

FeH4

Fe H<sub>4</sub>

1949

Hood D. M., et al.

J. Chem. Phys. 1949, 17,  
No. 7, 705-12.

исчерпаны  
рекомендуется  
Do



см. Ti H<sub>4</sub> - III

1980

FeNx  
CoNx

5 Б118. Эмпирические зависимости между силовой постоянной и длиной связи для гидридов железа, ко-

бальта и никеля. Харитонов Ю. Я., Кравцова Г. В. «Ж. неорган. химии», 1980, 25, № 11, 3053—3058

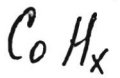
Проанализирована корреляция между силовой постоянной  $k$  и равновесной длиной  $r_e$  связей металл — водород для гидридных соединений металлов VIII группы периодич. системы. Найдено, что единую плавную корреляцию между  $k$  и  $r_e$  для гидридных соединений всех элементов VIII группы нельзя построить без существенных отклонений отдельных значений  $k$ ,  $r_e$  от корреляционной кривой, если использовать величины  $k$  и  $r_e$ , приведенные в лит-ре. Для гидридов железа, кобальта и никеля обнаружена сравнительно плавная корреляция, к-рая в координатах  $k^{-1/3} - r_e$  или  $k - r_e^2$  описывается прямыми линиями. Эта корреляция использована для предсказания неизвестных значений  $k$ ,  $r_e$  или колебательных частот в различных гидридных соединениях железа, кобальта и никеля. Резюме

зависимость  
сил. пост.  
и дл. связи.

(41) 12

2.1981. N5

1980



94: 92726h Empirical dependences between force constants and bond length for iron, cobalt, and nickel hydrides. Kharitonov, Yu. Ya.; Kravtsova, G. V. (Mosk. Khim.-Tekhnol. Inst., Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1980, 25(11), 3053-8 (Russ.). Using known data the possibility was analyzed of their being a correlation between the force consts.  $k$  and equil. bond length  $r_e$  for hydride compds. of Group VIII of the periodic table. Using literature values it was impossible to construct a smooth correlation between  $k$  and  $r_e$  for hydride compds. of all elements of Group VIII without large deviations.

( $k_e; r_e$ )

(+2)

A



C.A. 1981 94/112

FeH<sub>4</sub>

1982

Blyholder G., et al.

расчёт Do,  
геометрия,  
электронная структура.

Theor. chim. acta.,

1982, 60, NS, 429 -

444.

(см. FeH; III).

Fe Hy

1982

Jeung Gwanghi.

pacriem  $\Sigma i$ , Thèse doct. état-sci.  
u. n. chim. quant. Univ.  
Paul Sabatier Toulouse,  
1982. Var. pag., ill.

(ca. Ti Hy ; III)

$FeH_2^+$

1991

23 B1210. Неэмпирическое изучение коллинеарной реакции  $Fe^+(^4F)$  и  $Fe^+(^6D)$  с  $H_2$ . An ab initio study of collinear reaction of  $Fe^+(^4F)$  and  $Fe^+(^6D)$  with  $H_2$  / Sodupe M., Lluch J. M., Oliva A., Illas F., Rubio J. // J. Chem. Phys.— 1991.— 94, № 6.— С. 4352—4355.— Англ.

На основе неэмпирич. расчетов исследована коллинеарная р-ция  $Fe^+(^4F, ^6D) + H_2 \rightarrow FeH + H$ . Расчеты проведены методом конфигурац. вз-вия с использованием алгоритма CIPSI. Для атома Fe использован релятивистский остовный псевдопотенциал и валентный базис сгруппир. гауссовых ф-ций  $(4s4p6d3f) / [3s2p3d1f]$ . Получены сечения потенциальных ПВ ряда кватертных и секстетных состояний линейного  $FeH_2^+$ . Определены геометр. параметры переходного состояния, барьер и энергия р-ции. Найдено, что реакция  $Fe^+(^6D) + H_2$  характеризуется высоким барьером, превосходящим эндотермич. энергию р-ции. Барьер реакции  $Fe^+(^4F) + H_2$  существенно ниже, что согласуется с эксперим. данными. Отмечено, что для кватертных состояний возможен неколлинеарный механизм реакции. А. А. Сафонов

М.П.

X. 1991, № 3

Fe + H<sub>2</sub>

1992

118: 67193p Electronic structure, vibrational spectrum, and photochemistry of the iron + molecular hydrogen system. Granucci, Giovanni; Persico, Maurizio (Dip. Chim. Chim. Ind., Univ. Pisa, 56126 Pisa, Italy). *Chem. Phys.* 1992, 167(1-2), 121-30 (Eng). We present an ab initio study of the electronic structure of the Fe + H<sub>2</sub> system, based on the CIPSI and CASSCF methods. The main points addressed in this paper are the nature of the electronic states of FeH<sub>2</sub>, its equil. geometry and the assignment of the obsd. vibrational bands. The latter two problems are the object of controversial interpretation of the exptl. data: our conclusion is that the mol. is linear in the ground quintet state, and the sym. stretching band cannot be detected in the IR spectrum. In order to clarify the photochem. of the Fe + H<sub>2</sub> system, we have detd. potential energy curves for the insertion of the iron atom in the H-H bond, in the ground and several excited states originating from Fe <sup>3</sup>D(3d<sup>6</sup>4s<sup>2</sup>), <sup>5</sup>F(3d<sup>7</sup>4s), <sup>5</sup>P(3d<sup>7</sup>4s), <sup>3</sup>D<sup>o</sup>(3d<sup>6</sup>4s4p), <sup>5</sup>F<sup>o</sup>(3d<sup>6</sup>4s4p) and <sup>3</sup>P<sup>o</sup>(3d<sup>6</sup>4s4p).

(ab initio paper)  
эмпирич. данные

C.A. 1993, 118, N 8



Feltz

[CM-38042]

1995

Chertihin G. V.,  
Andrews L.,

J. Phys. Chem., 1995, 99,  
12131-12134.

(LZ, Vi)

FeH<sub>2</sub>

of 38400

1996

нег. Купцова

124:245252r The identification of the FeH<sub>2</sub> radical in the gas phase by infrared spectroscopy. Koersgen, Helga; Muertz, Petra; Lipus, Klaus; Urban, Wolfgang; Towle, Jonathan P.; Brown, John M. (Institut Angewandte Physik, D-53115 Bonn, Germany). *J. Chem. Phys.* 1996, 104(12), 4859-61 (Eng). The FeH<sub>2</sub> radical was detected in the gas phase through the observation of transitions in the fundamental band of the antisym. stretching vibration  $\nu_3$ . The mol. was generated in an elec. discharge through a mixt. of H and Fe pentacarbonyl in He and the signals were recorded by the technique of laser magnetic resonance. The mol. is linear in its ground state and this state is  $^5\Delta$  in character; theor. calcns. suggest that it has gerade symmetry. The vibrational band origin is  $1674.7196(4) \text{ cm}^{-1}$  and the rotational const. for the (0,0,0) level is  $3.01328(3) \text{ cm}^{-1}$ . This latter value corresponds to an  $r_0$  Fe-H bond length of 0.1665 nm.

UK кремль,  
Франц-  
номери,  
D3

C. A. 1996, 124, N 18



Handwritten notes and scribbles, including a question mark and illegible text.

Fel<sub>2</sub>

Om. 39471

1998

F<sub>2</sub>D<sub>2</sub>

Heike Martini and  
Christel M. Marian,

u.a. Mol. Phys., 1998, 94, N5,  
843-850

Feltz

[Om. 39953]

1999

lek  
chap.  
3,  
Do.  
Helga Körsger and Wolf-  
gang Urban et al.;

J. Chem. Phys., 1999,

110, N 8, 3861-3869.