

$H_2 H_4$

Al_2H_4

1975

Broken Odd.

Несущий. J. Organometal Chem.
расчет 1975, 92, N2, 147-156 (anal)
молекул.
(as H_3AlOH_2 ; III)

Al_2Mg

1981

Закняевский В. Т. и др.

Плез. докл. 14 то Всес. Чу-
завского совещ. по систем.
комплексу. соедин. 1981, 4.2.
Иваново, 1981, 651-652.

кв. мех.
растий;
поверхност.
стабильн.

(см. B_2Mg ; III)

Al_2H_4

[Оммуе 14606]

1982

геометр.
теорет.
расчет.

Лакзхевзкii V.G., Char-
kin O.P.,

Chem. Phys. Lett., 1982,
90, №2, 117-121.

Al_2H_4

1982

Закжеевский В. Т.,
Чаркин О. П.

номер,
структура,
изомеризм.

Координат. химия,
1982, 8, № 6, 759-766.

●
(см. B_2H_4 ; III)

Al_2H_4

Baird N. C.,

1985

рацем
геомер.,
емпиркт.,
 ΔH ;

Can. J. Chem., 1985,
63, 11, 71-76

( Si_2H_2 ; III)

Al_2H_4

1989

23 Б1053. Удивительные структуры диалана Al_2H_4 . Remarkable structures of dialane (4), Al_2H_4 / Lammertsma K., Güner O. F., Drewes R. Michelle, Reed Alan E., von Rague Schleyer Paul // Inorg. Chem.—1989.— 28, № 2.— С. 313—317.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисного набора 6-31 ГФ* и учетом энергии нулевых колебаний изучена Пв потенциальной энергии диалана Al_2H_4 (I). Энергии стационарных точек уточнены расчетами с учетом энергии электронной корреляции по теории возмущения Мёллера—Плессета 4-го порядка в базисе 6-31 ГФ**. На гиперповерхности потенциальной энергии I обнаружено 5 локальных минимумов и 3 переходных структуры. Наиболее стабильный изомер симметрии C_{3v} , представляющий собой солеобразный комплекс, в к-ром Al^+ координируется по оси третьего порядка к аниону AlH_4^- , всего на 1,0 ккал/моль стабильнее C_{2v} комплекса, в к-ром Al^+

М.А.

Х. 1989, № 23

присоединяется по оси второго порядка к AlH_4^- . Структура с симметрией D_{2d} всего на 10,7 ккал/моль менее стабильна, чем C_{3v} комплекс и барьер вращения вокруг связи. $\text{Al}-\text{Al}$ в ней найден равным 1,8 ккал/моль. Изомер состава H_3AlAlH еще на 11,3 ккал/моль менее стабилен. Результаты расчета сопоставлены с данными для B_2H_4 . Отмечается, что наиболее высоколежащая по энергии структура с двумя водородными мостиками, отвечающая в случае I переходному состоянию, на Пв потенциальной энергии B_2H_4 отвечает локальному минимуму с энергией, примерно одинаковой D_{2d} изомеру. И. Н. Сенченя

Al_2H_4

1989

/ 110: 63996q Remarkable structures of dialane(4), Al_2H_4 . Lammertsma, Koop; Guener, Osman F.; Drewes, R. Michelle; Reed, Alan E.; Schleyer, Paul v. R. (Dep. Chem., Univ. Alabama, Birmingham, AL 35294 USA). *Inorg. Chem.* 1989, 28(2), 313-17 (Eng). The potential energy surface of dialane(4), Al_2H_4 , has been studied by ab initio MO theory at the MP4(SDTQ)/6-31G**//HF/6-31G* + ZPE level. Five min. (1, 2, 5, 7, and 8) and three transition structures (3, 6, and 9) were detd. at the HF/6-31G* level. The most stable isomers are salt-like structures: i.e., 1 (C_{3v}), being the face complex of Al^+ with tetrahedral AlH_4^- , and the 1.0 kcal/mol less stable 2 (C_{2v}), where Al^+ complexes to an AlH_4^- edge. Structure 5 (D_{2d}) is 10.7 kcal/mol less stable than 1, with a barrier for Al-Al bond rotation of only 1.8 kcal/mol (6), and has an energy difference with 7 (H_3AlAlH) of 11.3 kcal/mol; the μ -hydrido structure 8 is of intermediate energy. The doubly hydrogen bridged isomer 9 is the energetically least favored (transition) structure, in strong contrast to the case for B_2H_4 , where it represents a min. with nearly the same energy as the D_{2d} isomer.

моном.
димер,
структура
и терм,
Vо

C.A. 1989, 110, N 8