

Мисс

1980
14 Б82. Расчет полярных тензоров, эффективных зарядов и интенсивностей колебательных спектров в комплексах $M(CO)_6$ ($M=Cr, Mo, W$) и $Ni(CO)_4$.
Bruns R. E., Hase Y., Brin Ira M. Polar tensors, effective charges, and vibrational intensities of the $M(CO)_6$ ($M=Cr, Mo, W$) and $Ni(CO)_4$ complexes. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 26, 3593—3597 (англ.)

Результаты полуэмпирич. расчетов электронного строения комплексов $Cr(CO)_6$ и $Ni(CO)_4$, выполненных в рамках приближений ТПДН и РМХ, использованы для однозначного определения знаков пр-ных дипольных

н.в. мех.
расчет
д.п. строен.

(см. $Cr(CO)_6$; и)

2. 1981. 114

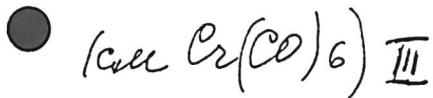


1980

Bursten B.E., et al

расчет
и строен.

Inorg. Chem., 1980, 19, №6,
1810-1811.



$\text{Ni}(\text{CO})_4$

[оттиски 10224]

1980

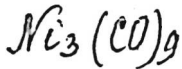
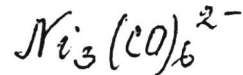
Davenport J. W.

интервью,

связь металл-
- CO (группа)

Chem. Phys. Lett.
1980, 77 (1) 45-48.

1980



22 Б40. Химическая связь в трехъядерных карбонилах металлов. Evans John. Bonding properties of trinuclear metal carbonyls. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1980, № 6, 1005—1011 (англ.)

С помощью РМХ проведены расчеты нек-рых

трехъядерных комплексов Fe, Co, Ni и их фрагментов. (M_3 со структурой правильного треугольника, где $M = \text{Fe, Co, Ni}$, а также мооядерных карбониллов). Различие в структурных формах и жесткости комплексов $\text{Ni}_3(\text{CO})_6^{2-}$ и $M_3(\text{CO})_9$ ($M = \text{Co, Ni}$) объясняется в терминах св-в граничных орбиталей. В комплексе Ni имеется только одна граничная орбиталь симметрии a_2'' , подходящая для внеплоскостного связывания, что приводит к явному ослаблению связывания с др. группами вдоль главной оси молекулы. М. Кузьминский

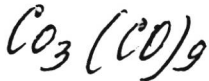
химическая
связь
расчет
комплекс

(+1) 18

Х. 1980 г. 22 б. 111



1980

Кв. мех.
расчет

(+2)

11 Д125. Свойства связи в трехъядерных карбонилах металлов. Bonding properties of trinuclear metal carbonyls. Evans John. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1980, № 6, 1005—1011 (англ.)

Расширенным методом Хюккеля исследовано электронное строение трехъядерных карбониллов $\text{Ni}_3(\text{CO})_6^{2-}$, $\text{M}_3(\text{CO})_9$, $\text{M}=\text{Fe}, \text{Co}$, а также соответствующих одноядерных фрагментов. Проанализирована схема построения указанных систем как путем агрегации одноядерных фрагментов, так и путем присоединения CO к группировкам M_3 . Подробно проанализирована природа химич. связи в рассматриваемых соединениях, различия в их структуре и стерич. жесткости.



ф. 1980/11

NiCO

1981

6 Д85. Связывание и антисвязывание в NiCO. Изучение методом МК ССП. Bonding and backbonding in NiCO: a MCSCF study. Bagus Paul S., Roos Björn O. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 12, 5961—5962 (англ.)

геометрия,
структура

Исследовано влияние корреляционных поправок на энергию связи металл—углерод в молекуле NiCO. Волновая функция молекулы рассчитывалась в приближении многоконфигурац. метода ССП (МК ССП) с полным учетом конфигураций в пространстве активных МО. Базис АО представлял расширенный набор гауссовых ф-ций. На основе проведенных расчетов проанализированы величины вкладов от различных типов конфигураций в ф-цию электронного распределения в NiCO и в энергию связи. Найдено, что наибольшее влияние на энергию и длину связи Ni—C оказывают конфигурации с возбуждениями на МО типа π . Включение этих конфигураций ведет к $R_e = 3,39$ а. е., тогда как в приближении ССП $R_e = 3,92$ а. е.

А. И. Деметьев

Ф. 1982, 18, № 6.

$Ni(CO)_4^a$ [Оммуек 12815] 1981

Bohm M.C., Gleiter R.

Theor. chim. acta,

1981, 59 (2), 153-179.

обзор,
теорет.
расчет.
молекула.
орбитали,
геометрия.

$Ni(CO)_4^+$ (art. 12602) 1981

Breeze P. A., et al.

Ni^+ ; Inorg. Chem., 1981,

свипуктуре 20, N 10, 3369-3378.

● (cur. $Ni(CO)_3^-$; 111)



дст. 12602)

1981

Breeze P.A., et al.

Ni;

Inorg. Chem., 1981,

20, N10, 3369-3378.

свѣтлоструктура

(см. $\text{Ni}(\text{CO})_3$; III)



1981
Mellner L., et al.

Chem. Phys. Lett.,
1981, 83, N3, 474-
- 479.

спектр

(см. $Fe(CO)_5$; III)

$Ni(CO)_4$

Оттиск 11533

1981

15 Б29. Оптимизированные показатели экспонент для 4s- и 4p-орбиталей атома никеля, полученные из неэмпирических расчетов методом молекулярных орбиталей $Ni(CO)_4$. Kirschenbaum L. J., Howell J. M., Rossi A. R. Optimized exponents for nickel atom 4s and 4p orbitals obtained from ab initio molecular orbital calculations on $Ni(CO)_4$. «J. Phys. Chem.», 1981, 85, № 1, 17—21 (англ.)

равновесная геометрия

Показатели экспонент (ПЭ) атомного базиса слейтеровских 4s- и 4p-орбиталей атома Ni, представлен-



Х. 1981. № 15

ПРОСМОТРЕНО СОСТАВЛЕНИЕ ФРАГМЕНТЫ $Fe(CO)_5$

ных в виде конечной суммы гауссовых функций, найдены путем оптимизации полной энергии $\text{Ni}(\text{CO})_4$ в рамках метода ССП МО ЛКАО. Оптимизированные ПЭ составили 2,002 и 1,605 для 4s- и 4p-орбиталей соотв. Полная энергия $\text{Ni}(\text{CO})_4$, вычисленная при равновесных геометрич. параметрах с использованием оптимизированных ПЭ, составила —1955,251 ат. ед. Исследована зависимость длины связи $\text{Ni}-\text{C}$ от ПЭ 4s- и 4p-орбиталей в молек. базисе. Во всех расчетах длина связи $\text{C}-\text{O}$ принята равной 1,15 А. Равновесная длина связи $\text{Ni}-\text{C}$, вычисленная с использованием оптимизированных ПЭ, составила 1,920 А (эксперим. значение 1,84 А). Значение длины связи $\text{Ni}-\text{C}$ 1,912 А, наиболее близкое к эксперим. значению, было получено с использованием одинаковой величины ПЭ 1,67 для 4s- и 4p-орбиталей Ni . Распределение заряда в $\text{Ni}(\text{CO})_4$ исследовано в рамках анализа заселенностей по Малликену. Величина эффективного атомного заряда Ni в $\text{Ni}(\text{CO})_4$, вычисленного с оптимизированными ПЭ, составила —0,21 е. При этом заселенности 3d-, 4s- и 4p-орбиталей составили 8,8; 0,21 и 1,20 е соотв. Исследованы различные корреляции между геометрич. параметрами, заселенностями, полными энергиями и ПЭ 4s- и 4p-орбиталей Ni в $\text{Ni}(\text{CO})_4$.

$Ni(CO)_4$

Om. 11533

1981

✓ 94: 53291t Optimized exponents for nickel atom 4s and 4p orbitals obtained from ab initio molecular orbital calculations on tetracarbonylnickel. Kirschenbaum, L. J.; Howell, J. M.; Rossi, A. R. (Brooklyn Coll., City Univ. New York, Brooklyn, NY 11210 USA). *J. Phys. Chem.* 1981, 85(1), 17-21 (Eng). Energy-optimized Slater orbitals (expressed as a contraction of Gaussian orbitals) were found for Ni atom 4s and 4p orbitals by performing ab initio MO calens. on $Ni(CO)_4$. The optimized Slater exponents were 2.002 for 4s and 1.605 for 4p. $Ni(CO)_4$ energy obtained from using these exponents was -1955.251 at. units. The Ni-C bond length was optimized by using these exponents and was found to be 1.920 Å. Various correlations between geometry, energy, population, and exponent were examd. The Ni-C bond length closest to the exptl. was 1.912 Å and was predicted by using 4s and 4p exponents of 1.67.

kb. uex.
fueres

C.A. 1981, 18, 64

$Ni(CO)_4$

1981

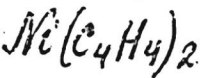
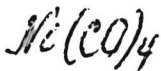
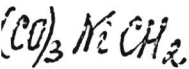
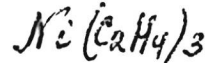
Sambe H., et al.

Chem. Phys., 1981, 59,
N3, 329-339.

γ,
геометр.

●
(см. VCl_3O ; III)

1981

кв. мех,
расчет

19 Б43. Приближаясь к хартри-фоковскому пределу для органических комплексов переходных металлов. Schaefer Henry F. Approaching the Hartree — Fock limit for organotransition metal complexes. «J. Mol. Struct.», 1981, 76, № 2 («Teochem», 1981, 1, № 2), 117—135 (англ.)

Обзор расчетов соединений (фторидов, гидридов и др.) переходных металлов, выполненных в последнее десятилетие в основном под руководством автора. Подчеркнута важная роль выбора базиса при подобных вычислениях. Обсуждены приближающиеся к хартри-фоковскому пределу результаты расчетов металлоорг. соединений $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_4)_3$, $(\text{CO})_3\text{NiCH}_2$, $\text{Ni}(\text{CO})_4$, $\text{Ni}(\text{C}_4\text{H}_4)_2$. Библ. 60. А. В. Немухин

х. 1981, N19

$Ni(CO)_4$

1981

Spangler D., et al.

расчёт
геометрии,
структуры,
и

J. Amer. Chem. Soc.,
1981, 103, N14, 3985-
- 3990.

(сер. $(CO)_3 Ni CH_2$; III)

Ni(CO)₄

1981

Swanson Basil J.,
et al.

УК-чекір J. Mol. Spectrosc.,
1981, 89, N2, 566-568.

●
(ex. SF₆ ; III)

$Ni(CO)_4$

отт. 14074

1982

10 Д374. Расчеты соединений переходных металлов в приближении ППДП. Ч. IV. Расчеты $Ni(CO)_4$ и $Fe(CO)_5$ в приближении ППДП-КВ; электронные спектры и связь с фотохимией. Calculation of transition metal compounds using an extension of the CNDO formalism IV. CNDO-CI-calculations on $Ni(CO)_4$ and $Fe(CO)_5$; electronic spectra and photochemical implications. Dick Bernhard, Freund Hans-Joachim, Hohlneicher Georg. «Mol. Phys.», 1982, 45, № 2, 427—439 (англ.)

расчет ξ_i

В рамках полуэмпирич. расчетов энергий МО в приближении ППДП с учетом конфигурац. взаимодействия рассчитаны величины энергии электронных переходов в валентной оболочке $Ni(CO)_4$ (I), $Fe(CO)_5$ (II) и соответствующие силы осцилляторов. На базе сравнения расчетных данных и эксперим. спектров поглощения I,

(11)

ор. 1982, 18, 110

II установлено, что кроме обычных переходов типа $d \rightarrow d$ и $d \rightarrow L$, значительную роль играют переходы типа $d \rightarrow p$ и $d \rightarrow s$. Анализ матрицы плотности возбужденных состояний показал, что фотохимич. активность I, II связана с возбуждением переходов типа $d \rightarrow s$ и $d \rightarrow p$. Отмечена малая роль двукратно возбужденных состояний у I, II по сравнению с органич. соединениями. Библ. 27.

Ю. В. Чижов

Ni(CO)₄

omm. 14074

1982

Кв. сек.
расчет
матриц
энергии
состояний

/ 97: 30637h Calculation of transition metal compounds using an extension of the CNDO formalism. IV. CNDO--CI-calculations on tetracarbonylnickel and pentacarbonyliron; electronic spectra and photochemical implications. Dick, Bernhard; Freund, Hans-Joachim; Hohlneicher, Georg (Lehrstuhl Theor. Chem., Univ. Koeln, 5000 Cologne, 41 Fed. Rep. Ger.). Mol. Phys. 1982, 45(2), 427-39 (Eng). CI-calcs. based on an extended CNDO formalism, were used to analyze the low lying excited states of Ni(CO)₄ and Fe(CO)₅. At. $d \rightarrow s$ and $d \rightarrow p$ excitations are important in the low energy region. Inspection of the d. matrixes of excited states indicates that these transitions are responsible for the photochem. activity of metal carbonyls. The influence of double excited configurations is reduced with respect to that for org. compds.

(H) A

C.A. 1982, 97, N 4

$Ni(CO)_4$

Отмисек 14074

1982

19 Б1245. Расчет соединений переходных металлов с использованием расширенного формализма метода ППДП. IV. Расчет методом ППДП-КВ $Ni(CO)_4$ и $Fe(CO)_5$; электронные спектры поглощения и фотохимические применения. Dick Bernhard, Freund Hans-Joachim, Hohlneicher Georg. Calculation of transition metal compounds using an extension of the CNDO formalism. IV. CNDO-CI-calculations on $Ni(CO)_4$ and $Fe(CO)_5$; electronic spectra and photochemical implications. «Mol. Phys.», 1982, 45, № 2, 427—439 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП с использованием *spd*-базиса и параметризации для переходных металлов (см. «Theor. Chim. Acta», 1979, 51, 145) рассчитаны электронные спектры поглощения (ЭСП) и электронная структура в основном и возбужденных состояниях $Ni(CO)_4$ (I) и $Fe(CO)_5$ (II). При расчете ЭСП и электронной структуры возбужденных состояний учитывалось взаимодействие между однократно и двукратно возбужденными конфигурациями.

расчет ϵ_i ,

геометр.,

структур.

(4)

Х. 1982, 19, № 19

ми. Получено хорошее согласие между рассчитанными и эксперим. ЭСП. Дано отнесение нижних электронных переходов по характеру перераспределения электронной плотности при возбуждении. Показано, что существовавшее ранее отнесение нижних электронных переходов в I и II является неточным. Возбуждения с d - на s - и p -АО металла наряду с $d \rightarrow d$ -переходами, $M \rightarrow L$ -переходами с переносом заряда и локальными возбуждениями на лигандах вносят существенный вклад в нижние полосы поглощения. Фотохим. активность I и II, по мнению авторов, определяется в основном именно вкладами $d \rightarrow s$ и $d \rightarrow p$ -конфигураций в нижние электронно-возбужденные состояния. Сообщ. III см. «J. Organomet. Chem.», 1980, 186, 63. К. Я. Бурштейн

$Ni(CO)_4$

1982

Itoh H., Ertl G.

расчёт γ ,
коэффициент,
структурный

Z. Naturforsch.,
1982, A37, N4, 346-
-352.

● (см $Ni(PF_3)_4$; III)

$Ni(CO)_4$

(Dmmuck 13866)

1982

Кв. мех.
рацем

Sakai Y., Muzina J. S.,
J. Chem. Phys., 1982,
76, 15, 2552-2557.

$Ni(CO)_4$

1982

Bohm M.C., Gleiter R.

расчёт
γ

J. Comput. Chem.,
1982, 3, N2, 140-153.

(ср. $Fe(CO)_5$; III)

$Ni(CO)_4$

1982

George Patricia M.,
Bearcamp J. Y.

J. Chem. Phys., 1982,
76, N6, 2959-2964.

(see $V(CO)_6$) III

$Ni(CO)_4$

1982

meop.
pacrm

' 97: 79234p Quantum mechanical studies of atomic, bond, and molecular polarizabilities: application to nickel tetracarbonyl of tetrahedral symmetry. Nagarajan, G. (Dep. Phys. Math., Tennessee State Univ., Nashville, TN 37203 USA). *Acta Phys. Pol. A* 1982, A61(1-2), 155-61 (Eng). The delta-function potential model, based on the variational method and delta-function electronic wave functions, was used to calc. the at., bond, and mol. polarizabilities of $Ni(CO)_4$ with tetrahedral structure. Among the quantum mech. models available for such calcns., the delta-function model is shown to give best results.

C.A. 1982, 97, N 10

$Ni(CO)_n$

1982

2 Д611. Лазерная фотоэлектронная спектроскопия $Ni(CO)_n^-$, $n=1-3$. Laser photoelectron spectrometry of $Ni(CO)_n^-$, $n=1-3$. Stevens Amy E., Feigerle C. S., Lineberger W. C. «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 19, 5026—5031 (англ.)

Исследованы фотоэлектронные спектры ионов $Ni(CO)_n^-$, $n=1-3$ при воздействии на ионный пучок излучения 488-нм Ar^+ -лазера. Рассмотрены вопросы электронной структуры и геометрии комплексов $Ni(CO)_n$ в ионном и нейтральном состояниях. Измерена энергия сродства к электрону $Ni(CO)$ ($0,804 \pm 0,012$ эВ), $Ni(CO)_2$ ($0,643 \pm 0,14$ эВ) и $Ni(CO)_3$ ($1,077 \pm 0,013$ эВ). Частота симметричных $C=O$ колебаний в нейтральных комплексах с $n=1, 2$ и 3 равна, соответственно, $1940 \pm \pm 80$, 2100 ± 80 и 2100 ± 80 см⁻¹. Определены длина и энергия связи металл—карбонил в $Ni(CO)_n$, $n=1-4$. Библ. 31. А. В. Н.

геометр.,
структура
и;

ор: 1983, 18, 12

Ni(CO)₄

1982

Ж. С. Мухомов,

Уфимский

Химический,

инст. хим. физ.
УФН

С. А. 1982, 97, 112

' 97: 98501q CNDO calculation of transition metal complexes. IV. Electronic structure of $M(CO)_4^{n-}$ and $M(N_2)_4^{n-}$. Wang, Zhizhong; Shen, Erzhang; Guo, Chunxiao (Inst. Theor. Chem., Jilin Univ., Changchun, Peop. Rep. China). *Fenzi Kexue Xuebao* 1982, 2(2), 47-56 (Ch). In the described new modified CNDO (*sp-d*) method, the wave functions of the transition metal atom are divided into 3 orbital types (*s*, *p*, and *d*); the parameters are selected on the basis of this division. A new computer program written in ALGOL (TQ-16 computer) was developed. The electron configurations and electronic energy levels were calcd. for $Ni(CO)_4$, $Co(CO)_4^-$, $Fe(CO)_4^{2-}$, $Ni(N_2)_4$, $Co(N_2)_4^-$, and $Fe(N_2)_4^{2-}$. The MO components, the Mulliken and Wiberg bond orders, and the metal-carbon and carbonyl vibrational frequencies are discussed. The photoelectron spectra of $Ni(CO)_4$ were assigned on the basis of the calcs.

$Ni(CO)_4$

1983

структура

ⓧ
+3

9 Д138. Новейшие достижения в простой теории валентных связей и теория гибридных связевых орбиталей. Recent advances in simple valence-bond theory and the theory of hybrid bond orbitals. Herman Zelek S. «Int. J. Quantum Chem.», 1983, 23, № 3: Proc. 4 Int. Congr. Quantum Chem., Uppsala, 13—20 June, 1982. Contrib. Pap., Pt 3, 921—943 (англ.)

Сделан обзор основных достижений в теории гибридных орбиталей и их использовании для определения длин связей и валентных углов в металлоорганич. соединениях. Предложен метод приближенного расчета величины «силы связи» S , определенной Полингом как нормированный на 4π интеграл по сфере от угловой части связевой орбитали. Из условия максимума S для различных типов гибридных орбиталей получены характеристич. углы между связями. Предложенные концепции использованы для описания структуры координац. соединений $Ni(CO)_4$, $Fe(CO)_5$, $Co(CO)_8$ и $Os_4O_4(CO)_{12}$. А. И. Дементьев

фр. 1983, 18, № 9



1983

Hsu Ching Shih, Yin
Hu Tai, et al.

neopem.

pacrim

Y;

Mua Hsueh 1983, 41(1),
30-7.

(see. $\text{Cr}(\text{CO})_6$; III)

$Ni(CO)_4$

Om. 17434

1983

Clarynick D., Axe F. U.,
et al.,

структурн.
параметры

Chem. Phys. Lett.
1983, 99, N 5-6, 406 -
410.



$Ni(CO)_4$

1984

7 Л309. Инфракрасная многофотонная диссоциация незамещенных карбониллов металлов в области 5 мкм. Infrared multiphoton dissociation of unsubstituted metal carbonyls at 5 μm . Au Mei-Kuen, Hackett P. A., Humphries M., John P. «Appl. Phys.», 1984, B33, № 1, 43—49 (англ.)

В поле излучения CO_2 -лазера средней мощности (1 мДж) исследованы процессы многофотонного поглощения и диссоциации паров незамещенных карбониллов $Ni(CO)_4$, $Fe(CO)_5$, $Cr(CO)_6$, $Mo(CO)_6$ и $V(CO)_6$. Давление паров исследованных соединений составляло 0,1—1,0 мм рт. ст. Установлено, что сечения многофотонного поглощения составляют $2 \cdot 10^{-17}$ см², а стехиометрия диссоциации соответствует образованию в конечной стадии свободных атомов металлов и монооксида углерода. Результаты работы согласуются с данными других авторов по исследованию фотохимич. превращения тех же молекул. Отмечено, что исследование процессов отщепления карбонильных групп от карбониллов металлов необходимо для более глубокого понимания роли последних в каталитич. процессах. Библ. 42. М т

Их многофотон.
диссоциации

Σ (4)

ср. 1984, 18, № 7

Ni(CO)₄

1984

8 Д150. Металл-карбонильная связь в Ni(CO)₄ и Fe(CO)₅. Анализ. The metal-carbonyl bond in Ni(CO)₄ and Fe(CO)₅. A clear-cut analysis. Bauschlicher Charles W., Jr., Bagus Paul S. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 12, Pt2, 5889—5898 (англ.)

Проведен детальный анализ связывания для волн. функций ССП основных состояний Ni(CO)₄ и Fe(CO)₅. Используется недавно развитый метод вынужденных пространственных орбитальных вариаций (ВПОВ) (Bagus P. S. et al. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, 4378), который позволяет дать оценки важности различных вкладов во взаимодействие. Получены три основные вывода относительно природы взаимодействия металл—СО. 1). Происходит значительное отталкивание замороженных σ-орбиталей СО и 4s-оболочки металла. Это благоприятствует связыванию, возникающему благодаря занятости 3dⁿ⁺²4s-состояний металла. Для кластеров и одиночных атомов металла, взаимодействующих с одной группой СО, валентный σ-заряд может быть поляризован от СО. В Ni(CO)₄ и Fe(CO)₅

структура

НД

фр. 1985, 18, 18

группы CO окружают атом металла и исключают возможность поляризации валентных электронов. 2) Перенос σ -заряда от CO к металлу не может вносить большого вклада в энергию взаимодействия. Для того, чтобы это произошло, необходимо иметь соответствующую незаполненную оболочку на атоме металла. В $\text{Fe}(\text{CO})_5$ свободна da_1' -орбиталь Fe. Но этот вклад мал для $\text{Ni}(\text{CO})_4$, т. к. его конфигурация d^{10} . π -Перенос от металла к CO важен для обоих комплексов. 3) $4s$ и $4p$ -орбитали металла вносят незначительный вклад во взаимодействие (0,1—0,3 эВ). Л. Б.

$Ni(CO)_4$ Blomberg M. R. A., 1984.
Brandemark U. B., et al.

Pacrem
empyrm,
E. J. Phys. Chem., 1985, 89,
NII: 5th Amer. Conf. Theor.
Chem., Grand Teton Nat.
Park, Wyo, June 15-20, 1984,
2171 — ● 2180.

(Ccr. Ni CO; III)

$Ni(CO)_4$

1984

19 Б1045. Исследование применимости приближения Хартри — Фока для расчета соединений переходных металлов. Расчет комплекса $Ni(CO)_4$. $Ni(CO)_4$ — a test of the Hartree — Fock approximation for transition-metal compounds. Fægri K. Jr., Almlöf J. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 107, № 2, 121—124 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО проведены расчеты $Ni(CO)_4$ (I) в тетраэдрич. конфигурации. Исследованы 4 типа сгруппированных гауссовых базисов от станд. двухэкспонентного: $(12s8p4d/8s6p3d)$ для Ni и $(7s3p/4s2p)$ для C и O до расширенного, включающего f-ф-цию для Ni. В расчетах с малым базисом оптимизированы расстояния Ni—C и C—O, а в расчетах с расширенным — только расстояние Ni—C (в этом случае связь C—O была фиксирована при эксперим. значении, совпадающим с результатом оптимизации в малом базисе). Полученное в лучшем базисе расстояние Ni—C (1,921Å) на 0,096Å больше эксперименталь-

геометрия,
структура

х. 1984, 19, N 19

ного. Учет по теории возмущений 1-го порядка релятивистской поправки уменьшает расхождение теории и эксперимента до 0,071А. Сделан вывод, что для достижения стабильных результатов в рамках метода Хартри — Фока может потребоваться очень широкий базис. С др. стороны, отличается, что даже при достижении хартри-фоковского предела расхождение теории и эксперимента м. б. достаточно заметным. Э. Герман



$Ni(CO)_4$

1984

10 Д157. $Ni(CO)_4$ — тест для проверки приближения Хартри—Фока для соединений переходных металлов. $Ni(CO)_4$ — a test of the Hartree—Fock approximation for transition-metal compounds. Faegri K., Jr., Almlöf J. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 107, № 2, 121—124 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение $Ni(CO)_4$. Использованы базисы гауссовых ф-ций от $12s8p4d/7s3p$, сгруппированного в $8s6p3d/4s2p$, до $15s11p6d1f/13s8p2d$, сгруппированного в $11s8p4d1f/7s5p2d$. Наилучший базис приводит к завышению длины связи $Ni-C$ на 0,097 Å. Учет релятивистской поправки в первом порядке теории возмущений уменьшает эту величину до 0,071. Отмечено, что увеличение базиса приводит к ухудшению значения длины связи $Ni-C$, а в наименьшем базисе из-за компенсации ошибок она близка к эксперим. значению.

В. Л. Лебедев

расчет м.п.,
структурн

ф. 1984, 18, № 10

$Ni(CO)_4$

1984

101: 28625k Tetracarbonylnickel ($Ni(CO)_4$) - a test of the Hartree-Fock approximation for transition-metal compounds. Faegri, K., Jr.; Almloef, J. (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 107(2), 121-4 (Eng). The geometry of $Ni(CO)_4$ was optimized with basis sets of varying size, the larger ones being of near-Hartree-Fock quality. The best basis sets give a metal-ligand bond distance 0.097 Å longer than expt. Relativistic corrections were obtained at the level of first-order perturbation theory, and yield a Ni-C bond contraction of 0.026 Å.

теор. расчет
структура

C.A. 1984, 101, N4

$Ni(CO)_4$

om. 20658

1984

Mužinaga S., Klobukow-
ski M., et al.,

теорет.
раб.

Phys. Chem., 1984, 88,
N 21, 4880-4886.

1984
Энергия
связей Skinner H. A., Connor J. A.
 $Ni(CO)_4$ Pure and Appl. Chem.,
1985, 57, 11; Int. Conf. Chem.
Thermodyn. and 39th Ca-
(обзор) conum. Conf., Hamilton, 13-17
Aug., 1984, 79-88.

(см. Энергия связей $Cr(CO)_6$; III)

$Ni(CO)_4$

10m. 22 265

1985

Энергия
связи,
оптимизиров.
геометрия,
теор. расчет.

Bromberg M.R.A., Bran-
demark U.B., et al,
J. Phys. Chem., 1985,
89, 11, 2171-2180.

$Ni(CO)_4$

От 22460

1985

4 Б1056. Химическая связь в соединениях переходных металлов; сопоставление результатов, полученных в приближениях функционала локальной плотности и Хартри—Фока для $Ni(CO)_4$. On the bonding in transition-metal compounds: a comparison of LDF and HF results for $Ni(CO)_4$. Jörg H., Rösch N. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 120, № 4-5, 359—362 (англ.)

Методом ЛКАО-Х α в базисе сгруппированных гауссовых функций рассчитано электронное строение и оптимизированы равновесные структурные параметры молекулы $Ni(CO)_4$ (I) симметрии T_d . Вычисл. длины связей (в скобках эксперим. значения) $R(Ni-C) = 1,805$ (1,825) Å, $R(C-O) = 1,137$ (1,122) Å, 4 молекулы CO и атом Ni указывают на завышение прочности связи Ni—C в Х α -приближении. И. А. Тополь

геометрия,
структура

Х. 1986, 19, 24

$Ni(CO)_4$

Om. 22 460

1985

/ 103: 185983j On the bonding in transition-metal compounds: a comparison of LDF and HF results for nickel tetracarbonyl ($Ni(CO)_4$). Joerg, H.; Roesch, N. (Tech. Univ. Muenchen, D-8046 Garching, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 120(4-5), 359-62 (Eng). Assuming tetrahedral symmetry, a geometry optimization for $Ni(CO)_4$ was performed using the linear combination of Gaussian-type orbitals $X\alpha$ method. The results for various spectroscopic consts. are in satisfactory agreement with expt. However, the values for the metal-C bond length, for the frequency of the corresponding stretching motion and for the dissocn. energy indicated a slight overestimation of the metal-C bond strength. The contrasting findings for the Ni-C distance from the Hartree-Fock (HF) and the $X\alpha$ method were correlated with their description of pertinent metal configurations.

структур-
параметры

(теор. расчет)

C.A. 1985, 103, N 22

$Ni(CO)_4$

1985

Rohlfing Celeste McMi-
chael, May P. Jeffrey.

теор.
расчет
структ.
и спектров
связи.

J. Chem. Phys., 1985,
83 (9), 4641-9.

(Cur. Ni CO; III)

Ni(CO)_4

[OM-21601]

1985

Seljo L., Barandiaran L., et al.

Селъо Л.,
Барандиаран Л.,
и др.

Chem. Phys. Lett.,
1985, 117, N 2,

151-153.

$Ni(CO)_4$

1985

Ziegler Tom.

AH^+

Organometallics, 1985,
4, 24, 675-680.

($\bullet$ $Fe(CO)_5$; III)

$\text{Ni}(\text{CO})_4$

1986.

Bauschlicher Ch. W.,
Siegbahn Per E. M.

u. n.

J. Chem. Phys., 1986,
85, NS, 2802-2807.

(cu.  $\text{Cr}(\text{NO})_4$; III)

$Ni(CO)_4$

1986

Barandiaran Z.,

Seijo L., et al.

Int. J. Quantum

Chem. 1986, 29(5),

● 1047-58.

(Car. ScF_3 ; III)

теор.
расчет
на основе и

эксперим.
методов.

Ni(CO)₄

1986

105: 159142f A comparison of the bonding in chromium nitrosyl (Cr(NO)₄) and nickel carbonyl (Ni(CO)₄). Bauschlicher, Charles W., Jr.; Siegbahn, Per E. M. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 85(5), 2802-7 (Eng). The bonding in Cr(NO)₄ is very ionic, with about 1.5 electrons donated from the Cr to the NO 2π orbitals. There is a NO σ donation of about 0.5 electrons to the Cr, yielding a net charge of Cr of about 1. A large MCSCF expansion is needed to describe both the ionic and covalent contributions to the Cr 3d-NO 2π bonding. This bonding was compared to that in the isoelectronic Ni(CO)₄.

nickel carbonyl
charge



C.A. 1986, 105, N18.

$\text{Ni}(\text{CO})_4$

1986

Freedeen Donna Jean
Anderson, Russell D.H.
J. Amer. Chem. Soc.,
1986, N8, 1860-1867.

(see $\text{Co}(\text{CO})_3\text{NO}$; III)

$Ni(CO)_4$

[Om. 24131]

1986

группа-
некро-
чекер

Reutt J.E., Wang L.S.,
Lee Y.T., et al.,

Chem. Phys. Lett.,
1986, 126, N5,
399-404.

$\text{Ni}(\text{CO})_4$

1986

Roesch N., Joerg H.,
et al.

meop.
paerim. NATO ASI Ser., Ser.
© 1986, 176, 179-87.

(see. $\text{Fe}(\text{CO})_5$; iii)

Ni(CO)₄

1986

105: 178603y Spectroscopic parametrization of CNDO method for transition metals. Yakovlev, V. N.; L'vovskii, V. E.; Pavina, N. S. (Leningr. Tekhnol. Inst., Leningrad, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1986, 27(4), 173-4 (Russ). In the proposed spectroscopic

parametrization of the CNDO method, the nondiagonal matrix elements of the 1-electron part of the Hamiltonian are calcd. according to a formula in which the wt. factor preceding the π -type overlap integrals depends on the nature of interaction of atoms A and B. The parameters for the CNDO method for several elements calcd. from spectroscopic exptl. data are presented. Several org. compds. as well as Ni(0) and Pd(0) tetracarbonyls and square planar complexes of Ni(II) and Pd(II) were considered as testing systems.

meop pac -
rem

(F) Pd(CO)₄

C. A. 1986, 105, N20

$Ni(CO)_4$ Hall M.B., 1987

Williamson R.L.

Abstr. Pap., 194th ACS

Nat. Meet. (Amer. Chem.

recompus, Soc.), New Orleans, La,

paper Aug. 30-Sept. 4, 1987. -

Washington, D.C., 1987. - C.

679-680. (cc. $Cr(CO)_6$; III)

$Ni(CO)_4$

011 27822

1987

7 4 Д91. Анггармоничность и эффекты локальных мод в колебательных спектрах $Ni(CO)_4$ и $Co(CO)_3NO$. Anharmonicity and local mode effects in the vibrational spectra of $Ni(CO)_4$ and $Co(CO)_3NO$. Mills I. M. «Mol. Phys.», 1987, 61, № 3, 711—724 (англ.)

Предложенная («Mol. Phys.», 1985, 56, 743) простая модель для описания колебаний атомов в молекуле с учетом анггармоничности локального валентного колебания и связи между парой различных валентных колебаний, применена к рассмотрению колебаний связей $C=O$ и $N=O$ в молекулах $Co(CO)_3NO$ и $Ni(CO)_4$. Использовались члены взаимодействия между колебаниями по Дарлингу — Деннисону. Учитывались эксперим. данные по частотам колебаний связей $C=O$ и $N=O$ в исследуемых изотопозамещенных молекулах, содержащих ядра ^{13}C , ^{15}N и ^{18}O . Эксперим. данные для частот основного тона, обертон и составных тонов второго порядка, а также рассчитанные значения частот, констант анггармоничности и констант связей колебаний приведены в таблице. В. А. Морозов

М.П.

(7/8)

ср. 1988, 18, № 4

Ni(CO)₄

(Im. 27822)

1987

(Di)

107: 123568b: Anharmonicity and local mode effects in the vibrational spectra of nickel tetracarbonyl and tricarbonyl nitrosyl cobalt (Ni(CO)₄ and Co(CO)₃NO). Mills, I. M. (Dep. Chem., Univ. Reading, Berkshire, UK RG6 2AD). *Mol. Phys.* 1987, 61(3), 711-24 (Eng): Previously published data on the vibrational fundamentals and overtones of the carbonyl stretching modes of Ni(CO)₄ and Co(CO)₃NO are reinterpreted using a recent model including resonances and local mode effects. The harmonic wavenumber ω_D and anharmonicity const. χ_m assocd. with the carbonyl and nitrosyl stretching modes were derived, and the ¹³C and ¹⁸O isotopic shifts are discussed in relation to the harmonic and anharmonic force field.

(7) ☒

C.A. 1987, 107, N14

Ni(CO)₄ (DM 27760)

1987

Ziegler T., Tschinke V.,
et al.,

Q(Ni-CO) J. Amer. Chem. Soc.,
1987, 109, N16, 4825-
● -4837.

$Ni(CO)_x$
($x=1-4$)

1988

5 Б1051. Теоретическое изучение энергии связи Ni—CO в комплексах $Ni(CO)_x$ ($x=1-4$). The Ni—CO binding energy in $Ni(CO)_x$ ($x=1-4$). A theoretical investigation / Blomberg M. R. A., Brandemark U. B., Siegbahn P. E. M., Wennerberg J., Bauschlicher (Jr) Ch. W. // J. Amer. Chem. Soc.— 1988.— 110, № 20.— С. 6650—6655.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в расширенных базах ГФ в полном активном пространстве проведены расчеты комплексов $Ni(CO)_x$ (I), $x=1-4$ при фиксированных расстояниях C=O и Ni—C с учетом корреляции электронов методом ограниченного конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями. Вычисленные энергии связи Ni—C (в ккал/моль) равны: 30 (эксп. 29) для $x=1$; 29 (эксп. 54) для $x=2$; 36 (эксп. 13) для $x=3$ и 24 (эксп. 25) для $x=4$. Пол-

М.П.

X. 1989, N5

ная энергия связи Ni—C в тетракарбониле равна 120 ккал/моль (эксп. по разным источникам 120 или 140 ккал/моль). Сделан вывод, что хорошее согласие с экспериментом для $x=1$ и $x=4$ обусловлено учетом лигандных электронов. Зависимость энергий связи от размера базиса довольно слабая. Включение в базис d -ф-ций группы CO понижает энергию связи Ni—C на 2—5 ккал/моль. Значит, расхождение теории и эксперимента для $x=2$ и 3 объяснено ошибками эксперимента или неточностью его интерпретации. Э. Д. Герман

$Ni(CO)_4$

1989

Baeschlicher Ch. W., Jr.,
Landhoff S. R. et al.

возд.

г. вост.

До, теор.

растр

Chem. Phys. 1989,
129(3), 431-7.

(св. $Ni N_2$; III)

Ni(CO)₄

(Am 31900)

1989

110: 239444z Infrared laser absorption studies of jet-cooled nickel tetracarbonyl. Davies, Paul B.; Martin, Nicholas A.; Nunes, Michael D.; Pape, David A.; Russell, Douglas K. (Dep. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EW). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 156(6), 553-6 (Eng). The IR absorption spectrum of Ni(CO)₄ in the region of its triply degenerate C-O stretching fundamental ($5e_1$) near 2060 cm⁻¹ was recorded in a pulsed mol. beam using diode laser spectroscopy. This is the 1st rotationally resolved spectrum of the mol. to be reported. It consists of an intense Q-branch and many P- and R-branch lines showing the predicted intensity patterns for a spherical top of T_d symmetry with 4 identical zero-nuclear-spin ligands. Preliminary spectroscopic parameters are a band center at 2061.305(6) cm⁻¹ and a rotational spacing at low J of 0.0692(5) cm⁻¹, the latter including any 1st-order Coriolis effects. The rotational temps. deduced from relative line intensities are in the range 20-30 K.

UK chemps

C.A. 1989, 110, N 26

$Ni(CO)_4$

1990

Chang Guangjie,
Zi Jun.

Электрон. Хеbei Shifan Daxue
ссылка, Хеbao, Ziran Kexue-
мерии ван 1990, (1), 26-33.
гуссуз, расчит

(ссылка: $V(CO)_6$; III)

$\text{Ni}(\text{CO})_4$

Okno M., von Niessen W., ¹⁹⁹⁰

Phys. Rev. B. 1990, 42,
N 12, C. 7370-7385.

M.N.

● (all. NiCO ; III)

$\text{Ni}(\text{CO})_4$ Papai Imre, 1990
St-Amant Alain et al.

Int. J. Quantum Chem.

u.n.

Quantum Chem. Symp.

1990. N24. C: 29-39.

(Cv. ● M_2O ; III)

Ni(CO)₄

1991

13 Б1064. Теоретическое изучение электронной структуры и фотоэлектронного спектра Ni(CO)₄, Co(CO)₃NO, Fe(CO)₂NO₂, MnCO(NO)₃ и Cr(NO)₄. Theoretical study of the electronic structure and photoelectron spectra of Ni(CO)₄, Co(CO)₃NO, Fe(CO)₂(NO)₂, MnCO(NO)₃ and Cr(NO)₄ / Decleva P., Fronzoni G., De Alti G., Lisini A. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1991. — 226, № 3—4.— С. 265—284.— Англ.

Методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом конфигураций $2h-1p$ (две дырки — одна частица) рассчитаны энергии ионизации изоэлектронного ряда молекул Ni(CO)₄, Co(CO)₃NO, Fe(CO)₂(NO)₂, MnCO(NO)₃ и Cr(NO)₄. Все расчеты проведены при эксперим. геометрии молекул в базисе группир. гауссовых ф-ций $(9s5p)/[3s2p]$ для атомов 2-го периода и $(12s7p5d)/[6s3p2d]$ для атомов переходных металлов. Наряду с положениями линий фотоэлектронного спектра рассчитаны также спектральные интенсивности. Отмечено, что схема КВ $2h-1p$ обеспечивает удовлетворит. согласие с

М.П.

(44)

х. 1991, № 13

эксперим. энергиями ионизации для всех молекул, за исключением $\text{Fe}(\text{CO})_2(\text{NO})_2$. Для $\text{Fe}(\text{CO})_2(\text{NO})_2$ проведены дополнит. расчеты с использованием расширенных орбитальных и конфигурац. пространств; показана важность квазивырожденных корреляц. эффектов и возбуждений до $4h-3p$. Обсуждено отнесение фотоэлектронных спектров рассмотренных молекул с использованием данных теор. расчетов и корреляций в изоэлектронной последовательности. Предсказан не исследованный экспериментально фотоэлектронный спектр $\text{MnCO}(\text{NO})_3$. Энергии ионизации рассчитаны также методом локальной спиновой плотности, основанном на потенциале X_α ; результаты хорошо согласуются с эксперим. данными.

А. А. Сафонов





1991

Fan L., Ziegler T.,

J. Chem. Phys. 1991.

U. N. 95, N10. C. 7401-7408.

(c.w. ● MnO_4^- ; III)

$Ni(CO)_4$

[am · 36726]

1992

Sosa C., Andzelm J., Elkin B.C.
et al.,

структура,
колебан.
расстояния,
теорет.
расчет.

J. Phys. Chem - 1992, 96,
6630 - 36.

$Ni(CO)_4$

1993

Sizova O.V., Baranov-
skii V.I. et al.

meop.
pacrēm

Zh. Struk. Khim. 1993,
34(2), 20-7.

(cēr.  Ni_2 ; III)

Ni(CO)₄

[Dm. 37559]

1994.

Delley B., Lüthi H.P.,

теоретический
расчет

исследование:
компьютерная
модель

J. Chem. Phys., 1994, 100,
N 8, 5785-5791.

binding energies, molecular
structures, ● and vibrational

frequencies of transition
metal carbonyls using densi-
ty functional theory With
gradient corrections.

$Ni(CO)_4$ Ehlers A.W., Frenking G. 1995.

$\Delta_f H$, D_o ,
ссылки.
напрямик,
теор. расчет

Organometallics 1995,
14 (1), 423-6.

(ср. $\bullet Fe(CO)_5$; III)

$Ni(CO)_4$

1995

15 Б199. Теоретическое исследование спектра возбуждения и реакции фотофрагментации $Ni(CO)_4$. Theoretical study on the excitation spectrum and the photofragmentation reaction of $Ni(CO)_4$ / Hada M., Imai Y., Hidaka M., Nakatsuji H. // J. Chem. Phys. — 1995. — **103**, № 16. — С. 6993—6998. — Англ.

Методом конфигурац. вз-вия в пространстве симметрично адаптированных кластеров в расширенном базисе исследованы х-ки возбужденных состояний $Ni(CO)_4$, а также инициируемый лазером (308 нм) стадийный процесс фотофрагментации, сопровождаемый люминесценцией из возбужденного состояния (1B_1) продукта р-ции $Ni(CO)_3$.
Е. В. Борисов



Х. N15, 1996.

$Ni(CO)_4$

1995
18 B161. Новая оценка энергии диссоциации первой связи металл-карбонил в $M(CO)_4$ ($M=Ni, Pd, Pt$), $M(CO)_5$ ($M=Fe, Ru, Os$) и $M(CO)_6$ ($M=Cr, Mo, W$) квазирелятивистским методом функционала плотности. A reassessment of the first metal — carbonyl dissociation energy in $M(CO)_4$ ($M=Ni, Pd, Pt$), $M(CO)_5$ ($M=Fe, Ru, Os$), and $M(CO)_6$ ($M=Cr, Mo, W$) by a quasirelativistic density functional method / Li Jian, Schreckenbach Georg, Ziegler Tom // J. Amer. Chem. Soc. — 1995. — 117, № 1. — С. 486—494. — Англ. *M. N. & De*

M. N., De

В приближении теории функционала плотности с учетом нелокальных и квазирелятивистских поправок выполнены расчеты длин связей $M-CO$ и энергий диссоциации первой связи в бинарных карбонилах переходных металлов $M(CO)_4$ ($M=Ni, Pd, Pt$), $M(CO)_5$ ($M=Fe, Ru, Os$) и $M(CO)_6$ ($M=Cr, Mo, W$). Рассчитанные значения длин связей отличаются от эксперим. не более, чем на 0,01 Å. Рассчитанные значения энергий диссоциации пер-

(48) ☒

X. 1995, N 18

вых связей отличаются от эксперим. не более, чем на 5 ккал/моль (для Cr на 9 ккал/моль). Рассчитаны энергии ассоциации молекул CO гексакарбонильными комплексами, лежащие в интервале 35—47 ккал/моль. Показано, что замещение молекулы CO в этих комплексах может проходить как по диссоциативному, так и по ассоциативному механизму. Оценено влияние релятивистских поправок на длину и энергию диссоциации связей в комплексах. Библ. 54.

Е. А. Рыкова

Ni(CO)_4

(DM-37969)

1995

Volker Jonas, Walter Thiel,

dm. J. Chem. Phys., 1995, 102,
N21, 8474-8484

От 38479, 39048

1996

F: Ni(CO)₄

P: 3

16Б166. Повторное рассмотрение оптических спектров [электронного поглощения] Ni(CO)₄ и Cr(CO)₆ [с использованием неэмпирического метода ССП в полном активном пространстве и последующим применением теории возмущений второго порядка]. Optical spectra of Ni(CO)₄ and Cr(CO)₆ revisited / Pierloot K., Tsokos E., Vanquickenborne L. G. [Journal of Physical chemistry] // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 41. - С. 16545-16550. - Англ.

Место хранения ГПНТБ

РЖХ 1997

1996

F: Ni(CO)₄

P: 3

16B165. Об использовании простых эффективных остовных потенциалов в расчетах методом функционала плотности. I. Тестовые расчеты карбониллов переходных металлов. On the use of common effective core potentials in density functional calculations. I. Test calculations on transition-metal carbonyls / Van Wullen Christoph [International Journal of Quantum Chemistry] // Int. J. Quantum Chem. - 1996. - 58, N 2. - С. 147-152. - Англ.

Рнх 1997

$Ni(CO)_4$

1996

van Wuelen, Christoph;

Do, enykm., J. Chem. Phys. 1996,
neopem. 105 (13), 5485-93
pacem

(all. $Cr(CO)_6$; (II)

1996

F: Ni(S₂C₂H₂)₂

P: 3

9B152. Неэмпирический квантово-химический расчет электронной структуры хелатного комплекса Ni(S[2]C[2]H[2])[2] / Захаров И. И., Старцев А. Н.,

РЖХ 1997

Юданов И. В., Жидомиров Г. М. // Ж. структур. химии. - 1996. - 37, N 2. - С. 230-236. - Рус.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО на уровне МП2 в валентно-расщепленном базисе ГФ рассчитана электронная структура и равновесная геометрия плоскоквадратного комплекса $\text{Ni}(\text{S}[2]\text{C}[2]\text{H}[2])[2]$ и его дианиона. Рассчитанная величина сродства к двум электронам составляет 57 кДж/моль. Основное состояние комплекса характеризуется двухвалентным $\text{Ni}(2+)$ с электронной конфигурацией $d\{8\}$. Рассмотрена также квадратно-пирамидальная структура комплекса, переход в которую из плоскоквадратной сопровождается двухэлектронным $d-d$ -переходом. На основе рассчитанной электронной структуры комплекса и экспериментальных данных об образовании им устойчивых димерных структур сделано предположение о возможности необычной валентности $\text{Ni}(4+)$ с электронной конфигурацией $d\{6\}$.

Ni(CO)₄

1997

127: 127918b Optical spectra of Ni(CO)₄ and Cr(CO)₆ revisited. Vlcek, Antonin, Jr. (Queen Mary and Westfield College, London, UK). *Chemtracts* 1997, 10(5), 401-406 (Eng), Springer. The title research of K. Pierloot, E. Tsokos and L.G. Vanquickenborne, *J. Phys. Chem.*, 100, 16545 (1996) is reviewed with commentary and 12 refs.

(cncmp):

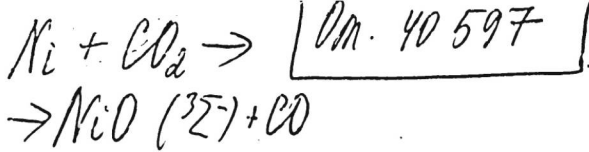
(H)  Cr(CO)₆ 

C. A. 1997, 127, N.9

$Ni(CO)_4$ 1999
Jonas, Volker; et al.,

calc. none, g. phys. Chem. A1999,
meo rem. fac 103(10), 1381-1393.
rem

(calc. $Cr(CO)_6$; ##)



2000

meop.
pavet

Alexander M. Mebel[†]
and Der-Yan Hwang[†],

J. Phys. Chem. 2000,

A104,^{N43} 11622 - 11627.

Theoretical
the Reaction

Study on
Mechanism of

Nickel Atoms With Carbon
Dioxide.