

Sc-B

1968

ScBO_3
(кристалл.)

Brüesch P.

Helv. phys. acta, 41, N 4, 406

V_i

Колебания решетки
кристаллов со струк-
турой иона цинково-
го цинка

(см. CaCO_3) III

ThB, ThP, Th₂ (Do, HP) 3 1969
SeB, ZrB (Do) 7

Gingerich K.A.

VO 4141

High Temperature. Sci., 1969, 1, 152, 258-267 (am)

Gaseous metal borides. I. On the disso-
ciation energy of the molecules ThB,
ThP, and Th₂, and predicted dissociation
energies of selected diatomic transition-
metal borides.

Pittman, 1970

B Elloy

VO

M, 10

CP

UB, CeB, UB₂, ScB₂, 8 1970
YB₂, LaB₂, CeB₂, PrB₂, NdB₂,
GdB₂, ThB₂ (Do) VIII 3776

Gingerich K.R.

J. Chem. Phys., 1970, 53, 112, 746-748 (abbr.)

Gaseous metal borides. II. Mass-spectrometric
evidence for the molecules UB₂, UB, and CeB
and predicted stability of gaseous diborides
of electropositive transition metals

PMH Kuch, 1971
25552

HO (C) 8

Sc BO₃

1981

7 Б225. Колебательные спектры и строение ортоборатов скандия, иттрия, лантана и редкоземельных элементов. Ильин Ю. Н., Кравченко В. В., Петров К. И. «Химия кислород. соедин. бора. 5-е Всес. совещ. Тез. докл.» Рига, 1981, 64—65

Методами колебательной спектроскопии исследованы кристаллич. структуры ортоборатов Sc, Y, La и PЗЭ состава MBO₃. Выполнено отнесение колебательных частот. Показано, что ортобораты кристаллизуются в 3 структурных типах: кальцита (ScBO₃), арагонита (LaBO₃, NdBO₃) и «ватерита» (ортобораты остальных PЗЭ). Положения частот вал. кол. бор-кислородных группировок отражают различия в координац. числах бора. Отличительной чертой кристаллич. структур ортоборатов «ватеритного» типа является наличие группировок B₃O₉ (симметрия D_{3h}). Выполнен анализ нормальных колебаний аниона B₃O₉, смоделированы эффекты крист. поля при учете симметрии положения (C_{3h}) B₃O₉ в элементарной ячейке. Сделаны выводы о прочности хим. связей в ортоборатах. Г. К.

Vi;

1A

(+3)

YBO₃, LaBO₃
Ln'BO₃

X. 1982, 19, N 7

ScB₂

1983

6 Б1018. Электронное строение диборидов металлов первого переходного периода. The electronic structure of the first-row transition metal diborides. Armstrong David R. «Theor. chim. acta», 1983, 64, № 2, 137—152 (англ.)

В рамках метода МО ЛКАО в зонном и кластерном приближениях рассчитано электронное строение диборидов ScB₂, TiB₂, VB₂, CrB₂ и MnB₂. В квазимолек. кластерном приближении рассмотрена расширенная ячейка из 54 атомов и учтено взаимодействие кластера с ближайшими соседями в кристалле (всего 274 атома). На основе расчетов зонной структуры построены плотности валентных состояний, комбинированные плотности состояний, определены плотности состояний на уровне Ферми, с использованием к-рых вычислены удельная теплоемкость, молярная магнитная восприимчивость, сопротивление и проводимость рассмотренных соедине-

геометрия,
структура

(74)

IX

х. 1984, 19, № 6

ний. Рассчитанные энергии уровня Ферми составили —5,6, —5,7, —6,3, —7,1 и —7,8 эВ для ScB_2 , TiB_2 , VB_2 , CrB_2 и MnB_2 , соотв. Показано, что зоны вблизи уровня Ферми сформированы, в основном, локализованными $3d$ -орбиталями атомов металла. В результате интегрирования плотности состояний определены заряды атомов металлов, составившие +2,28, —1,99, +1,85, +1,52 и +1,08 для Sc, Ti, V, Cr и Mn, соотв. Анализ хим. связи в зонном и кластерном приближениях показал, что в соединениях MB_2 хим. связь характеризуется сильными взаимодействиями В—В и М—В с добавлением ионной составляющей связи, обусловленной поляризованным распределением заряда.

И. А. Тополь

ScH_2BHy

1986

Мусаев Д. Т.

М. п. Кимет. и мех. при-
жизн. процессов. Термо-
динамика, 1986, 32.

(Сер. KBHy; III)

H_2ScBH_4

1987

6 Б1061. Теоретическое изучение структуры и стабильности борогидридов типа MBH_4 ($M=ScH_2$, TiH_3 , Cu и ZnH). Мусаев Д. Г. «Химия гидридов. 4 Всес. совещ., Душанбе, 17—18 нояб., 1987. Тез. докл.» Б. м. б. г. 47

Неэмпирическим методом ССП изучены структуры и относит. энергетич. х-ки различных конфигураций борогидридов H_2ScBH_4 , H_3TiBH_4 , $CuBH_4$ и $HZnBH_4$. Все рассмотренные борогидриды стабильны к распадам $MBH_4 \rightarrow MH + BH_3$ и $MBH_4 \rightarrow M^+ + BH_4^-$. Энергии отрыва молекулы BH_3 и иона BH_4^- у борогидридов $ScBH_4$, $TiBH_4$, $CuBH_4$ и $ZnBH_4$ составляют 56, 59, 35, 20 ккал и 189, 192, 161, 191 ккал, соответственно. Из резюме

М.П.

(+3) 



Х. 1988, 19, N 6

H₃ ScBHy

1987

Мусаев Д.Т.,
Чаркын О.П.

м.п. Физ. и матем. методы в
координат. химии. Тез.
докл. 9 Всес. совещ. Т. 1.
Новосибирск, 1987, 110.

(см. KBHy; III)

Sc BTH6

1988

Муссаев Д.П., Стобик А.С.
Чаркин О.П. и др.,

стр-ла,
статистик,
теор.
расчет

Корголенцев. Хленица. —
1988, 14, стр. 5,
638-647

ScBH₂
ScBH₂⁺

1996

124: 271015k Structure, Stability, and Bonding of Transition-Metal-Boryl Complexes. A Molecular Orbital Study. Musaev, Djamaladdin G.; Morokuma, Keiji (Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation, Emory University, Atlanta, GA 30322 USA). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(16), 6509-17 (Eng). By using CAS-SCF, MRSD-CI + DC, and various d.-functional theory (DFT) methods, we have studied the electronic and geometrical structures of MBH₂, MBH₂⁺ (where M = Sc, Co, Rh, and Ir), and RhB(OH)₂, and RhB(OH)₂⁺ complexes. The ground states of CoBH₂⁺ and IrBH₂⁺ are nearly degenerate quartet states derived from the ⁶F(s¹d⁷) state of M⁺ and the ²A₁ state of BH₂, while the ground states of RhBH₂⁺ are doublet states which are results of the interaction of Rh⁺ ³F(s⁰d⁸) with BH₂(²A₁). The ground states of ScBH₂⁺ are doublet states from Sc⁺ ³D(s¹d¹) and BH₂(²A₁). For neutral species MBH₂, where M = Co, Rh, and Ir, the triplet states are always the ground states, while for ScBH₂, the ¹A₁, ³A₁, and ³A₂ states are clustered within a 0.5 kcal/mol energy range. The MRSD-CI + DC binding energies (BEs) are 49.3, 52.8, 64.3, and 87.5 and 37.8, 51.0, 74.1, and 84.5 kcal/mol for ScBH₂⁺, CoBH₂⁺, RhBH₂⁺, and IrBH₂⁺ and ScBH₂, CoBH₂, RhBH₂, and IrBH₂, resp. M⁺-BH₂ bonds are stronger than M-BH₂

компьютер,
теперь все
непр. паку

(+3)

1) VobH₂

C. A. 1996, 124, 20

bonds for $M = \text{Sc}, \text{Co},$ and Ir , while the Rh^+-BH_2 bond is weaker than $\text{Rh}-\text{BH}_2$. The BE of the metal-boryl bonds increases in the order $\text{Co} < \text{Rh} < \text{Ir}$ and $\text{Co}^+ < \text{Rh}^+ < \text{Ir}^+$. The $M-\text{B}$ bond is stronger than the $M-\text{H}$ and $M-\text{CH}_3$ bonds for the late metals $\text{Co}, \text{Rh},$ and Ir , while for the early metal Sc/Sc^+ , the $M-\text{B}$ bond is weaker than the $M-\text{H}$ and $M-\text{CH}_3$ bonds. These results can be explained in terms of the importance of π -interaction between metal occupied d_x orbitals and the BR_2 empty p_π orbital. MRSD-CI + DC BEs calcd. at the DFT-optimized geometries are larger than those obtained at the CAS-SCF-optimized geometries, indicating that the DFT geometries are more reliable than the CAS-SCF geometries.

Sc B⁺

130: 130159x On the electronic structure of ScB^+ : ground and low-lying excited states. Kalemios, Apostolos; Mavridis, Aristides (Department of Chemistry, Laboratory of Physical Chemistry, National and Kapodistrian University, Athens, Greece 157 10). *Adv. Quantum Chem.* 1998, 32, 69-91 (Eng), Academic Press. The electronic structure of the ScB^+ cation has been studied using MR-CI (CAS-SCF + single + double replacements) techniques and large basis sets, (21s16p9d6f/10s5p2d1f) generalized contracted to [7s6p4d3f/4s3p2d1f]. From the manifold of mol. states emanating from the $^3\text{D}_g$, $^1\text{D}_g$, $^3\text{F}_g$ at. states of Sc^+ and the ground $^2\text{P}_u$ state of the B atom, we have analyzed a series of eight low-lying excited states of symmetries $^4\Sigma^-$, $^2\Sigma^+(2)$, $^2\Sigma^-$, $^2\Pi(2)$, and $^2\Delta(2)$, spanning an energy range of about 1 eV. For all states full potential energy curves have been constructed and spectroscopic consts. have been extd. via a std. Dunham anal. The ground $\text{X}^4\Sigma^-$ state of ScB^+ traces its ancestry to the $\text{Sc}^+(^3\text{D}_g; M = +1) + \text{B}(^2\text{P}_u; M = 1)$ atonic fragments, with a binding energy of 44.9 kcal/mol at $R_e = 2.160 \text{ \AA}$. The binding mode of the $\text{X}^4\Sigma^-$ state can be considered as the result of three half bonds, a σ and two π bonds. (c) 1998 Academic Press.

C.A. 1999, 130, N 10

1999

F: Sc[BO] +

P: 3

132:40764 Electronic and Geometrical Structure
of the Sc[BO] + Cation. An Initio Investigation.

Papakondylis, Aristotle; Mavridis, Aristides
Laboratory of Physical Chemistry Department
of Chemistry, National and Kapodistrian University
of Athens Zografou 157 10, Greece J.

Phys. Chem. A, 103(46), 9359-9363 (English) 1999
The Sc[BO] + mol. cation was investigated theor. by
multireference CI methods detg. the potential
energy surfaces of all states that correlate

C. A. Loom, 132

ground-state $\text{Sc}+(3D) + \text{BO}(X2.\text{SIGMA}.+)$ fragments. Three kinds of min. wer discovered corresponding to the linear $\text{Sc-BO}+$ and $\text{BOSc}+$ and to the bent B configurations, with the bent structure being the global min. for all sta Full potential energy curves are reported for all symmetries examd., i.e. $2A'(3)$, $2A''(2)$ for the bent and $2.\text{DELTA.}$, $2.\text{PI.}$, $2.\text{SIGMA.}+$, $4.\text{DELTA.}$, $4.$ and $4.\text{SIGMA.}+$ for the linear geometries. The ground state is of $2A''$ sym with a BO-Sc binding energy $D_e = 63.9$ kcal/mol at an equil. geometry with and BO-Sc bond lengths of 1.260 and 2.046 A, resp., and a BOSc angle of $90.7.\text{degree.}$.