

ScH₃

ScH₃

1976

Durand Ph. et al.

(transp.
cū. nōc.)

Localiz. and Delocal.

Quart. Chem. Vol. 2.

O-B, 1976, 91-124.

1 ● (cū. H₂O; III)

ScH_3

Кв. сек.
рассет

(+4) ☒

Ф.1979, №6

1978

6 Д229. Неэмпирические псевдопотенциалы для расчетов молекул. III. Применение к соединениям переходных металлов. Serafini A., Barthelat J. C., Durand Ph. Non-empirical pseudo-potentials for molecular calculations. III. Applications to transition metal compounds. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 5, 1341—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_3 (I), TiH_3F (II), MnO_4^- (III), $\text{Zn}(\text{CH}_3)_2$ (IV) и $\text{Pd}(\text{CO})_4$ (V). Использованы минимальный и двухэкспонентный базисы слэтеровских ф-ций, представленные сгруппированными гауссовскими ф-циями. Приведены потенциалы ионизации (ПИ), электростатич. потенциалы на ядрах, квадрупольные и третьи моменты, диамагн. компоненты магн. восприимчивости и ядерно-

го магн. экранирования, карты электронной плотности. Полученные результаты сопоставлены с данными полных неэмпирич. 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

 ScH_3 TiH_3F MnO_4 $\text{Zn}(\text{CH}_3)_2$ $\text{Pd}(\text{CO})_4$ (rev. corr. factor)

91: 27662h Nonempirical pseudopotentials for molecular calculations. III. Applications to transition metal compounds. Serafini, A.; Barthelat, J. C.; Durand, P. (Lab. Chim. Coord., Toulouse, Fr.). *Mol. Phys.* 1978, 36(5), 1341-57 (Eng). The nonempirical pseudopotential method (B., et al., 1977) was applied to the mols. ScH_3 , TiH_3F , MnO_4^- , ZnMe_2 , and $\text{Pd}(\text{CO})_4$. The ground-state valence electronic properties were calcd. at the independent particle restricted Hartree-Fock level with minimal and double-zeta basis sets of Slater orbitals expanded in Gaussian functions. The valence MO energies and the expectation values of various 1-electron operators agreed with those detd. from all-electron calcs.

(+4) ☒

C.A. 1979, 91, N4

ScH₃

1987

Мусаев Д. Г.

Хенная изобретов. Ч. Все.
и. н. совещ., Душанбе, 17-18
нояб., 1987. Тез. докл. Б. м.
б. 2., 54. (Сев. ● КН; III)

СМЗ

от. 31283

1989

геометр.,
энергич.,
неэлектрич.
расчет

Мусаев Д.Т., Чаркин О.П.,

Координат. измерения,
1989, 15, №2, 161-169.



2000

F: ScH3

P: 3

132:143740 Ab Initio Study of Molecular and
Electronic Structures of Early Transition Metal
Trihydrides MH₃ (M = Sc, Ti, V, Fe). Balabanov,
Nikolai Boggs, James E. Institute for
Theoretical Chemistry Department of Chemistry and
Biochemistry, The University of Texas at Austin
Austin, TX 78712, USA J. Phys. Chem. A,
104(7), 1597-1601 (English) 2000 Ab initio
calculations with accounting for electronic correlation
were carried out for ScH₃, VH₃, TiH₃, and FeH₃.
Relative energies of excited states of the molecules.
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.

ScH₃

[cm. 41560]

2002

Xuefeng Wang, George
V. Chertihin et al.,

M.N.

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