^{-1}) параметров Данхема Y_{10}, Y_{20}, Y_{30} ($\cdot 10^2$), Y_{01}, Y_{11}, Y_{21} ($\cdot 10^3$), Y_{31} ($\cdot 10^5$), Y_{02} ($\cdot 10^4$), Y_{12} ($\cdot 10^6$), Y_{22} ($\cdot 10^7$), Y_{03} ($\cdot 10^9$): ^{205}TlH — 1391,2681; —23,0995; 8,247; 4,793340; —0,141509; 1,7167; —9,092; —2,26764; 5,292; —2,659; 5,361; ^{203}TlH — 1391,3012; —23,1013; 8,265; 4,793607; —0,141513; 1,7145; —9,102; —2,26863; 5, 279; —2,612; 5,421. В. М. Ковба

М.А.

X. 1989, N 24

TRH

1992

Ogilvie J.F.,

Chem. Phys. Lett., 1992,

191, N6, C. 592-598

M.N.

(see. Agt; III)

TLH

1994

Schwerdtfeger P.,
Ischtwan J.

(Ze, De,
есть. носы.)

THEOCHEM 1994,

корреляция

112 (1), 9-19.

● (сер. ВМ; III)

TLH

1995

Seijo Leeis.

мор.
раств
химич
и. соев.

J. Chem. Phys. 1995,
102 (20), 8078-88.

● (Cell HF; III)

TEL

PM

39 248

1997

128: 172353v An extrapolation scheme for spin-orbit configuration interaction energies applied to the ground and excited electronic states of thallium hydride. Rakowitz, Frank; Marian, Christel M. (Inst. Phys. Theoretische Chem., Univ. Bonn, D-53115 Bonn, Germany). *Chem. Phys.* 1997, 225(1-3), 223-238 (Eng), Elsevier Science B.V.. All-electron relativistic calcs. have been performed on the 0^+ ground state of TlH and all excited electronic states that dissociate to $H(2S)$ and the $1/2(I)$ and $3/2(I)$ components of $Tl(2P)$. MOs are optimized employing a spin-free no-pair Hamiltonian while spin-orbit coupling is taken into account subsequently by one of the following approaches: (a) quasi-degenerate perturbation theory on the basis of multi-ref. CI wave functions; (b) spin-orbit CI; and (c) spin-orbit CI combined with a perturbation theory est. of the electron correlation contributions from discarded configurations. Spin-polarization is found to have a significant influence on the spectroscopic parameters of the ground and excited electronic states. Results in most satisfactory agreement with expt. are obtained, if approach (c) is applied.

meapem.
pacem
OCH. O^+
M. COCM.

C.A. 1998, 128, N14

om. 39248

1997

F: T1H

P: 3

19B113. Экстраполяционная схема для энергетических расчетов методом КВ с учетом спин-орбитальных взаимодействий, примененная к основному и возбужденным электронным состояниям гидрида таллия.

An extrapolation scheme for spin-orbit configuration interaction energies applied to the ground and excited electronic states of thallium hydride / Rakowitz Frank, Marian Christel M. // Chem. Phys. - 1997. - 225, 1-3. - С. 223-238. - Англ.

РЖХ, 1998, №9

Основное $O(+)$ -состояние TlH и все его возбужденные электронные состояния, диссоциирующие на $H(\{2\}S)$ и $1/2 (I)-$ и $3/2 (I)-$ компоненты $Tl(\{2\}P)$, исследованы в полнорелевистском приближении с оптимизацией МО в рамках свободного от спина нечетного гамильтониана и с рассмотрением спин-орбитальных взаимодействий в трех различных приближениях КВ. Библ. 39.

TRK

2004

134: 121243a GRECP/MRD-CI calculations of spin-orbit splitting in ground state of Tl and of spectroscopic properties of TlH. Titov, A. V.; Mosyagin, N. S.; Alekseyev, A. B.; Buenker, R. J. (Petersburg Nuclear Physics Institute, Gatchina, Russia 188350). *Int. J. Quantum Chem.* 2001, 81(6), 409-421 (Eng), John Wiley & Sons, Inc. The generalized relativistic effective core potential (GRECP) approach is employed in the framework of multireference single- and double-excitation CI (MRD-CI) method to calc. the spin-orbit splitting in the $^2P^0$ ground state of the Tl atom and spectroscopic consts. for the 0^+ ground state of TlH. The 21-electron GRECP for Tl is used, and the outer core 5s and 5p pseudospinors are frozen with the help of the level shift technique. The spin-orbit selection scheme with respect to relativistic multireference states and the corresponding code are developed and applied in the calcns. In this procedure both correlation and spin-orbit interactions are taken into account. A [4,4,4,3,2] basis set is optimized for the Tl atom and employed in the TlH calcns. Very good agreement is found for the equil. distance, vibrational frequency, and dissocn. energy of the TlH ground state ($R_e = 1.870 \text{ \AA}$, $\omega_e = 1420 \text{ cm}^{-1}$, $D_e = 2.049 \text{ eV}$) as compared with the exptl. data ($R_e = 1.872 \text{ \AA}$, $\omega_e = 1391 \text{ cm}^{-1}$, $D_e = 2.06 \text{ eV}$).

medp. paper
U.A. De

C.A. 2001, 134, Ng

TRH

(DM 41433)

2002

Wenjian Liu et al.,

ссылка.
по см.

J. Chem. Phys. 2002,
116, N 9, 3626-34