

$\text{ScH}_3$

SCH<sub>3</sub>

1976

Durand Ph., et al.

(reueip.  
cér. no 61)

Localiz. and Delocal.  
Quant. Chem. Vol. 2.  
D.-B., 1976, 91-124.

1 (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O, III)

1978

ScH<sub>3</sub>

6 Д229. Неэмпирические псевдопотенциалы для расчетов молекул. III. Применение к соединениям переходных металлов. Setafini A., Bartelat J. C., Durand Ph. Non-empirical pseudo-potentials for molecular calculations. III. Applications to transition metal compounds. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 5, 11341—1357 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода ССП МО ЛКАО с использованием псевдопотенциалов в тех же приближениях, что и ранее (ч. II см. Teichteil C. et al., «Molec. Phys.», 1977, 33, 181) исследовано электронное строение ScH<sub>3</sub> (I), TiH<sub>3</sub>F (II), MnO<sub>4</sub><sup>-</sup> (III), Zn(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (IV) и Pd(CO)<sub>4</sub> (V). Использованы минимальный и двухэкспонентный базисы слэтеровских ф-ций, представленные сгруппированными гауссовскими ф-циями. Приведены потенциалы ионизации (ПИ), электростатич. потенциалы на ядрах, квадрупольные и третий моменты, диамагн. компоненты магн. восприимчивости и ядерно-

(74)

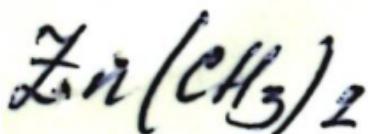
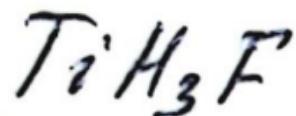
☒

Ф.1979.№6

го магн. экранирования, карты электронной плотности. Полученные результаты сопоставлены с данными полных неэмпир. расчетов. Для I и II использован двухпараметрический, а для III—V — также трехпараметрический псевдопотенциал. Обнаружено, что ПИ (по теореме Купманса) передаются с почти такой же точностью, что и в неэмпирич. расчетах с таким же базисом. Хорошее согласие наблюдается и для одноэлектронных характеристик. Сделан вывод о применимости псевдопотенциалов для расчета соединений переходных элементов.

В. Л. Лебедев

1978



(+4)  $\otimes$



C.A. 1979, 91N4

*ScH<sub>3</sub>*

1987

Мусаев А. Г.

Херсон 2000 год. Улица.

д.н. собес., Дельмаре, 17-18

МОСС., 1987. Тез. конф. Биол.

8. 2., 54.

(см.  RA; III)

Sch3

[om. 31283]

1989

геометр,  
Энергия,  
Назарий.  
расчет

Мусаев А.Г., Чаркин О.Г.,

Координаты. Химии,

1989, 15, №2, 161-169.

2000

F: ScH<sub>3</sub>

P: 3

132:143740 Ab Initio Study of Molecular and  
Electronic Structures of Early Transition Metal  
Trihydrides MH<sub>3</sub> (M = Sc, Ti, V, Fe). Balabanov,  
Nikolai Boggs, James E. Institute for  
Theoretical Chemistry Department of Chemist and  
Biochemistry, The University of Texas at Austin

Austin, TX 78712, USA J. Phys. Chem. A,  
104(7), 1597-1601 (English) 2000 Ab initio  
calcns. with accounting for electronic correlation  
were carried out for ScH<sub>3</sub>, VH<sub>3</sub>, TiH<sub>3</sub>, and FeH<sub>3</sub>.  
Relative energies of excited states of the mols.  
were evaluated by the equation-of-motion coupled

C-A 2000, 132

clus method in the single and double approxn. (EOM-CCSD) and ground-state properties were calcd. at coupled cluster singles doubles level augmented perturbative correction for connected triple excitation (CCSD(T)). The ground electronic states of the mols. have high-spin and planar ( $D_{3h}$ ) equ geometries. The mols.  $TiH_3$  and  $VH_3$  possess low-lying degenerate electron states. However, the Jahn-Teller distortion of these states was studied a is small. Correlation corrections to equil. internuclear distances, harm vibrational frequencies, and IR intensities are significant. A compariso theor. and available exptl. data on the mols. was performed.

SchM3 [OM: 41560] 2002

Kiefling Wang, George  
V. Chertikhin et al.,

M.N.

J. Phys. Chem. A 2002,  
106, 9213 - 9225.