

Hg (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>



V. 1673

1934

D<sub>CH<sub>3</sub>-Hg</sub> (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Hg? CH<sub>3</sub>HgBr; CH<sub>3</sub>HgI)

D<sub>Hg-Br</sub>

D<sub>Hg-I</sub>

Смирнов А., Тимирязева Н.А.

J. Phys. Chem. (U.S.S.R.) 5, 1004-12, (1934)  
(In Russian)

EOTW W. K.  
Est. Fotok.

CA, 1935, 77987

M.

V 1672

1945

Ecbazur /Hg(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>; Hg(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>/

Sidgwick N.V., Springall H.D.

Nature, 1945, 156, 599-600

Energy of the Hg-C Bond and the heat of atomization of carbon.

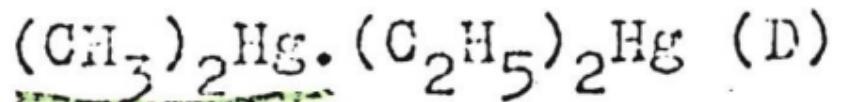
CA, 1946, 1091<sup>1</sup>

| EOTL v. K.  
Est. fotok.

M.

V 1671

1953



Gowenlock B.G., Polanyi J.C., Warhurst E.  
Proc. Roy. Soc. (London), 1953, A218, 269-89  
A determination of the dissociation energies  
of mercury-carbon bonds by a pyrolytic method.

CA, 1953, 9736i

M.

ECTB U. H.

Est. Fotok.

Zn(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>  
Cd(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>  
Hg(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

V-1034

(1960)

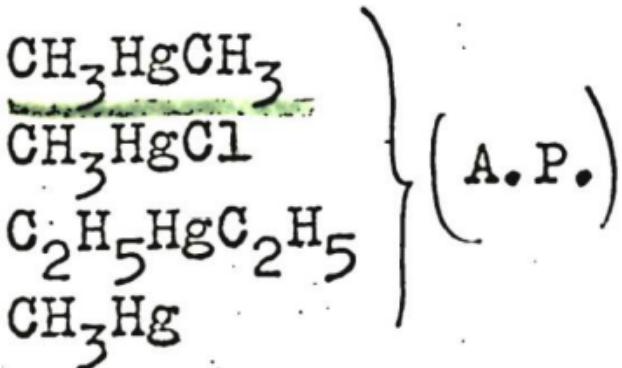
High-resolution Raman spectroscopy of gases. XIII. Rotational spectra and structures of the dimethylzinc, -cadmium, and -mercury molecules. K. Suryanarayana Rao, B. P. Stoicheff, and R. Turner (Natl. Research Council, Ottawa). *Can. J. Phys.* 38, 1516-25(1960); cf. *CA* 53, 15763c.—The pure rotational spectra of gaseous ZnMe<sub>2</sub>, CdMe<sub>2</sub>, HgMe<sub>2</sub>, and of the fully deuteriated mols. have been photographed with a 21 ft. grating. The spectra are typical of symmetric-top mols. and consist of many evenly spaced rotational lines having a sepn. of about 0.45 cm.<sup>-1</sup> An analysis of the spectra yielded the rotational consts. (in cm.<sup>-1</sup>)  $B_0$ [ZnMe<sub>2</sub>], 0.1348;  $B_0$ [Zn(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>], 0.1049;  $B_0$ [CdMe<sub>2</sub>], 0.1140;  $B_0$ [Cd(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>], 0.0894;  $B_0$ [HgMe<sub>2</sub>], 0.1162;  $B_0$ [Hg(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>], 0.0912; From these consts. the following metal-C bond lengths were detd.: Zn-C, 1.929 A.; Cd-C, 2.112 A.; and Hg-C 2.094 A. Relations for the C-H bond lengths and HCH angles were also obtained.

H. H. Jaffé

C.A.1961·55·5·4148c

3064-VI

1962



Gowenlock B.G., Haynes R.M., Majer J.R.

Trans. Faraday Soc., 58, 1905-7, (1962).

Electron impact measurement on some organo-  
mercury compounds.

Ch.A. 1963, 58, 7497h

J., M.

Есть orig.  
есть оригинал.

Hg (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

checkup.

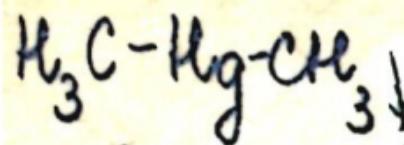
Far infrared absorption of dimethyl mercury. L. A. Woodward (Inorg. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Spectrochim. Acta* 19(11), 1963-4(1963)(in English). The far infrared absorption spectra of HgMe<sub>2</sub> was studied to verify the appearance and assignment of a frequency at  $\sim 160 \text{ cm.}^{-1}$  in the Raman spectrum of liquid HgMe<sub>2</sub> believed due to some permitted difference rather than to the skeletal bending fundamental. A well-pronounced absorption band was observed extending from  $\sim 145$  to  $170 \text{ cm.}^{-1}$  with a center at about  $153 \pm 3 \text{ cm.}^{-1}$ . This was ascribed to the skeletal bending fundamental and indicates that the Raman line at  $160 \text{ cm.}^{-1}$  must be due to a breakdown of the  $D_{3d}$  selection rules.

Robert D. Cloney

C.A.1964-60-3  
2448c

ВР-VI-3358

1963



2 Д245. Длинноволновое ИК-поглощение диметилртути. Woodward L. A. Far infra-red absorption of dimethyl mercury. «Spectrochim. acta», 1963, 19, № 11, 1963—1964 (англ.)

В спектре поглощения газообразного  $\text{H}_3\text{C}-\text{Hg-CH}_3$ , измеренного при давл. 28 мм рт. ст. в кювете длиной 10 м, обнаружена полоса с центром  $153 \pm 3 \text{ см}^{-1}$ , которая отнесена к деформационному скелетному колебанию ( $e_u$ ). Для молекулы симметрии  $D_{3d}$  такое колебание должно быть активно только в спектре поглощения. Наличие слабой полосы у  $160 \text{ см}^{-1}$  в спектре комб. рас. жидкого диметила ртути, отнесенной к тому же типу колебания, объяснено влиянием межмолекулярного взаимодействия в жидкости.

А. Станевич

φ. 1967. 22

$Hg(CH_3)_2$

12 Б224. Поглощение диметилртути в длинноволновой инфракрасной области спектра. Woodward L. A. Far infra-red absorption of dimethyl mercury. «Spectrochim. acta», 1963, 19, № 11, 1963—1964 (англ.)

1863

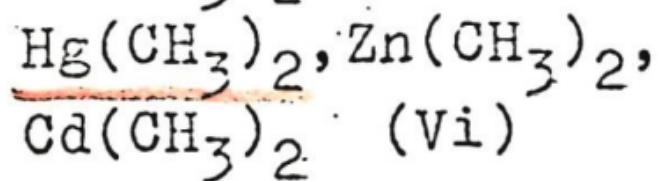
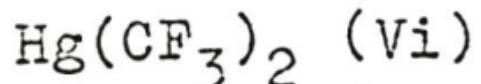
Остов  $C-Hg-C$  молекулы  $H_3C-Hg-CH_3$  (I) имеет линейную форму. Из-за свободного вращения метильных групп I принадлежит эффективной точечной группе и  $D_{3d}$ . Деф. кол. остова  $C-Hg-C$  запрещено в спектре КР и активно в ИК-спектре. В спектре КР наблюдается очень слабая линия при  $160 \text{ см}^{-1}$ . Исследован длинноволновой ИК-спектр I в парообразном состоянии (давл. 28 мм рт. ст., длина кюветы 10 м). Наблюдается сильная и широкая полоса с центром при  $153 \pm 3 \text{ см}^{-1}$ , к-рая несомненно относится деф. кол.  $C-Hg-C$ . Если линия при  $160 \text{ см}^{-1}$  в спектре КР соответствует этому же колебанию, то это может свидетельствовать об отклонении симметрии молекулы от  $D_{3d}$ .

М. Алиев

X. 1966 · 12

1966

VI-5684



Kittila A.B.

Dissert. Abstr., 1966, B 27(3), 780.

A vibrational analysis of bis(trifluoromethyl)mercury and of the dimethyl derivative of mercury zinc, cadmium, and thallium.

J, 

CA, 1967, 66, N8, 33260a

Hg (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

И.К.

VI-5632

1968

17 Б237. Колебательный спектр диметилрутти-*d*<sub>6</sub> и вклад в анализ колебаний диметилпроизводных металлов. Rives Jean-Luc, Gaufres Robert. Spectres de vibration du diméthyl-mercure-*d*<sub>6</sub> et contribution à l'étude des vibrations des diméthyl-métaux. «С. г. Acad. sci.», 1968, С 266, № 9, 584—586 (франц.)

Исследованы ИК-спектр в области 400—4000 см<sup>-1</sup> и спектр КР Hg(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub> в жидкой фазе. Наблюдаемые полосы и линии идентифицированы по типам симметрии и, приближенно, по форме колебаний. Деполяризованная линия при 134 см<sup>-1</sup> в спектре КР отнесена деф. кол. группы CHgC, а поляризованная линия при 470 см<sup>-1</sup> — сим. вал. колебанию этой группы. М. Р. Алиев.

[см. Zn(CM<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] III

Х. 1968.

17

8

Hg (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (D<sub>2</sub>) 6 V16495 1969

Kominar R.J., Price S.J.

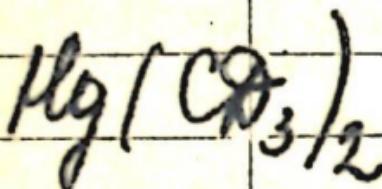
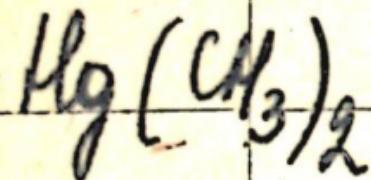
Canad. J. Chem., 1969, 47, N6, 991-994 (au<sup>2</sup>.)

Determination of the bond dissociation  
energy D(CH<sub>3</sub>Hg - CH<sub>3</sub>), by the toluene  
crazier method.

P.H. Xun, 1970  
461144

J-  
O M (95)

1970



спектр-

- ИК

- КР

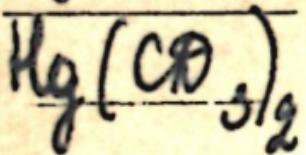
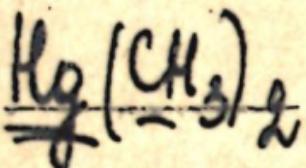
о. 1971. 28

2 Д407. Исследование колебательных спектров «нежестких» молекул  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  и  $\text{Mg}(\text{Cd}_3)_2$ . В г i b e s J c - a n - L u c, G a u f r è s R o b e r t. Contribution à l'étude des spectres de vibration des molécules «non rigides»  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  et  $\text{Hg}(\text{CD}_3)_2$ . «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1970, 67, № 6, 1168—1174 (франц.; рез. англ.)

Получены ИК-спектры и спектры комб. рас. жидким  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  и  $\text{Hg}(\text{CD}_3)_2$ , а также ИК-спектры этих соединений в газовой фазе. Приведены частоты наблюденных полос, их относит. интенсивности и состояние поляризации для спектров комб. рас. Наличие вращения метильных групп затрудняет отнесение молекулы к определенному классу симметрии. Активность деформационных колебаний скелета и метильных групп и ряд других признаков заставили авторов отнести молекулу к точечной группе  $G_{36}^+$ . С этой точки зрения проведена интерпретация наблюденных спектров. Библ. 21.

М. В. Тонков

1970



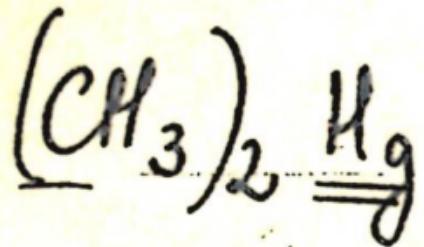
25

Cp-pa

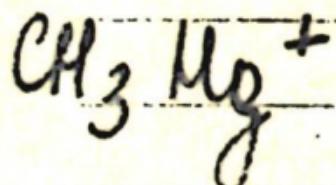
103742e Vibrational spectra of "nonrigid" molecules di-methylmercury and dimethylmercury-d<sub>6</sub>. Bribes, Jean L.; Gaufres, Robert (Lab. Spectrosc. Mol., Fac. Sci., Montpellier, Fr.). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1970, 67(6), 1168-74 (Fr). Free internal rotation in the ethanelike mols. Hg(Me)<sub>2</sub> (I) and Hg(CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub> leads to a difficulty in the choice of the mol. symmetry group. Infrared and Raman vibrational spectra of these compds. were investigated and compared with various theoretical studies. In the case of I, the best explanation is reached with the G<sub>1,0</sub> group, while in the spectra of II no addnl. information for the appropriate symmetry group is obtained.

RCQQ

C.A. 1970. 73-20



D<sub>2</sub>

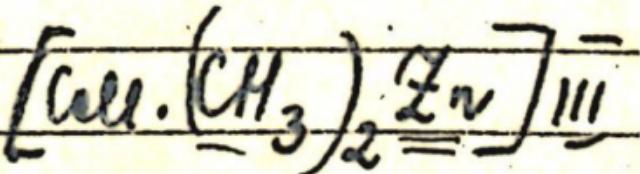


A.P.

Distefano G.,  
Dibeler S.H.

1870

Jet. d. Mass Spectrom.  
and Ion Phys., 4(1),  
59.



Hg(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

1971

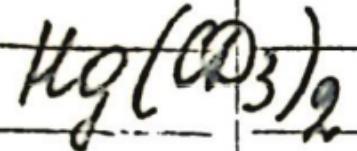
Ref. N.

V<sub>i</sub>

52487c Determination of the valence force field of the di-methylmercury molecule. Bribes, J. L.; Gaufres, R. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Sci. Tech. Languedoc, Montpellier, Fr.). *J. Mol. Struct.* 1971, 9(4), 423-32 (Fr). The potential energy consts. of HgMe<sub>2</sub> were calcd. from the vibrational frequencies of the d<sub>0</sub> and d<sub>6</sub> species, by using a valence force field. With this potential, better agreement was obtained between the calcd. and exptl. frequencies than with the previous force fields, set up from the d<sub>0</sub> frequencies only. The Hg-C stretching force const. was lower than those previously reported. The mean-square amplitudes of vibrations and the assocd. mean amplitudes are given.

C.A. 1982.76 · 10

1971



Di  
След. №.

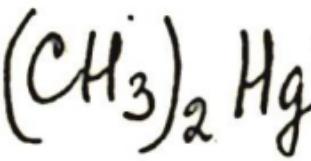
10 Б72. Определение валентного силового поля молекулы диметилртути. Bribes J. L., Gaufré R.  
Détermination d'un champ de force de valence pour la  
molécule de diméthylmercure. «J. Mol. Struct.», 1971, 9,  
№ 4, 423—432 (франц., рез. англ.)

Из частот колебаний молекул  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  и  $\text{Hg}(\text{CD}_3)_2$  и из приближенных структурных параметров  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  вычислены силовые постоянные, формы колебаний, распределение потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам и средне-квадратичные амплитуды колебаний (при т-рах  $0^\circ, 298, 16^\circ\text{K}$ )  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  и  $\text{Hg}(\text{CD}_3)_2$ . Дано отнесение частот колебаний по их форме.

М. Р. Алиев

1972, № 10

ЭМХ



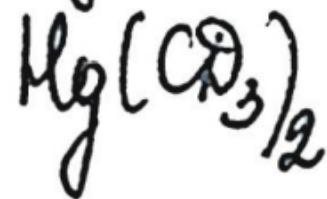
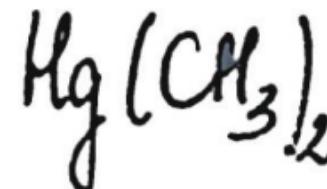
1971

4 Д222. Определение валентного силового поля для молекулы диметилртути. Vibes J. L.; Gaufré R. Détermination d'un champ de force de valence pour la molécule de diméthylmercure. «J. Mol. Struct.», 1971, 9, № 4, 423—432 (франц.; рез. англ.)

На основании известных геометрич. параметров и частот колебаний молекул диметилртути- $d_0$  и  $-d_6$  определена система силовых постоянных в естественных колебательных координатах и в координатах симметрии. Внутреннее вращение предполагалось свободным. Вычислены распределения потенц. энергии для каждой частоты и предложено отнесение частот к колебаниям связей и углов. Для значений  $T$ -рыг 0 и  $298,16^\circ K$  вычислены средние квадратичные амплитуды колебаний и средние амплитуды колебаний расстояний между связанными и между несвязанными атомами. Для силовой постоянной связи  $Hg-C$  получено значение 2,31 мдин/А. При 11 силовых постоянных и 26 частотах для их определения получено хорошее согласие вычисленных и опытных значений частот.

М. А. Ковнер

1971



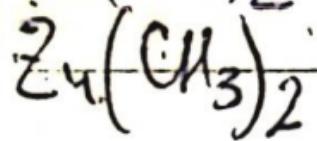
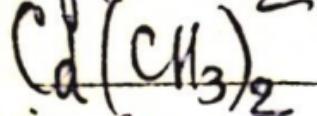
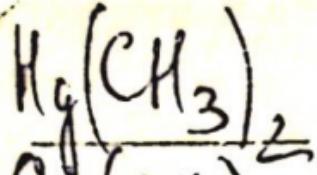
18 Б224. Вращательно-колебательные спектры диметилртути и полностью дейтерированной диметилртути. Mink J., Nemes L. Rotation-vibration spectra of dimethylmercury and perdeutero-dimethylmercury. «J. Organometal. Chem.», 1971, 28, № 3, C39—C41 (англ.)

Исследованы ИК-спектры молекул  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  и  $\text{Hg}(\text{CD}_3)_2$  в газовой фазе. К основным колебаниям отнесены частоты  $\nu_5 = 2921,6$  (2125,3),  $\nu_6 = 1200,1$  (938,9),  $\nu_7 = 546,3$  (497,7),  $\nu_8 = 2978,5$  (2231,3),  $\nu_9 = 1384,3$  (1041,8),  $\nu_{10} = 791,9$  (604,9) и  $\nu_{11} = 153$  ( $141 \text{ см}^{-1}$ ) [в скобках даны частоты  $\text{Hg}(\text{CD}_3)_2$ ]. Из частотного интервала между  $P$ - и  $R$ -ветвями определены постоянные кориолисового взаимодействия  $\zeta_8 = 0,10$  (0,18),  $\zeta_9 = (-0,24)$ ,  $\zeta_{10} = 0,66$  (0,77).

М. Р. Алиев

Vi  
M. R.

X. 1971. 18



1.  
V<sub>i</sub>

чи. 11.

шар. и.

X. 1972

16 Б71. Изучение структуры молекул диметилртути, диметилкадмия, диметилцинка и их дейтерированных соединений. Bakke Appa Mae Walsh. A molecular structure study of dimethylmercury, dimethylcadmium, dimethylzinc and the deuterated compounds. «J. Mol. Spectrosc.», 1972, 41, № 1, 1—19 (англ.)

1972

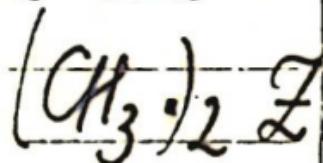
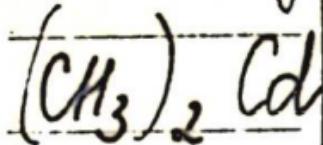
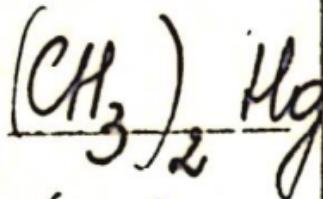
Выполнен анализ нормальных координат молекул типа диметилртути в предположении свободного внутреннего вращения вокруг центральной связи. Приведены выражения для координат симметрии и элементов матриц кинематич. и силовых коэф. в координатах симметрии. Вычислены частоты и формы колебаний и распределение потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам для молекул диметил-

42

ртути, диметилкадмия, диметилцинка и их полностью дейтерированных разновидностей. На основании результатов расчета распределения потенциальной энергии дано отнесение частот по форме колебаний. Вычислены также постоянные центробежного искажения и кориолисова взаимодействия вырожденных колебаний этих молекул.

М. Р. Алиев

1872



51257 Molecular structure study of dimethylmercury, dimethylcadmium, dimethylzinc, and the deuterated compounds. Bakke, Anna M. W. (Newton Coll., Newton, Mass.). *J. Mol. Spectrosc.* 1972, 41(1), 1-19 (Eng). A mol. structure study of the dimethylmetals dimethylmercury, dimethylcadmium, dimethylzinc and the deuterated counterparts has been carried out assuming a free rotation model. The normal coordinate anal. is presented including the F and G matrixes, and the normal frequencies and eigenvectors are calcd. The C matrixes are given, and the zeta consts. are calcd. using an expansion for the Hamiltonian that is within the s-vector formalism.

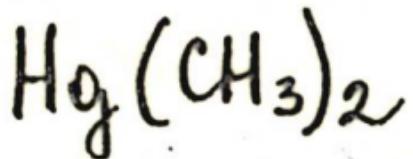
V,  
ciprovin. napsac.

(+2) 1

C.A. 1872

76 · 10

1973



17 Б75. Электронографическое исследование диметилртути. Kashiwabara Kunio, Kopaka Shigejiro, Iijima Takaо, Kimura Masaо. Electron diffraction study of dimethylmercury. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1973, 1973, 46, № 2, 407—409 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$ . Найдены след. значения эффективных межъядерных расстояний, усредненных по всем колебательным состояниям, возбужденным при т-ре эксперимента ( $r_g$ , Å) :  $r_g(\text{Hg—C}) = 2,083 \pm 0,005$ ,  $r_g(\text{Hg...H}) = 2,71 \pm 0,02$  Å и  $r_g(\text{C—H}) = 1,106$  (принято). Сопо-

чомегр

4-490

д. 1973 № 17

ставление различных вариантов проведения линии фона показывает, что факторы атомного рассеяния, основанные на релятивистском потенциале Хартри-Фока-Слейтера, лучше факторов, рассчитанных из потенциалов Томаса-Ферми-Дирака и Томаса-Ферми. Из полученного эффективного расстояния  $r_g(\text{Hg}-\text{C})$  вычислено среднее межъядерное расстояние  $r_{\alpha}^o = 2,080 \pm 0,005 \text{ \AA}$  для основного колебательного состояния. Это значение значительно отличается от величины  $r_z(\text{Hg}-\text{C}) = 2,095 \pm 0,006 \text{ \AA}$ , найденной из спектроскопич. данных по моментам инерции для основного колебательного состояния.

В. Спиридонов

$\text{Hg}(\text{CH}_3)_2(2)$   $\text{Bq}-1555-\hat{x}$  1973

$\text{Hg}(\text{CD}_3)_2(2)$  Musakarob A.H.

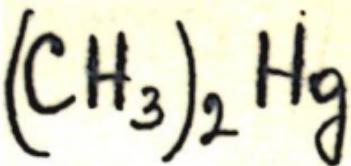
Рук. гос. Bureau.

Den. N 7007-73.

M.H.

M., Bureau, 1973.

1974



14 Б75. Расчет силовых постоянных диметилртути.  
 Mink J., Gellai B. Force constant calculations for dimethylmercury. «J. Organometal. Chem.», 1974, 66, № 1, 1—14 (англ.)

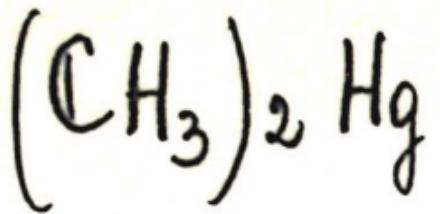
Выполнен анализ нормальных координат молекулы  $(CH_3)_2Hg$  с использованием модели свободного внутреннего вращения метильных групп вокруг оси C—Hg—C, в к-рой зависимость силовых постоянных от угла  $\gamma$  внутреннего вращения представляется в виде ряда Фурье. Из частот колебаний молекул  $(CH_3)_2Hg$  и  $(CD_3)_2Hg$  вычислены силовые постоянные упрощенного варианта наиболее общего силового поля и формы колебаний этих молекул. Изложены основы метода наименьших квадратов с затуханием для вычисления силовых постоянных. Изучена зависимость частот колебаний, форм колебаний и силовых постоянных особенно силовых постоянных взаимодействия колебаний двух метильных групп, от угла  $\gamma$ . Отмечено, что частоты (особенно  $v_9$  и  $v_{13}$ ) и формы колебаний и силовые постоянные в молекуле диметилртути более чувствительны к изменениям угла  $\gamma$ , чем в молекуле диметилацетилене.

М. Р. Алиев

Сер. по син.

v<sub>i</sub>

Х. 1974 № 14



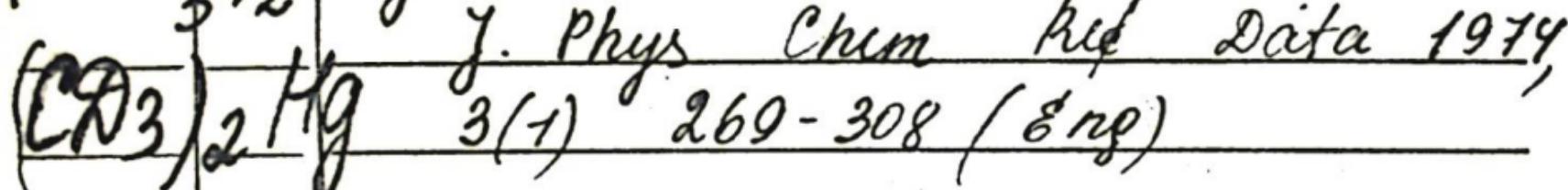
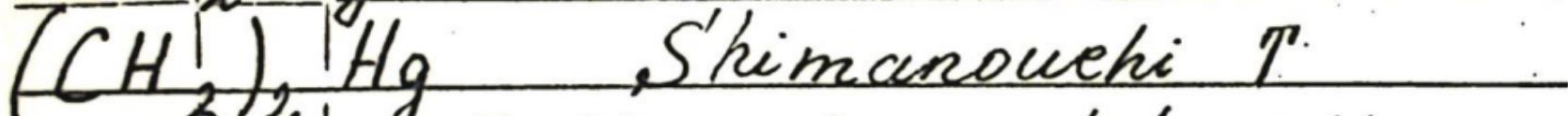
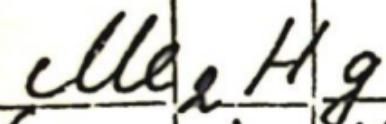
1974

(C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> HgCl)

126378z. Force constant calculations for dimethylmercury.  
Mink, J.; Gellai, B. (Inst. Isot., Hung. Acad. Sci., Budapest,  
Hung.). *J. Organometal. Chem.* 1974, 66(1), 1-14 (Eng).  
Force consts. of Me<sub>2</sub>Hg were calcd. by using the vibrational fre-  
quencies of gaseous Me<sub>2</sub>Hg and (CD<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Hg... A force const. calcn.  
utilizing the generalized inverse matrix procedure is discussed  
briefly. By assuming a free rotational model, the force field was  
introduced as a trigonometrical function of the torsional angle  $\gamma$ :  
the time variant corrections of vibrational frequencies and normal  
coordinate vectors which this involves were investigated.

C.A.1974.80 n22

1974

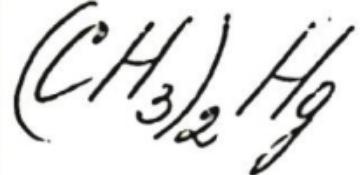


Di

(all  $\text{O}_3$ ; III)

$(^0\text{H}_3)_2\text{Hg}$  Shinkarev A.N. 1974  
Zh. Fiz. Khim. 1974, 48(2) 500 (Russ)  
 $(^6\text{D}_3)_2\text{Hg}$  Thermodynamic functions of dimethylmercury and its  $d_6$ -deuterated derivative.  
(T.g.op)

C.A. 1974, 80, N 23 . 132591e.



1977

Butler Yan S., et al

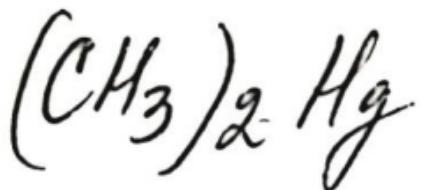
(D)

Spectrochim. acta, 1977, A33,  
N6-7, 669-680 (mu.)



cu.  $(\text{CH}_3)_2\text{Zn-III}$

1977



Cited notes

88: 81208r Generalized inverse method for computation of molecular force field. Gellai, Barbara (Cent. Res. Inst. Phys., Budapest, Hung.). *J. Mol. Struct.* 1977, 42, 181-93 (Eng). The generalized inverse method is applied to the force consts. calcn. problem having a nearly singular Jacobian matrix, and by substituting it by one of lower rank which is near to it and well conditioned it is possible to eliminate the convergence difficulties of the least squares iteration process. A further significant advantage of the method is that certain matrix theor. considerations give the possibility of deciding at the end of the iteration which force consts. are detd. by the available observations. Numerical results for the  $Me_2Hg$  mol. are given.

Q.A. 1078, 82 N12

$\text{CH}_3\text{HgCH}_3$

ommuna 5792

1977

Shimanouchi T.

Madura

of

J.Phys.Chem.and Ref.Data,  
1977, 6, 993-II02.

$(\text{CH}_3)_2 \text{Hg}$

ammara 7808

1979

Moneke et.  
cmplxus.

Mol. Phys., 1979,  
37 (3), 981-83.

$Mg(CH_3)_2$

1982

Gellai Barbara.

Mem. Acad. Sci., Cent.  
Res. Inst. Phys., KFKI  
1982, KFKI-1982-112,  
13 pp.

(Cer.  $CH_3X$ ;  $\underline{\underline{III}}$ )

$Mg(CH_3)_2$

Lommel 14591

1982

dasper.  
Promoecoco-  
leucine

Baughcum S.H., de-  
One S.R.,

Chem. Phys. lett., 1982,  
89, N 3, 183 - 188.

Mg(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (DM. 19903)

1984

Chen C.Y., Osgood R.M.,

Cremp,  
noneperi.  
ceramic

J. Chem. Phys., 1984,  
81, N 1, 327 - 334.

$Hg(CH_3)_2$

$Hg(CCCCH_3)_2$

(Oн. 19369)

1984

11 Д137. Электронная структура и связь в молекулах  $Hg(CH_3)_2$ ,  $Hg(CN)_2$ ,  $Hg(CH_3)(CN)$ ,  $Hg(CCCCH_3)_2$  и  $Au(PMe_3)(CH_3)$ . Electronic structure and bonding of  $Hg(CH_3)_2$ ,  $Hg(CN)_2$ ,  $Hg(CH_3)(CN)$ ,  $Hg(CCCCH_3)_2$ , and  $Au(PMe_3)(CH_3)$ . DeKock Roger L., Baegends Evert Jan, Boerrigter Paul M., Hengelman Rudy. «J. Amer. Chem. Soc.», 1984, 106, № 12, 3387—3396 (англ.)

Электронное строение молекул  $Hg(CH_3)_2$ ,  $Hg(CN)_2$ ,  $Hg(CH_3)(CN)$ ,  $Hg(CCCCH_3)_2$  и  $Au(PMe_3)(CH_3)$  рассчитано обычным и релятив. методом Хартри—Фока—Слэттера в приближении ЛКАО. Найдены орбитальные энергии и атомные заселенности. Оценены энергии связи лигандов и выделены стерические и электронные их составляющие. Показано, что в соединениях  $Hg$  ~80%

72

⊗

cf. 1984, 18, N 11



- 1)  $Hg(CN)_2$ ,  $Hg(CH_3)CN$
- 2)  $Au(PMe_3)(CH_3)$

энергии связи обусловлено взаимодействием  $6s$ -АО Hg с орбиталями лигандов; в случае Au(PMe<sub>3</sub>)(CH<sub>3</sub>) значительную роль в образовании связи играют  $d$ -АО Au. Методом переходного состояния и  $\Delta$  ССП определены потенциалы ионизации молекул. Проведено отнесение фотоэлектронных УФ-спектров; отмечено, что учет релятив. эффектов во всех случаях улучшает согласие теоретических и эксперим. потенциалов ионизации.

Библ. 28.

А. В. Зайцевский

$\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$       DM · 18752      1984

Bellai B.,

Carrefour-  
Boulevard.  
Cooperativ  
kooperativ

J. Mol. Struct., 1984,  
114; Mol. Spectrosc. and  
Mol. Struct., 1983, Proc.  
16 Eur. Con.  , Sofia,  
12-16 Sept., 1983, Pt B, 21-26

$(CH_3)_2 Hg$

1985

Gellai Barbara.

pacrim  
eeueob.  
nocees.

Compt. Phys. Commun.  
1985, 36, N2, 177-189.-

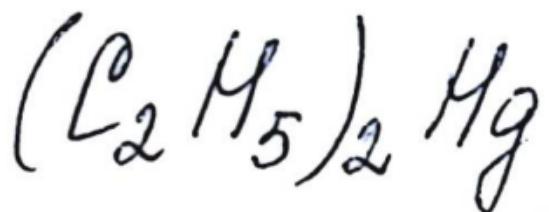
• (as.  $HgO$ ; II)

$(CH_3)_2 Hg$  1985

Irvine S.J.C., Mullin J.B.,  
et al.

erkrmp J. Electrochem. Soc., 1985,  
132, N4, 968-972.

(c.c.s.  $(CH_3)_2 Cd$ ;  $\overline{III}$ )



1985

Irvine S. J. C., Mullin  
J. B., et al.

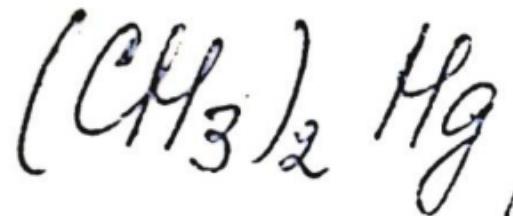
erekmp J. Electrochem. Soc.,  
1985, 132, N.Y., 968-  
-972.



$Hg(CH_3)_2$  (OM 34124) 1990

Tokuji T.  
J. Chem. Phys., 1990, 92, N5,  
2707-2805.

Photoexcitation of  $M(CH_3)_2$   
( $M = Zn, Cd, Hg$ ) compounds in  
the 106-270 nm.

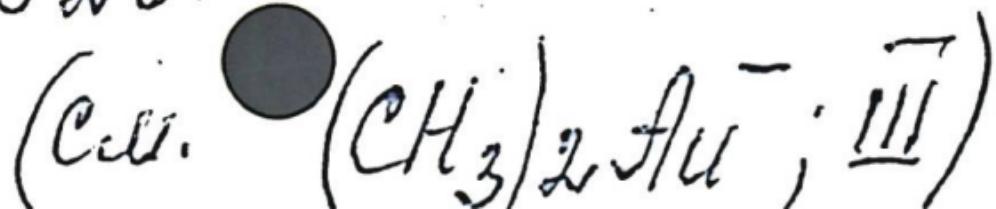


1990

Schwerdtfeger P.

J. Amer. Chem. Soc.

v. n. 1990. 112, N.Y.C. 2818 -  
2820.





1992

Kippels C.,  
Thiel W., et al.

Cited.  
Source: Spectrochim. Acta.  
Part A. 1992, 48A(8),  
1067-82.

(Catal.  $\text{Zn}(\text{CH}_3)_2$ ;  $\text{Hg}^{+2}$ )

2000

F: (HgMe<sub>2</sub>)<sub>2</sub>

P: 3

133:140578 Ab initio studies of the dimers (HgH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> and (HgMe<sub>2</sub>)<sub>2</sub>. Metallophilic attraction and the van der Waals radii of mercury. Pyykko, Pekka: Straka, Michal Department of Chemistry, University of Helsinki Helsinki, Finland Phys. Chem. Chem. Phys., 2(11), 2489-2493 (English) 2000.

The title compds. are used to det., for the first time, the energy of the 'metallophilic' attraction between two Hg(II) compds. The dispersion and electrostatic multipole components to this attraction are analyzed. The present purely theor. mol. data suggest a mercury(II) van der Waals radius of 175(7) pm.

$[\text{Hg}(\text{CH}_3)_2]_2$  2000

Pyykko, Pekka; et al.,

ab initio  
pacem

Phys. Chem. Chem. Phys.  
2000, 2 (III), 2489-2493

(all.



$(\text{HgH}_2)_2$ ; III)