

Sc - Cl

monomeric
superoxide anion (Vi) 73, 14, 15, 16 & 1969
VII 4903

Smardzewski R. R.,

Diss. Abstr. Int., 1969, B30, № 2597

(chem.)
Infrared spectra and vibration-
nal analyses of some dimeric
transition metal pentahalide-
des.

10 (B) 5
(chem. opinion) CI 1970, 72, № 26, 13802/a

Sc_2Cl_6

Sc_3Cl_9

A. P.

Wagner Klaus.

1977

"Z. anorg. und allg. Chem."

1977, 430, N3, 43-50

(chem. phys. anorg.)

(mit Sc_2Cl_6 ; I)

Scilb² summer 6770 1978

Elumalai K., et al.

Kofunat.

not

Czech. J. Phys., 1978,
1328, 761-72.

Cl_2ScH

1987

5 Б1043. Внедрение монооксида углерода в связь Sc—H в Cl_2ScH . Insertion of carbon monoxide into the Sc—H bond of Cl_2ScH . Rappé A. K. «J. Amer. Chem. Soc.», 1987, 109, № 19, 5605—5613 (англ.)

Неэмпирическим обобщенным методом валентных связей с учетом конфигурац. взаимодействия с использованием псевдопотенциала для учета остовных электронов рассчитана модельная р-ция внедрения CO в связь Sc—H в Cl_2ScH . Обнаружено, что внедрение CO в σ -связь Sc—H в Cl_2ScH происходит с малой энергией активации ($\Delta E = 23,7$ ккал/моль по отношению к аддукту льюисова к-та — льюисово основание (АКО). Полная р-ция является умеренно экзотермич. ($\Delta E = -6,1$ ккал/моль по отношению к АКО). Эффекты электронной корреляции и учет поляризац. ф-ций в базисе влияют на энергетич. параметры р-ции, но несущественно изменяют геометрич. положение седловой точки.

И. А. Тополь

Cl_2ScH

Sc—H

X. 1988, 19, N5