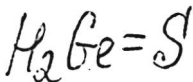
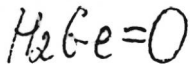


Ge-O-H

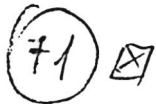
1981

22 Б53. Структура германона и герматина, исследованные с помощью неэмпирических расчетов. Trinquier Georges, Pelissier Michel, Saint-Roch Bruno, Lavayssiere Helene. Structure of germanone and germathione through abinitio calculations. «J. Organometal. Chem.», 1981, 214, № 2, 169—181 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении неэмпирич. псевдопотенциала рассчитано электронное строение и проведена оптимизация геометрич. параметров германона $\text{H}_2\text{Ge}=\text{O}$ (I) и герматина $\text{H}_2\text{Ge}=\text{S}$ (II). Использовался двухэкспонентный базис гауссовых ф-ций с включением поляризац. d-ф-ций на всех атомах в I и II. Распределение заряда I и II исследовано в рамках анализа заселенностей по Малликену. Оптимизация равновесных геометрич. параметров привела к плоским, равновесным структурам I и II с длинами связей $\text{Ge}-\text{O}$ 1,63, $\text{Ge}-\text{H}$ 1,55 Å и углом HGeH 112° в I и длинами связей $\text{Ge}-\text{S}$ 2,02, $\text{Ge}-\text{H}$ 1,55 Å и



структура,
геометрия



X.1981/v22, 19AB

углом HGeH 110° в II. С использованием рассчитанных потенциальных Пв в I и II в гармонич. приближении рассчитаны силовые постоянные и частоты колебаний. Для связей GeO и GeS теор. частоты колебаний составили 1038 и 586 см^{-1} соотв. Из расчетов следует, что связь $\text{Ge}=\text{X}$ сильно поляризована, особенно в I. Полярности σ - и π -связей указывают на то, что тип связи в I и II является промежуточным между π -связью и частично полярной связью. С использованием расширенного метода конфигурац. взаимодействия в I и II рассчитаны энергии связей $\text{Ge}=\text{X}$, составившие 108 и 83 ккал/моль для связей $\text{Ge}=\text{O}$ и $\text{Ge}=\text{S}$ соотв. Расчеты молекулы оксигермилена, проведенные с полной оптимизацией геометрии, показали, что изомер гермилена $\text{H}-\text{Ge}-\text{OH}$ на 18 ккал/моль является более стабильным, чем I.

И. А. Тополь

Or

H_2GeO

1981

ab initio
расчет
структуры
и теплоты
связи

⊗
(H)

/ 95: 103719g Structure of germanone and germathione through AB initio calculations. Trinquier, Georges; Pelissier, Michel; Saint-Roch, Bruno; Lavayssiere, Helene (31062 Toulouse, Fr.). *J. Organomet. Chem.* 1981, 214(2), 169-81 (Eng). Ab initio quantum calcns., using pseudopotentials and including electron correlation were performed on H_2GeO and H_2GeS with double ζ (+d orbitals) basis sets. Full geometry optimization performed at the SCF level led to planar structures $GeO = 1.63 \text{ \AA}$, $GeH = 1.55 \text{ \AA}$ and $\angle HGeH = 112^\circ$ for H_2GeO and $GeS = 2.02 \text{ \AA}$, $GeH = 1.55 \text{ \AA}$ and $\angle HGeH = 110^\circ$ for H_2GeS . The force consts. were calcd. as well as the theor. vibrational frequencies ($\nu(GeO) = 1038 \text{ cm}^{-1}$, $\nu(GeS) = 586 \text{ cm}^{-1}$). As expected, the $Ge = X$ bond is strongly polarized specially in H_2GeO . The σ and π $Ge-O$ bond polarities suggest that the bonding is intermediate between π ($H_2Ge:O$) and semipolar bonding. Extended CI was used to compute the $Ge:X$ bond energies as the $[H_2GeX \rightarrow H_2Ge(^1A_1) + X(^3P)]$ reaction enthalpy. They are predicted to be about 108 kcal/mol for $Ge:O$ and 83 kcal/mol for $Ge:S$. H_2GeO is less stable than its germylene isomer $H-Ge-OH$ by 18 kcal/mol.

C.A. 1981, 95, 112. H_2GeS

$\text{Ge}_2\text{O}_5 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

1982

HGeOH Marge R. H., Kauffmann
J. W., et al.

ИК спектры
в
магнетице 179, 363-376.
ACS Symp. Ser. 1982,

($\text{Cu}_x\text{Li}_{1-x} \cdot n\text{H}_2\text{O}$; III)

H_2GeO

1982

$HGeOH$

Trinquier G., Barthe-
lat J. C., et al.

теорет.

расч.

осн. и возб.

состояний.

J. Am. Chem. Soc. 1982,
104 (22), 5931-5936.

(см. H_2GeCH_2 ; III)

H_4GeX_4
 $\text{H}_6\text{Ge}_2\text{X}_6$
(X=O, S)

om 28058

обзор,
м.п.

КС

X. 1988, 19, N 8

$\text{H}_4\text{GeO}_4, \text{H}_6\text{Ge}_2\text{O}_6$ / 1987

8 Б1030. Молекулярное моделирование изменений длин связей и углов в кристаллах германатов и тиогерманатов. Сравнение с изменениями, рассчитанными для C, Si и Sn-содержащих оксидных и сульфидных молекул. Molecular mimicry of bond length and angle variations in germanate and thiogermanate crystals. A comparison with variations calculated for C-, Si-, and Sn-containing oxide and sulfide molecules. Gibbs G. V., D'Arco Philippe, Boisen, Jr. M. B. «J. Phys. Chem.», 1987, 91, № 20, 5347—5354 (англ.)

Обзор. Неэмпирич. методом ССП в базисе 3—21 ГФ** рассчитано геометрич. строение молекул H_4GeX_4 и $\text{H}_6\text{Ge}_2\text{X}_6$ (X=O, S) и проведено сравнение с аналогичными данными для C, Si и Sn-содержащих соединений. Показано, что Si- и Ge-содержащие соединения имеют сходные структуру, физ. св-ва и тенденции к стеклообразованию. Для молекул H_4TO_4 (T=C, Si, Ge, Sn) структура с симметрией S_4 стабильнее альтернативной структуры симметрии D_{2d} . Библ. 58. И. Н. Сенченя

$\text{H}_4\text{GeS}_4, \text{H}_6\text{Ge}_2\text{S}_6$

H_4CO_4 , H_4SiO_4 , H_4GeO_4 , H_4SnO_4



GeHO^+
 GeH_3O^+

1990

11 Б1035. Протонирование монооксида германия GeO и германона H_2GeO . Исследование неэмпирическим методом ССП. The protonation of germanium monoxide, GeO , and germanone, H_2GeO . An ab initio SCF study / Antoniotti Paola, Grandinetti Felice // Gazz. Chim. Ital.—1990.—120, № 11.—С. 701—704.—Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисах 3-21 ГФ и 3-21 ГФ* с полной оптимизацией геометрии рассчитаны различные изомеры состава GeHO^+ и GeH_3O^+ . В обоих базисах изомер GeOH^+ — стабильнее — HGeO^+ на ~100 ккал/моль. Результаты расчетов согласуются с имеющимися эксперим. данными по газофазному протонированию SiO . Предсказано увеличение сродства к протону при переходе от H_2CO к H_2GeO . В. И. Фаустов

М.П.

Х. 1991, № 11

GeH₂O
K GeOK

поверхность
потенц.
энергии

ф. 1992, № 6

1991

№ 6 Д87. Неэмпирическое МО-исследование поверхности потенциальной энергии GeH₂O. Ab initio molecular orbital study of the GeH₂O potential energy surface / So S. P. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 26.— С. 10658—10662.— Англ.

Геометрии 7 структур на синглетной поверхности потенц. энергии GeH₂O (I) и триплетной HGeOH (II) оптимизированы с использованием методов Хартри — Фока (базис 3-21 ГФ*) и Меллера — Плессета 2-го порядка (базис 3-21 ГФ*). Рассчитаны колебательные частоты для этих структур. Поправки на электронную корреляцию вводились методом Меллера — Плессета 4-го порядка с учетом 1—4-кратных возбуждений. Показано, что основное состояние I является синглетным, а H₂GeO (III) лежит выше, чем II. Найдено, что транс-II несколько более стабилен, чем цис-II, при учете эффектов электронной корреляции. Энергии активации изомерных переходов транс-II → цис-II, III → транс-II и реакции III → H₂ + GeO найдены равными 11,4; 34,2 и 66,6 ккал/моль соответственно.

GeH_2O
 HGeOH

1991

115: 287546j Ab initio molecular orbital study of the hydroxygermylene potential energy surface. So, Suk Ping (Chem. Dep., Chin. Univ. Hong Kong, Shatin, Hong Kong). *J. Phys. Chem.* 1991, 95(26), 10658-62 (Eng). The geometries and vibrational frequencies of seven structures on the singlet GeH_2O potential energy surface and triplet hydroxygermylene (HGeOH) have been optimized using the HF/3-21G^(*) and MP2/3-21G^(*) methods. Electron correlation errors are cor. up to the MP4SDTQ level. The ground state of hydrogermylene is a singlet and in contrast to the carbon analogs, germanone (H_2GeO) lies higher energetically than hydroxygermylene. *trans*- HGeOH has been found to be slightly more stable than *cis*- HGeOH only after electron correlation is taken into consideration. With correction for zero-point vibrational energies, MP4SDTQ activation energies for the reactions *trans*- $\text{HGeOH} \rightarrow \text{cis-HGeOH}$, $\text{H}_2\text{GeO} \rightarrow \text{trans-HGeOH}$, and $\text{H}_2\text{GeO} \rightarrow \text{H}_2 + \text{GeO}$ have been calcd. to be 11.4, 34.2, and 66.6 kcal/mol, resp.

рарит
структур,
гидрокси-гидро-гидро

C.A. 1991, 115, n26

H₂BeD

1993

So, S.P.,

структура
и
стабильн.,
теорет.
расчет

J. Phys. Chem. 1993, 97(18),
4643-6.

(см.

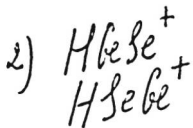


H₂BeSH; III)

1994

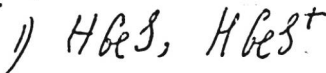


ab initio method,
empirical, etc.,
calculations.



(X)
(to)

C.A. 1994, 121, N20



121: 238757u Molecular structures and properties of HGeX^+ and HXGe^+ ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$) species. Leszczynski, Jerzy; Kwiatkowski, Josef S.; Leszczynska, Danuta; Hale, Brian (Department of Chemistry, Jackson State University, 1400 Lynch Street, Jackson, MS 39217 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 226(3-4), 413-19 (Eng). Ab-initio MO calcns. were done for the HGeX^+ and HXGe^+ ions ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$). Equil. geometries of the studied species were located at the Hartree-Fock and MP2 levels by using valence triple- ζ basis set with two sets of p-polarization functions on the hydrogens and two sets of d-polarization functions on the heavier elements (TZP basis set). At both levels, bent conformations of the HXGe^+ ions were found to be the global min. structures, and the HGeX^+ ions were local-min. species. The predicted bent conformations for the HXGe^+ ions are in contradiction to the Walsh rules, which require linear structures for HXY mols. possessing ten valence electrons. The MP4/TZP//MP2/TZP level of calcns. for the possible dissociation products (GeX , H^+ ; and GeX^+ , H) predicts that all title compds. are thermodynamically stable and should be obsd. by experimentalists. To assist such exptl. studies on these exptl. elusive ions, we furnish reliable theor. mol. parameters, rotational consts., vibrational frequencies and intensities.

1994

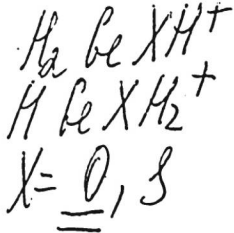
№ 17 Б199. Молекулярная структура и свойства частиц HGeX^+ и HXGe^+ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$). Molecular structures and properties of HGeX^+ and HXGe^+ ($\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$) species / Leszczyński Jerzy, Kwiatkowski Josef S., Leszczyńska Danuta, Hale Brian // Chem. Phys. Lett. — 1994. — 226, № 3—4. — С. 413—419. — Англ.

Неэмпирическими методами МО исследованы структура, вращат. константы, колебат. частоты и интенсивности колебат. полос ионов HGeX^+ и HXGe^+ с $\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$. Равновесные геометрии определены на уровне ХФ и МП2 с использованием валентного трехэкспонентного базиса с двумя наборами поляризац. р-ф-ций для атомов водорода и с двумя наборами поляризац. d-ф-ций для атомов более тяжелых элементов. На обоих уровнях расчета изогнутые конформации ионов HXGe^+ отвечают глобальному минимуму. Структура HGeX^+ отвечает локальному минимуму. Влияние электронной корреляции на

д.л.п.)
колебат.
частоты,
интенсив-
ности
колебат.
полос (42)
Х. 1995, № 17

1) HGeS^+ , HSe^+
2) HGeSe^+ , HSe^+

относит. устойчивость ионов, исследовано в приближении МП вплоть до четвертого порядка. Показано, что рассмотренные ионы являются термодинамически устойчивыми. Рассмотрены также их возможные продукты диссоциации. На коррелированном уровне изучены также нейтр. молекулы GeX и катионы GeX^+ . Библ. 30. Н. С.



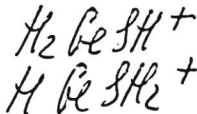
ангылыа,
Vi, Vo, меор-
па крем

(11) ~~IX~~

C.A. 1994, 121, ~22

1994

121: 264141h Theoretical Study of the Potential Energy Surfaces of Protonated Germanone and Germathione. So, Suk Ping (Chemistry Department, Chinese University of Hong Kong, Shatin, Hong Kong). *J. Phys. Chem.* 1994, 98(44), 11420-3 (Eng). The geometries and vibrational frequencies of various structures of the $[\text{Ge}, \text{X}, \text{H}_3]^+$ system ($\text{X} = \text{O}, \text{S}$) were calcd. by using the HF/3-21G^(*) and MP2/3-21G^(*) methods. Electron correlation errors were cor. up to the MP4SDTQ level. The X-protonated state of H_2GeX ($\text{X} = \text{O}, \text{S}$) is more stable than the Ge-protonated one. At the MP4SDTQ/3-21G^(*)//MP2/3-21G^(*) + ZPE level, H_2GeO and H_2GeS have been computed to have resp. X-site proton affinities of 197.4 and 188.4 kcal mol⁻¹, which are attributable to the different charge sepns. of their double bonds. The 1,2-hydrogen shift reaction of H_2GeXH^+ to HGeXH_2^+ is exothermic with a barrier of 50.9 kcal mol⁻¹ for $\text{X} = \text{O}$ but endothermic with a barrier of 52.9 kcal mol⁻¹ for $\text{X} = \text{S}$, with transition-state structures as expected from Hammond's postulate.



H₃GeGeH₃

(IM. 37998)

1995

структурн.
параметры,
теор. расчит

Jerzy Leszczynski,
Jian. Q. Huang, et al.,
Chem. Phys. Lett., 1995,
244, 252-257.

оч. 38543

1995

F: HGeO+

P: 3

1B142. Система $\text{GeOH}\{+\}-\text{HGeO}\{+\}$. Детальное квантово-механическое исследование. The $\text{GeOH}\{+\}-\text{HGeO}\{+\}$ system: A detailed quantum mechanical study / Yamaguchi Yukio, Richards Claude A. (Jr), Schaefer Henry F. (III) // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 18. - С. 7975-7982. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП с учетом электронной корреляции методами связанных кластеров и КВ в базисах до трехэкспонентного с включением высших поляризационных и диффузных функций исследовано электронное строение $\text{GeOH}\{+\}$ (I) и $\text{HGeO}\{+\}$ (II). Обнаружено, что линейный I на 70,3 ккал/моль выгоднее линейного II. Энергия активации изомеризации $\text{I} \rightarrow \text{II}$ (I,-водородный сдвиг) (1,2-водородный равной 28,0 ккал/моль. Дипольные моменты I и II оценены в 0,61 и 4,64D. Обсуждена возможность эксперим. обнаружения I и II. Библ. 37.



Рмх 1997

$\text{GeOH}^+ - \text{HGeO}^+$

OM 38543

1995

124: 15849m The $\text{GeOH}^+ - \text{HGeO}^+$ system: a detailed quantum mechanical study. Yamaguchi, Yukio; Richards, Claude A., Jr.; Schaefer, Henry F. III (Center Computational Quantum Chemistry, University Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(18), 7975-82 (Eng). The ground state potential energy hypersurface of the $\text{GeOH}^+ - \text{HGeO}^+$ system has been investigated employing ab initio electronic structure theory. First, geometries of two equil. and isomerization (1,2 hydrogen shift) reaction transition state were detd. at the self-consistent-field (SCF), CI with single and double excitations (CISD), coupled cluster with single and double excitations (CCSD), and CCSD with perturbative triple excitations [CCSD(T)] levels of theory using four basis sets. A qual. incorrect geometry is predicted for GeOH^+ unless f functions are included in the basis set. Second, phys. properties including dipole moments, harmonic vibrational frequencies, and IR (IR) intensities of three stationary points were evaluated at the optimized geometries. The effects of electron correlation reduce the dipole moment of HGeO^+ by 1.25 Debye. At the highest level of theory employed in this study, CCSD(T) using the triple zeta plus double polarization with diffuse and

стабильн.,
структура,
теор. расчет

C.A. 1996, 124, n 2

higher angular momentum functions [TZ2P(f,d) + diff] basis set, linear GeOH^+ is predicted to be more stable than linear HGeO^+ by 71.7 kcal/mol. After correction for zero-point vibrational energies (ZPVEs), this energy difference becomes 70.3 kcal/mol. With the same method the classical barrier height for the exothermic isomerization (1,2 hydrogen shift) reaction $\text{HGeO}^+ \rightarrow \text{GeOH}^+$ is detd. to be 30.3 kcal/mol and the activation energy (with the ZPVE correction) is 28.0 kcal/mol. The predicted dipole moments of GeOH^+ and HGeO^+ are 0.61 and 4.64 Debye, resp. Thus, the HGeO^+ ion may be suitable for a microwave spectroscopic investigation. On the other hand, the GeOH^+ ion may be suitable for an IR spectroscopic study due to the strong IR intensities of the three vibrational modes. The geometrical and energetic features are compared with those of the valence isoelectronic $\text{HCO}^+ - \text{COH}^+$ and $\text{SiOH}^+ - \text{HSiO}^+$ systems.

H₂ BED

[Om. 38392]

1996

^{1/2}H BEDH

cis-H BEDH

Jürgen Kapp, Milan
Kemko et al.,

g. Am. Chem. Soc.,
1996, 118, N 24, 5745-5750

- H₂XO and (● CH₃)₂XO Com-

novels ($X = C, Si, Re, Sn, Pb$):
double bonds vs Carbenes -
like structures - Can the Metal
compounds exist at all?

1996

F: H₂GeO

P: 3

4Б171. Соединения H[2]XO и (CH[3])XO (X=C, Si, Ge, Sn, Pb). Сопоставление карбеноподобных структур и структур с двойными связями. Могут ли вообще существовать такие соединения металлов? H[2]XO and (CH[3])[2]XO compounds (X=C, Si, Ge, Sn, Pb): Double bonds vs carbene-like structures - Can the metal compounds exist at all? / Kapp Jurgen, Remko Milan, Schleyer Paul von Rague // J. Amer. Chem. Soc. - 1996. - 118, N 24. - С. 5745-5751. - Англ.

Место хранения ГПНТБ

РШХ 1997

GeOH

1996

7Б133. Система $\text{GeOH} - \text{HGeO}$. Являются ли основными или валентными 3d-электроны? The $\text{GeOH}-\text{HGeO}$ system: Are the 3d electrons core or valence? / Yamaguchi Yukio, Schaefer Henry F. (III) // J. Chem. Phys.— 1996.— 104, № 24.— С. 9841—9847.— Англ.

Неэмпирическими методами исследована поверхность потенциальной энергии системы GeOH (I) — HGeO (II) в основном состоянии $^2A'$. Изогнутая структура I устойчивее на 28,5 ккал/моль изогнутой структуры II на самом высоком использованном уровне расчета — в приближении связанных кластеров с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений с использованием трехэкспонентного базиса, дополненного поляризационными и диффузными функциями. На этом уровне энергетический барьер экзотермической реакции $\text{II} \rightarrow \text{I}$ определен равным 11,8 ккал/моль. Показано, что для рассмотренной системы «замораживание» 3d-орбиталей атома Ge приводит к ошибочным предсказаниям энергетических характеристик и др. свойств. Присутствие двух изогнутых структур II с валентными углами, равными 120° и 91° , и раз-

М.П.

Х. 1997, № 7

деленными энергией в 4,9 ккал/моль, является особенно-
стью рассмотренной системы. Библ. 34. — Н. С.

GeOH-HGeO

1996

125: 96564k The GeOH-HGeO system: Are the 3d electrons core or valence? Yamaguchi, Yukio; Schaefer, Henry F., III (Center for Computational Quantum Chemistry, Univ. Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1996, 104(24), 9841-9847 (Eng). The $^2A'$ ground state of GeOH-HGeO system has been investigated by ab initio electronic structure theory. The equil. geometries and phys. properties including dipole moments, harmonic vibrational frequencies, and assocd. IR intensities for GeOH, HGeO, and the isomerization (1,2 hydrogen shift) transition state are detd. at the self-consistent-field (SCF) and CI with single and double excitations (CISD) levels of theory with four basis sets. There appear to be two min. for the bent HGeO (isomers A and B) on its SCF and CISD potential energy hypersurfaces. At the Hartree-Fock level the structure with HGeO angle near 90° (isomer B) lies lower, but correlated methods show that the structure with HGeO angle near 120° (isomer A) actually lies lower. At the optimized CISD geometries, the single point energies of coupled cluster with single and double excitations (CCSD) and CCSD with perturbative triple excitations [CCSD(T)] methods are also detd. In the correlated procedures three different types of frozen core orbital approxn. (15 frozen core, 10 frozen core, and 6 frozen core orbitals) have been examd. The energetics based on the first (15 frozen core orbitals) approxn. present errors of about 1 kcal/mol

(meop. pac
rem)

C. A. 1996, 125, N8

compared to more accurate second (10 frozen core orbitals) and third (6 frozen core orbitals) approxns. At the highest level of theory employed in this research, CCSD(T) with triple zeta plus double polarization with diffuse and higher angular momentum functions [TZ2P(f,d)+diff] basis set, the bent GeOH mol. is predicted to be lower in energy than the bent HGeO mol. by 28.5 kcal/mol. This energy sepn. becomes 25.7 kcal/mol with the zero-point vibrational energy (ZPVE) correction. The classical energy barrier for the exothermic isomerization reaction [HGeO(B)→GeOH] is detd. to be 11.8 kcal/mol and the activation energy (with the ZPVE correction) 10.7 kcal/mol. The theor. predicted isotope shifts for the GeO stretching vibrational frequency of GeOH agree very well with exptl. assignments by Withnall and Andrews.

Cell... DH2 (Om. 39019) 1997
Kosmulek

Andrzej Nowak and
Jerzy Leszczyński,

J. Phys. Chem. A 1997,
101, N 20, 3784-88.

Molecular Structure of ...

$\text{Ge}(\text{OH})_3^-$

1998

Morgan, Nelson R., et al.,

(Ap)

J. Phys. Chem. A 1998,
102 (50), 10399-10403

neop-
racem

(Cell. GeH_4 , III)

1998

 $H_2Ge = O$

J. Phys. Chem.

128: 196863n Comparative ab Initio Study of Molecular Structures and Relative Stabilities of Germanone, Germathione, Germaselenone, and Their Structural Isomers. Nowek, Andrzej; Sims, Rashad; Babinec, Peter; Leszczynski, Jerzy (Department of Chemistry, Jackson State University, Jackson, MS 39217 USA). *J. Phys. Chem.* A 1998, 102(12), 2189-2193 (Eng), American Chemical Society. The relative stabilities of the $H_2Ge=X$, trans-HGeXH, and cis-HGeXH ($X = O, S, Se$) species and the transition states for $H_2Ge=Se \rightarrow$ trans-HGeSeH and trans-HGeSeH $\rightarrow$ cis-HGeSeH isomerizations were investigated using post-Hartree-Fock ab initio methods. Geometry optimization and frequency calcns. were performed at the HF, MP2, DFT, and QCISD(T) levels using TZP(2d,2p), TZP(2df,2pd), and TZP++(2df,2pd) basis sets. In the cases of oxygen and sulfur, the isomers $H_2Ge=O$ and $H_2Ge=S$ represent the structures with the highest energy, and the global min. corresponds to the trans-HGeSH and cis-HGeOH forms, resp. In a more detailed study of the potential energy surface of the Ge(H_2Se) system, we have found that the trans-HGeSeH structure is a global min. sep'd. at the QCISDT/TZP(2df,2pd) level by only 0.5 and 2.0 kcal/mol from $H_2Ge=Se$ and cis-HGeSeH, resp. In all cases the electron correlation energy plays a dominant role, and reliable assignment of the relative stability of these energetically close-lying isomers was possible using only higher levels of ab initio theory.

 $H_2Ge = X$ $X = O, S, Se$ trans H_2GeXH cis $HGeXH$ cis $HGeXH$ cis $HGeXH$ $H_2Ge = S$ $H_2Ge = Se$ (4) Δ

C.A. 1998,

128, N16

изгородки
и

(Dm. 40027)

1999

ОКСИ изгородки
впечатил

I.R. Tobias Johnson,
Itali Panas,

сир-ра,
свело и
образ

Chem. Phys., 1999, 249,

273-●

303
монго 1см/с'

H₃ BDM

[Om. 40832]

2001

Suk Ping Lo[†],

Ab initio
reaction

J. Phys. Chem. 2001,
A105, 4988-4991.

Ab Initio
Orbital
Reaction of

Molecular
Study of the
● C₆₀ with

H_2O and Decomposition
Reactions to H_2 gas.