

In H

Тук-измерения
узелотес-земе.
илетанитот

6897 - VI

1940

Grundstrom B.

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

Теплота

УнН

1958

Neubauer H.

Z f Physik 1958, 150, N 1, 4

Сверхтонкая структура
и лос (изгибы и т.д.)

ИнН V 618-ВФ

1958

InD (Te, We, WeXe, Be, Le)

Neuhaus H.

Z.Phys., 1958, ~~152~~ 152, N 4,
402-416

О полосах спектров дейтерида и
гидрида индия и их сверхтонкой структуре

PX., 1959, N 13, 44798

J

F

In H

спектр

↓ 8 Д117. Полосатый спектр молекулы InH. Характеристики состояния $a^3\Pi$. Ginter Marshall L. The band spectrum of the InH molecule: characterization of the $a^3\Pi$ state. «J. Molec. Spectrosc.», 1963, 11, № 4, 301—320 (англ.)

Спектр испускания InH в области 4500—8000 Å получен с помощью печи Кинга, содержащей металлич. In и водород при t -ре выше 1500°C . Зарегистрированы и анализированы 20 полос, соответствующих переходу $a^3\Pi_{0+, 1\pm} - X^1\Sigma^+$. 13 из этих полос получены ранее, однако предложена новая интерпретация преддиссоциационных эффектов в этих полосах. Две новые полосы были интерпретированы как полосы 0—0- и 1—1-перехода $a^3\Pi_{2\pm} - X^1\Sigma^+$. Положение компоненты $^3\Pi_{2\pm}$ указывает на то, что состояние $a^3\Pi$ может быть отнесено к случаю c . Исследована преддиссоциация в состояниях $^3\Pi_{2\pm}$, $^3\Pi_{1\pm}$ и $^3\Pi_{0+}$.

1963

467

89-3004-1

ф. 1964. 89

In H

спектр

полосатыи спектр молекулы InH. Характеристика состояния $a^3\Pi$. Ginter Marshall L. The band spectrum of the InH molecule: characterization of the $a^3\Pi$ state. «J. Molec. Spectrosc.», 1963, 11, № 4, 301—320 (англ.).

1963
467

Получен спектр излучения InH в области 4500—8000 Å в первом и втором порядках на спектрографе с дисперсией 0,9 Å/мм и разрешающей силой 100 000. Индий и водород помещались в печь Кинга при $T = 1500—2000^\circ$; давление водорода составляло 200—760 мм рт. ст. Проведен вращательный анализ 20 полос перехода $a^3\Pi_{0^+, 1\pm} - X^1\Sigma^+$. 13 из них, известных ранее, более подробно обследованы заново с целью интерпретации явлений преддиссоциации. Две новые полосы интерпретированы как 0—0- и 1—1-полосы перехода $a^3\Pi_{2\pm} - X'\Sigma^+$. Положение $^3\Pi_{2\pm}$ компоненты указывает на то, что состояние $a^3\Pi$ близко к случаю «с» Гунда. Рассмотрены преддиссоциационные эффекты для состояний $^3\Pi_{2\pm}$, $^3\Pi_{1\pm}$, $^3\Pi_{0^+}$ и детально обсуждены некоторые anomальные результаты.

В 99-3004-1

л. 1964. 15

В. Дианов-Клоков

B99-3004-V

1963
467

The band spectrum of the InH molecule: characterization of the $\alpha^3\Pi$ state. Marshall L. Ginter (Vanderbilt Univ., Nashville, Tenn.). *J. Mol. Spectry.* 11(4), 301-20(1963). An extensive emission spectrum of InH in the region 4500-8000 A. was obtained from a King furnace containing In metal and H at $>1500^\circ$. Twenty bands arising from the $a^3\Pi_{0+},_{1+} - X^1\Sigma^+$ transitions were measured and analyzed. Of these, 13 had been previously reported, but extensions and revisions were found necessary for the interpretation of predissocn. phenomena. Two previously unreported bands were analyzed as the (0-0) and (1-1) bands of the transition $a^3\Pi_{2+} - X^1\Sigma^+$. The position of the $^3\Pi_{2+}$ component indicates that the $\alpha^3\Pi$ state is close to case c. The predissocns. of the $^3\Pi_{2+}$, $^3\Pi_{1+}$, and $^3\Pi_{0+}$ states were characterized and the somewhat anomalous results discussed in detail.

RCKP

In H

интерпр.

мод. нот.

прежиссую
гидр.

C.A. 1963. 59. 13
14758 a

1964

In H
(эмеральду)
-Hr)
(3 группа)

✓ 6 Д187. Магнитные явления в спектре гидрида индия и их значение для проблемы связи. Larsson T., Neuhaus H. Magnetic effects in the spectrum of indium hydride and their relevance for the coupling problem. «Arkiv fys.», 1964, 27, № 3, 275—287 (англ.)

Дан обзор методов изучения проблемы связи в гидридах наиболее тяжелых элементов 3-й группы; особое внимание уделено методам, включающим магн. взаимодействия, как для случая ядерного спина, так и для случая внешнего поля. Описана спец. установка, с помощью которой изучен эффект Зеемана полос (0, 0), (1, 0) перехода $^1\Pi - X^1\Sigma^+$ и полоса (0, 0) перехода $^3\Pi_1 - X^1\Sigma^+$ в молекуле InH. Результаты сравнены с предсказаниями теорий. Относительно большое расщепление наблюдалось для линии Q (7), связанной с переходом из возмущенного (в отсутствие магн. поля) состояния. Сделан вывод, что данному состоянию следует приписать большое Ω (возможно $\Omega = 2$).

фс. 1965. 68

⊗

In H Linton Marshall L., Vittorio Rubin. 1965

J. Chem. Phys., 42, n. 9, 3222-3229.

Обобщенные нелинейные
кривые методом Рундберга:

Клейна - Риса. I. Эксперименталь-
ные ограничения, экстраполяция
множества процедура и применение
к гидратам элементов и
групп.

(in Oct.)

ВФ-4185-VI

1966

2 Д60. О сверхтонкой структуре InH и о теории сверхтонкой структуры для молекул в случае С по Гунду. Freed Karl F. On the hyperfine structure of InH and the theory of the hyperfine structure of molecules in Hund's case (C). «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 5, 1714—1722 (англ.)

Сверхтонкая структура состояния $^3\pi_1$ молекулы InH , сильно отклоняющаяся от правила интервалов магн. сверхтонкой структуры, объяснена с учетом электрич. квадрупольного $eQq_\pi + 1$ взаимодействия ядра In . Постоянная квадрупольной связи для состояния $^3\pi_1(v=0)$ равна $eQq_\pi + 0,1 \text{ см}^{-1} \pm 100\%$. Недиагональное квадрупольное взаимодействие (часть вида $eQ \sin^2\theta \times \times \exp(\pm 2i\phi)/r^3$) приводит к зависящему от F вкладу

ф. 1967. 22

в Λ -удвоение состояния $^3\Pi_1 (v=0)$, с $eQ'q + 0,066 \text{ см}^{-1}$ (2000 Мгц) $\pm 50\%$. Верхняя граница для постоянной квадрупольной связи состояния $X^1\Sigma^+ (v=0)$ равна $\sim |eQq_x| \lesssim 0,07 \text{ см}^{-1} \pm 100\%$. Обсуждена теория сверхтонкой структуры в случае С по Гунду и вычислены матричные элементы сверхтонкого взаимодействия при двух схемах связи (в случае С) для двухатомных молекул с ядерным спином. Матричные элементы вычислены с помощью обобщения метода Ван-Флека.

InH

1390 - 4185 - VI

1966

On the hyperfine structure of InH and the theory of the hyperfine structure of molecules in Hund's case (C). Karl F. Freed (Harvard Univ.). *J. Chem. Phys.* 45(5), 1714-22(1966)(Eng). The hyperfine structure in the ${}^3\Pi_1$ state of InH, which deviates strongly from the magnetic hyperfine interval rule, is explained by the elec. quadrupole interaction of the In nucleus. The quadrupole coupling const. for the ${}^3\Pi_1$ ($v = 0$) state eQq_x is $+0.1 \text{ cm.}^{-1} \pm 100\%$. The off-diagonal quadrupolar interaction, the $eQ \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\phi)/r^3$ part, gives an F -dependent contribution to the Λ -type doubling of the ${}^3\Pi_1$ ($v = 0$) state, $eQq' = +0.066 \text{ cm.}^{-1}$ (2000 Mc.) $\pm 50\%$. An upper limit to the quadrupole coupling const. of the $X^1\Sigma^+$ ($v = 0$) state is $\sim |eQq_x| \leq 0.07 \text{ cm.}^{-1} \pm 100\%$. The theory of hyperfine structure in Hund's case (c) is discussed, and the matrix elements of the hyperfine interactions are evaluated for 2 case (c) coupling schemes for a diat. mol. with 2 nuclear spins. The matrix elements are evaluated by the generalization of Van Vleck's method of reversed angular momenta. RCJQ

C.A. 1966. 65.9

13048 ef

InH

A-576

1966

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

(We)

5 Д92. Идентификация $a^3\Pi_0-(O^-) \rightarrow X^1\Sigma+(O^+)$ -перехода в молекуле InH. Ginter Marshall L. Identification of the $a^3\Pi_0-(O^-) \rightarrow X^1\Sigma+(O^+)$ transition of the InH molecule. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 3, 240—247 (англ.)

Наблюдавшиеся четыре полосы в области $16\ 000\ \text{см}^{-1}$ в спектре молекулы InH интерпретированы как Q-ветви колебательных полос (0—0), (0—1), (1—1) и (1—0) перехода $a^3\Pi_0-(O^-) \rightarrow X^1\Sigma+(O^+)$. Проводится сравнение наблюдавшегося спектра со спектрами молекул GaH и TlH. Подробно обсуждаются главные причины смешивания волн. ф-ций $a^3\Pi$ -состояний — спин-орбитальная связь и вращение молекулы, — объясняющие общие черты наблюдавшихся распределений интенсивности в $a^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma+$ -переходах для молекулы GaH, InH, TlH. Показано, что полосы $a^3\Pi_0-(O^-) \rightarrow X^1+(O^+)$ в спектре InH «разрешены» главным образом из-за вращательного смешивания состояния $a^3\Pi_0-(O^-)$ с $a^3\Pi_1-(1^-)$.

В. Морозов

47. 1967. 52



In H

12 Б133. Идентификация $a^3\pi_0-(O^-)\rightarrow X^1\Sigma^+(O^+)$ -перехода в молекуле InH. Ginter Marshall L. Identification of the $a^3\pi_0-(O^-)\rightarrow X^1\Sigma^+(O^+)$ transition of the InH molecule. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 3, 240—247 (англ.)

м.и.

Наблюдавшиеся 4 полосы в области $16\,000\text{ см}^{-1}$ в спектре молекулы InH интерпретированы как Q-ветви колебательных полос (0—0), (0—1), (1—1) и (1—0) перехода $a^3\pi(O^-)\rightarrow X^1\Sigma^+(O^+)$. Проводится сравнение наблюдавшегося спектра со спектрами молекул GaH и TlH. Подробно обсуждаются главные причины смешивания волновых функций $a^3\pi$ -состояний — спин-орбитальная связь и вращение молекулы, объясняющие общие черты наблюдавшихся распределений интенсивности в $a^3\pi-X^1\Sigma^+$ переходах для молекул GaH, InH, TlH. Показано, что полосы $a^3\pi_0-(O^-)\rightarrow X^1\Sigma^+(O^+)$ в спектре InH разрешены вследствие вращательного смешивания состояния $a^3\pi_0-(O^-)$ с $a^3\pi_1-(1^-)$.

В. Морозов

1966

БФ-5430-1

x. 1967. 12

InH

1966

Identification of the $a^3\Pi_{0-}(0-) \rightarrow X^1\Sigma^+(0+)$ transition of the InH molecule. Marshall L. Ginter (Univ. of Chicago). *J. Mol. Spectry.* 20(3), 240-7(1966)(Eng). Four bands of the doubly forbidden $a^3\Pi_{0-}(0-) \rightarrow X^1\Sigma^+(0+)$ transition of InH have been analyzed and the $a^3\Pi_{0-}$ state characterized. These results allow comparison of the mol. consts. for all 6 components of the $a^3\Pi$ state. Considerations of coupling and mixing effects in the $a^3\Pi$ states of GaH, InH, and TlH show that the $a^3\Pi_{0-}(0-) \rightarrow X^1\Sigma^+(0+)$ subband in InH is made allowed primarily by rotational mixing with the $a^3\Pi_{1-}(1-)$ state. RCKP

C, A . 1966 . 65 . 6

8194 gr

Stevenson J.N. (M.N.)

1966?
1940

Stevenson

J. Chem. Phys., 1940, 8, 398.

1964

Ун Н

Женё F.

Всв - 5822 - V

Ж. Мolec. Spectrosc., 24, n3,
284.

Приведены поперечные кри-
вые основные составляющие
2-хатомн. мол - л.



(ан. Gall)

[ВФ - 6222-V]

1968

Ин-М

Синица

1865-1-68

5 Б118. Точное измерение сверхтонких расщеплений в оптическом спектре гидрида индия. Larsson T., Neuhaus H., Aslund N. Precision measurements of the hyperline splittings in the optical spectrum of indium hydride. «Arkiv fys.», 1968, 37, № 1-2, 141-149 (англ.)

Измерено сверхтонкое расщепление линий R(0), Q(1) и P(2) полос 0-0 и 1-1 перехода $^3\pi_1-x^1\pi$ в InH и линии Q(1) полосы 0-0 такого же перехода в InD. Обнаружено, что линии Q во всех трех полосах, а линии R и P — в пределах одной полосы имеют одинаковый характер расщепления. Установлено, что величины полного расщепления всех линий равны, и что отношение интервалов между расщепленными компонентами отличается от теоретич. ожидаемой величины чисто магн. расщепления не только для линии Q, но и линий R и P полосы 0-0.

В. И. Байков

ж. 1969.

5



BP-6222-V; BP-V-5984 1968

63209 Precision measurements of the hyperfine splittings in the optical spectrum of indium hydride. Larsson, T.; Neuhaus, H.; Aslund, N. (Univ. Stockholm, Stockholm, Swed.) *Ark. Fys.* 1968, 37(13), 141-9 (Eng). The hyperfine splittings of the $R(0)$, $Q(1)$, and $P(2)$ lines of the 0-0 and 1-1 bands of the transition $^3\Pi_1-X^1\Sigma$ in InH and the $Q(1)$ line of the 0-0 band of the same transition in InD were photographed by absorption technique in a high-resoln. spectrograph. The possible deviations from the theoretically expected pattern for the purely magnetic hyperfine structure were studied. Q lines split in a similar manner in all 3 bands, the component interval ratio being nearly 13:7. The R and P lines in the same band split in the same fashion, although differently for the 0-0 and 1-1 bands. The ratio between component spacing deviates from the theoretically expected 11:9 value, not only for the Q lines but also for the R and P lines in the 0-0 band. Smaller anomalies are attributed to the elec. quadrupole interaction. J. S. Tiwari

In H
C. A. 1968. 63. 16

Jn H

Jn D

M.N.

[A-2091]

1973

Miller, Carl E., et al

Ag. Data 1973, 5(2), 1-49.

● (cer. LiH; III)

ОТЧЕТ 2200

1974

InH

InD

(м.п.и)
до

Ф. 1974

N 10

10 Д294. Вращательные энергии двухатомных молекул в состояниях $^3\Pi$ типа связи с по Гунду. Состояние $\alpha^3\Pi$ молекул InH и InD. Veseth L., Lofthus A. Rotational energies of Hund's case(c) $^3\Pi$ states in diatomic molecules. The $\alpha^3\Pi$ state of InH and InD. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 49, № 3, 414—422 (англ.)

Рассчитаны матричные элементы и определены вращательные уровни энергии двухатомных молекул в состоянии $^3\Pi$ в схеме связи с по Гунду с поправками, обязанными разрыву этого типа связи и переходу его в типы e или a. В схеме связи с вращательные уровни энергии для электронных состояний $^3\Pi_0^+$, $^3\Pi_0^-$, $^3\Pi_1$ и $^3\Pi_2$ с учетом Λ -удвоения двух последних термов описываются 14 параметрами, число которых может быть уменьшено, если принята определенная схема разрыва связи. В частности, построение корреляционных диаграмм молекул InH и InD, диссоциирующих на продукты $^2P_{1/2} + ^2S_{1/2}$ и $^2P_{3/2} + ^2S_{1/2}$, показывает, что наибольшее возмущение системы термов $^3\Pi$ обязано состоянию $^3\Sigma^+$, коррелирующему с основными состояниями In+H.

Ф. Е. Никитин

11
IX - 44/77 - XV
вср - 44/77 - 69

InH, InD. (M.N.) 1974
57422200

88979m Rotational energies of Hund's case (c) $^3\Pi$ -states in diatomic molecules. $\alpha^3\Pi$ State of indium hydride and indium deuteride. Veseth, L.; Lofthus, A. (Inst. Phys., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 49(3), 414-22 (Eng). The general theory of the rotational energies and fine structure of a case (c) and intermediate case (c) ($e^3\Pi$) state was investigated. The theor. results are then applied to the $a^3\Pi$ state of InH and InD. Certain anomalies in the Λ -doubling of the $^3\Pi_1$ substrate indicate that the $^3\Sigma^+$ state derivable from the lowest level of the sep. atoms is stable with a potential min. below that of the $a^3\Pi$ state. The stability of this $^3\Sigma^+$ state also yields a reasonable explanation for the predissocn. obsd. for all the $a^3\Pi$ substates. The good agreement between obsd. and theor. results regarding the centrifugal distortion in the multiplet splitting shows that the $a^3\Pi$ state is close to coupling case (a) in its lowest vibrational level. However, an increasing case (c) transition occurs with increasing vibrational quantum no.

C.A. 1974
80176

InH

InD

м.п.

х. 1974
N21

21 Б141. Вращательная энергия состояний $^3\Pi$ двухатомных молекул в случае (с) по Гунду. Состояние $a^3\Pi$ молекул InH и InD. Veseth L., Lofthus A. Rotational energies of Hund's case (c) $^3\Pi$ states in diatomic molecules. The $a^3\Pi$ state of InH and InD. J. Mol. Spectrosc., 1974, 49, № 3, 414—422 (англ.)

С учетом спин-орбитального взаимодействия центробежного искажения вплоть до 4-го порядка и взаимодействия спинового и орбитального моментов с вращением составлена матрица колебательно-вращательной энергии электронного состояния типа $^3\Pi$ двухатомных молекул для случаев «с» и «с—е» по Гунду. Вычислен вклад 3-го порядка от центробежного искажения в величину Λ -удвоения. Из эксперим. данных по электронным спектрам вычислены эффективные значения вращательной и центробежной постоянных и постоянной Λ -удвоения для ряда колебательных уровней электронного состояния $a^3\Pi$ молекул InH и InD. Показано, что состояние $a^3\Pi$ этих молекул для низких значений колебательного квантового числа v относится к случаю «а», а для высоких значений v — к случаю «с». Заметную преддиссоциацию состояния $a^3\Pi$ InH объясняют взаимодействием состояний $a^2\Pi$ и $^3\Sigma^+$.

М. Р. Алиев

1974

Вср - 1477 - XV
Отчек 2200

H-Jn

num. 4824

1975

Kerr J. A., et al

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

(Do)

70104.8449

Ph, etc, MGU

34457

In H

1976

#4-16709

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 (SIGL.)

(в.ч. Изд. III)

744 744

776

0784 ПМН
ВИНИТИ

Lu-M

1976

Масляков В.С. и др.

ЖК. Сурьен. Халл. 1976, 17,

№1, 172-4,

(амм. кол.
2 эг.)

(Call Be-M) III

Ph, Ch, TC
@1123 3635

УдН (кб. акт. пакет)

1976
ХС-15623

Рукко Р., Desclaux J.P. Dirac-Fock one-centre calculations. The molecules BH, AlH, GaH, InH and TlH. "Chem. Phys. Lett.", 1976, 42, N 3, 545-549

(англ.)

0758 пик

(сч ВН (III))

714 716 750

ВИНИТИ

1976

InH

SO

O₂

LiO

кв. эск.
раскв

(+3)

9 1976 N 9

9 Д105. Сверхтонкая структура двухатомных молекул: случай (C_α) по Хунду. Veseth L. The hyperfine structure of diatomic molecules. Hund's case (C_α). «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 1, 51—62 (англ.)

Методом теории возмущений исследовано сверхтонкое взаимодействие в двухатомных молекулах. Базисный набор, соответствующий невозмущенному гамильтониану, составлен из ф-ций типа $|\Omega\Omega_I IF\rangle$ (случай C_α), где F — полный момент (с учетом спина ядра I), Ω и Ω_I — компоненты вдоль молекулярной оси для «атомного» углового момента ($L+S$) и I соответственно. Обсуждаются преимущества указанного выбора базиса (в частности, быстрая сходимость ряда теории возмущений) и приводятся ф-лы для расчета матричных элементов гамильтониана. Установлена корреляция между некоторыми параметрами, что может быть использовано при обработке эксперим. данных. Конкретный анализ произведен для состояний $a^3\Pi_1$, InH , $X^3\Sigma^-$, ^{33}SO и $^{17}O^{16}O$ и $X^2\Pi$ 7LiO .

В. И. Барановский

InH

ommunen 8901 1979

Ohwada K.

Chem. 120-15.

Spectrochim. acta,
1979, A35, 1353-57.



JrH

Lommu 12736 | 1980

Tripathi R., Rai S.B.

JMN

Indian J. Pure and

M.N.

Appl. Phys., 1980, 18,

● 372 - 74.

InH

Journal 11753 | 1981.

Kant A; et al.

(Do)

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



(see. ACM; III)

InH

1983

Teichteil Christian.

Thèses. Doct. état. sci.

Рacрем

Univ. Paul Sabatier

empykm.

Toulouse, 1983. Var. pag.,
ill.

(cuv. Ar; III)

InH

(Om. 17929)

1983

100: 12895s Ab initio molecular calculations including spin-orbit coupling. II. Molecular test on the indium monohydride molecule and application to the g states of the diatomic argon (Ar_2^*) excimer. Teichteil, C.; Spiegelmann, F. (Lab. Phys. Quantique, Univ. Paul Sabatier, 31062 Toulouse, Fr.). *Chem. Phys.* 1983, 81(3), 283-96 (Eng). Ab-initio-CI-relativistic calcs. with nonempirical core pseudopotentials were done for the valence states of InH and the gerade Rydberg states of the Ar_2^* excimer, by using the quasi-degenerate perturbation theory in the Λ - Σ coupling scheme (T. and S., 1983).

meop. pacw



(f) Ar_2

c. A. 1984, 100, N 2

ИИ

am. 17929 1983

7 Б1014. Неэмпирические молекулярные расчеты, учитывающие спин-орбитальное взаимодействие. II. Аprobация на молекуле InH и применение к *g*-состояниям эксимера Ar₂*. Ab initio molecular calculations including spin-orbit coupling. II. Molecular test on the InH molecule and application to the *g* states of the Ar₂* excimer. Teichteil C., Spiegelmann F. «Chem. Phys.», 1983, 81, № 3, 283—296 (англ.)

расчет
м.п.

Неэмпирический метод конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом неэмпирич. остовных релятивистских псевдопотенциалов в рамках квазивырожденной теории возмущений в представлении Λ - Σ -связи (см. пред. реф.) применен к расчетам потенциальных кривых низших валентных состояний молекулы InH и четных по симметрии (*g*-типа) ридберговских состояний эксимера Ar₂*. На примере расчетов возбужденных состояний молекулы InH показано, что переносимость неэмпирич. псевдопотенциала позволяет добиться хорошего соответствия между теор. и эксперим. данными для всей совокупности состояний. Равновесные межъядерные

(ИИ)

X. 1984, 19, № 7

метод расчета м.п.

расстояния для различных состояний IpN согласуются с эксперим. значениями в пределах 0,1 ат. ед. На примере расчетов ридберговых состояний Ag_2^* показано, что развитый метод позволяет описывать состояния, сильно смешиваемые в результате спин-орбитального взаимодействия. Обсуждены проблемы отбора конфигураций при учете в рамках квазивырожденной теории возмущений спин-орбитального взаимодействия.

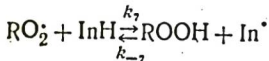
И. А. Тополь

ЖДЕ
ЭКСП

ИнН — дифениламин

1987

13 Б4136. Изучение прямой и обратной реакций пероксидного радикала с дифениламином методом кинетической спектрофотометрии. Варламов В. Т., Денисов Е. Т. «Докл. АН СССР», 1987, 293, № 1, 126—128
Разработан метод изучения реакции



DN-N

(RO_2^\bullet пероксидный радикал, InH — дифениламин), в основу которого положен спектрофотометрич. контроль за накоплением окрашенных продуктов, возникающих по р-ции In^\bullet с RO_2^\bullet ($\lambda = 454,5$ нм, $\epsilon_{\text{эфф}} = 1,14 \cdot 10^3$ л/моль·см при 348,5 К). Для р-ции кумилпероксирадикала с InH при 348,5 К в хлорбензоле определены $K = k_7/k_{-7} = 3$, $k_7 = (3,4 \pm 0,2) \cdot 10^5$, $k_{-7} = (1,1 \pm 0,05) \cdot 10^5$ л/моль·с с использованием значения K оценена прочность связи $\text{N}-\text{H}$ в молекуле InH : $D_{\text{N-H}} = 365$ кДж/моль. Автореферат

X. 1987, 19, № 13

ЛН

от 31611

1989

№ 9 Л197. ИК-спектр двух изотопов гидрида индия (^{115}InH и ^{113}InH). The infrared spectrum of two isotopic species of indium hydride (^{115}InH and ^{113}InH) / Bahnmaier Albert H., Urban Rolf-Dieter, Jones Harold // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 155, № 3.— С. 269—272.— Англ.

С использованием диодно-лазерного спектрометра получены ИК-спектры двух изотопов гидрида индия в основном состоянии $^1\Sigma$ в газовой фазе. Определены частоты 83 переходов для вращат. уровней до $J=27$ в фундаментальных и горячих полосах до $\nu=5\leftarrow 4$. Точность определения частот составила $\pm 0,001 \text{ см}^{-1}$. Проведен анализ Данхема и получены наиболее точные на настоящее время значения параметров аппроксимации потенц. кривой основного состояния JnH полиномом Данхема четвертой степени. Приведенное значение межъядерного расстояния составляет $1,8377630(63) \text{ \AA}$. Е. П. Смирнов

М.П.

ср. 1989, № 9

InH

OM 37611

1989

110: 201808h The infrared spectrum of two isotopic species of indium hydride (^{115}InH and ^{113}InH). Bahnmaier, Albert H.; Urban, Rolf Dieter; Jones, Harold (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 155(3), 269-72 (Eng). The IR spectrum of gas-phase InH in its ground electronic state ($^1\Sigma$) was obsd. by using a diode laser spectrometer. The wavenumber of transitions with J -values up to 27 were detd. in the fundamental and hot-bands up to $\nu = 5 \leftarrow 4$. In all, 83 transitions were measured with a nominal accuracy of $\pm 0.001 \text{ cm}^{-1}$. These data were used to obtain by far the most accurate values for the ground-state Dunham parameters available for InH. An improved value of $R_e = 1.8377630(63) \text{ \AA}$ was detd.

UK, re
nocm. Daxxu

C.A. 1989, 110, N 22

ГН

(ОМ-31611)

1989

№ 17 Б1148. Инфракрасный спектр двух изотопомеров гидрида индия (^{115}InH и ^{113}InH). The infrared spectrum of two isotopic species of indium hydride (^{115}InH and ^{113}InH) / Bahnmaier A. H., Urban Rolf-Dieter, Jones H. // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 155, № 3.— С. 269—272.— Англ.

С высоким разрешением и точностью (полупроводниковый лазерный спектрометр) измерены колебательно-вращат. переходы (обл. $1070\text{--}1530\text{ см}^{-1}$, полосы $1\text{--}0$, $2\text{--}1$, $3\text{--}2$, $4\text{--}3$, $5\text{--}4$, $J \leq 27$) молекул ^{115}InH и ^{113}InH в основном ($^1\Sigma$) электронном состоянии. Молекулы InH в газовой фазе получались при нагревании (1000°C) металла в печи Кинга в атмосфере водорода. Значения (в см^{-1}) коэф. Данхема Y_{10} , Y_{20} , Y_{30} , $Y_{40}(\cdot 10^3)$, Y_{01} , Y_{11} , $Y_{21}(\cdot 10^3)$, $Y_{02}(\cdot 10^4)$, $Y_{12}(\cdot 10^6)$: ^{115}InH —1475,4343; —25,1604; 0,2400; —5,275; 4,99614; —0,145371; 1,7596; —4,174; —2,2873; 4,434; $Y_{22} =$

М.Л.

X.1989, N17

$= -8,45 \cdot 10^{-8}$; $Y_{03} = 5,77 \cdot 10^{-9}$; $^{113}\text{InH} - 1475,5443$;
 $25,1627$; $0,2400$; $-5,298$; $4,99685$; $-0,145412$; $1,7575$;
 $-4,174$; $-2,28711$; $4,484$. Значения параметров потен-
 циальной ф-ции для ^{115}InH : $a_0 = 109129 \text{ см}^{-1}$, $a_1 =$
 $= -2,4334$, $a_2 = 4,039$, $a_3 = -5,506$, $a_4 = 6,31$, $R_e =$
 $= 1,837763 \text{ \AA}$. В. М. Ковба

IM

(DM 34169)

1989

Chem. Rev., 1989, 89, No. 1, 1801-1840.
Spectroscopic Properties and Potential Energy Curves for Heavy p-Block Diatomic Hydrides, Halides, and Chalcogenides.

InH

(Om. 33711) 1989

Igel-Mann G., Feller C.,
et al.,

M.N. ~~Mal.~~ Phys. 1989, 68,
N1, 209-223.



InM Magg U., Birk H., et al., 1989

Diode Laser Spectroscopy of
Transient Diatomic Metal
Hydrides.

Eleventh Colloquium On
High Resolution Molecu-

Car Spectroscopy, Biessen, Sep-
tember 18-22, 1989, A1, A8-A9.

ГМ

ГМ⁺

1990

3 Д46. Спектроскопические константы и потенциальные кривые для InH и InH^+ . Spectroscopic constants and potential energy curves for InH and InH^+ / Balasubramanian K. // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 17.— С. 6582—6588.— Англ.

Теоретически получены спектроскопич. константы и потенц. кривые для 16 электронных состояний InH и InH^+ методом полного активного пространства с последующими вычислениями методом полного взаимодействия конфигураций 2-го порядка и релятив. взаимодействия конфигураций. Получены тип симметрии основных состояний InH и InH^+ , их потенциалы диссоциации и кривая зависимости дипольного момента от межатомного расстояния. Рассчитаны спектроскопич. константы и потенц. кривые многоэлектронных состояний InH и InH^+ , не наблюдавшихся экспериментально. Библ. 45.
Д. А. И.

М. П.

фр. 1991, № 3

ГЛН
ГЛН⁺

1990

6 Б1039. Спектроскопические постоянные и кривые потенциальной энергии для InH и InH^+ . Spectroscopic constants and potential energy curves for InH and InH^+ / Balasubramanian K. // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 17.— С. 6582—6588.— Англ.

Многоконфигурационным методом ССП с послед. более полным учетом корреляц. поправок в рамках приближения конфигурац. вз-вия и с использованием релятивистского эффективного основного ПТ In рассчитаны потенциальные кривые и ф-ции дипольного момента для низших состояний InH и InH^+ . Для основного состояния InH $X^1\Sigma^+$ получено: $R_e=1,823$ А, (эксперим. значение 1,8378), $\omega_e=1469$ см^{-1} (1475,4), $D_e=2,58$ эВ (2,57); для $X^2\Sigma^+$ состояния InH^+ : $R_e=1,805$ А, $\omega_e=1185$ см^{-1} , $D_e=0,23$ эВ. Проанализированы закономерности в дипольных моментах двухатомных гидридов ряда BH—TH . А. В. Немухин

М.П.

Х. 1991, № 6

1990

InH
InH⁺

113: 122656r Spectroscopic constants and potential energy curves for indium hydrides (InH and InH⁺). Balasubramanian, K. (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(17), 6582-3 (Eng). Spectroscopic consts. and potential energy curves of 16 electronic states of InH and 10 electronic states of InH⁺ are obtained by using the complete active space MCSCF (CASSCF) followed by full 2nd-order CI (SOC) and relativistic CI (RCI) calcs. The ground states of InH and InH⁺ are found to be $1\Sigma^+$, and $2\Sigma^+$, resp. The D_e 's of the two species are calcd as 2.58 and 0.23 eV, resp. These calcs. predict spectroscopic consts. and potential energy curves of many electronic states of these species which are yet to be obsd. In addn., dipole moment curves as a function of distance are computed and compared with μ_e 's of GaH and TlH.

параметры
энергетических
состояний.

М.П., Де

С. А. 1990, 113, N 14

1992

J.H.

Ogilvie G.F.,

M.N.

Chem. Phys. Lett., 1992,
191, N6, p. 592-598

(coll. AgH; ● III)

- InH

(Am. 37275)

1993

119: 236673y Franck-Condon factors and r-centroids for the band system $a^1\Pi-X^1\Sigma^+$ of the indium monohydride molecule. Rajamanickam, Narayanan; Murali, Thangamariappan; Sakthivel, Thangasamy; Fernandez Gomez, Manuel; Lopez Gonzalez, Juan Jesus (Dep. Phys., VHNSN Coll., Virudhunagar, 626001 India). Collect. Czech. Chem. Commun. 1993, 58(7), 1491-4 (Eng). The Franck-Condon factors (vibrational transition probabilities) and r-centroids have been evaluated by a numerical integration procedure for the bands of the $a^1\Pi_1-X^1\Sigma^+$ system of the InH mol. using a suitable potential.

$a^1\Pi - X^1\Sigma^+$

фактор
р-к

C. A. 1993, 119, N 22

InH

1994

Schwerdtfeger P.,

Ischtwan J.

(Ze, De,
сеш. носей.)

THEOCHEM 1994,

Корреляция

112 (1), 9-19.

(● ВМ; III)

InH

1995

122: 145714h FTIR absorption spectrum of indium hydride InH. Ito, Fumiyuki; Nakanaga, Taisuke; Takeo, Harutoshi; Essig, Kay; Jones, Harold (Natl. Inst. Mater. Chem. Res., Ibaraki, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1995, 169(2), 421-6 (Eng). A high-resoln. FTIR spectrum of InH produced in a heat pipe cell was obsd. in absorption; 122 transitions for two isotopic species were measured, and the mol. consts. were refined by simultaneous anal. of these transition with those of the previous measurements (Chem. Phys.; Ledd. 155, 269-272, 1989). Anal. of the Herman-Wallis effect of this mol. gave $\mu_e/(d_u/dr)_e = 0.671(15) \text{ \AA}$, which was compared with the results for AlH and GaH reported recently (*J. Mol. Spectrosc.* 164, 379-389, 1994.).

Pyper KK
Chemp,
M.H.

C. A. 1995, 122, N 12

24
ЛМ

1995

23 Б1184. Инфракрасный фурье-спектр поглощения гидроида индия InH. FTIR absorption spectrum of indium hydride InH / Ito Fumiyuki, Nakanaga Taisuke, Takeo Harutoshi, Essig Kay, Jones Harold // J. Mol. Spectrosc. — 1995. — 169, № 2. — С. 421—426. — Англ. М.

Методом ИК-фурье-спектроскопии высокого разрешения ($0,006 \text{ см}^{-1}$) измерена вращательная структура полос 1—0 и 2—1 в спектре поглощения молекул $^{115,113}\text{InH}$ ($1100\text{—}1650 \text{ см}^{-1}$). Анализ спектров выполнен с учетом аналогичного рода данных по более высоколежащим колебательным уровням, полученным методом полупроводниковой лазерной спектроскопии. Приведены рассчитанные наборы параметров Данхема. Проанализирован эффект Германа—Уоллеса (влияние центробежного искажения на интенсивности колебательно-вращательных переходов в двухатомных молекулах) и результаты ($\mu_e / (d\mu/dr)_e = 0,67$, μ_e — равновесный дипольный момент) сравниваются с данными по молекулам AlH и GaH.

В. М. Ковба

М.А.

Х. 1995, № 23

ЛД

1995

➤ 23 Б1183. Инфракрасные спектры испускания InH и InD . Infrared emission spectra of InH and InD / White J. B., Dulick M., Bernath P. F. // J. Mol. Spectrosc. — 1995. — 169, № 2. — С. 410—420. — Англ.

С высоким разрешением измерены ИК-спектры испускания молекул InH (полосы $v' = v + 1 \rightarrow v'' = v$, $v = 0-4$) и InD ($v = 0-3$). Для различных изотопомеров $^{113,115}\text{In}^{1,2}\text{H}$ приведены положение и отнесение наблюдаемых линий вращательной структуры, значения рассчитанных параметров Данхема, а также изотопически инвариантные параметры Данхема. Рассчитан потенциал Борна—Оппенгеймера и приведен набор параметров, описывающих потенциальную ф-цию с поправками на нарушение приближения Борна—Оппенгеймера. Результаты сопоставляются с данными теоретических расчетов, выполненных методом псевдопотенциала. В. М. Ковба

М.А.

Х. 1995, N 23

INK

1996

125: 124261e The accuracy of the pseudopotential approximation. II. A comparison of various core sizes for indium pseudopotentials in calculations for spectroscopic constants of InH , InF , and InCl . Leininger, Thierry; Nicklass, Andreas; Stoll, Hermann; Dolg, Michael; Schwerdtfeger, Peter (Inst. Theor. Chem., Univ. Stuttgart, D-70550 Stuttgart, Germany). *J. Chem. Phys.* 1996, 105(3), 1052-1059 (Eng). Small- and medium-core pseudopotentials representing $[\text{Ar}]3d^{10}$ - and $[\text{Kr}]$ -like cores, resp., have been adjusted for the In atom, supplementing the energy-consistent three-valence-electron large-core ($[\text{Kr}]4d^{10}$ core) pseudopotential of the Stuttgart group. The performance of these potentials is tested against those of other groups and against expt., in calcns. for the ground-state potential curves of InH , InF , and InCl , both at the self-consistent-field and correlated levels. The role of core size is discussed, and systematic errors of large- and medium-core pseudopotentials are analyzed.

M. A. 2

миср
парем



(42)

C. A. 1996, 125, N 10

Inkl

1998

Ito. F.,

(FTIR) Bussuitsu Kogaku Logyo
 gen. mom. Bijutsu Kenkyusho HOKO-
 op - the 1998) 6(21, 83-94
 CNKMP

(Am. Alt', III)

JNH

[Om. 40132]

1999

Charles W. Bauschlicher, Jr.,

рецензия,
записка

J. Phys. Chem. A 1999,
103, 6429-32.