

γ
Zn-M

Zn^{+}

1977

Rosenstock H. M. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. n1, p 1-542

T. G.
cbba



ZnH_x

- 1981
⑤ 15 Б905. О характере термического разложения гидрида цинка. Брейцис В. Б., Тилтиньш М. Б., Упенице Н. А., Лунев Ю. Н. «LatvPSR Zinātņu Akad. vestis. Ķīm. ser.», Изв АН ЛатвССР. Сер. хим.», 1981, № 1, 40—44

Методом дифференциального термоволюмометрич. анализа установлен экзотермич. характер термич. разл. ряда препаратов гидрида цинка с небольшим содержанием диэтилового эфира, синтезированных взаимодействием тетрагидроалюмината лития и диметилового цинка в р-ре диэтилового эфира. Резюме

термич.
разложени.

х. 1981-11/15

$\Sigma H^+(2)$

[Am. 19557]

1984

Bartmess J.E., Kester J.B.

Inorg. Chem., 1984, 23,
N13, 1877-1880.

of H;

ZnH_2

1985

4 БЗ099. Термическое разложение гидрида цинка. Михайлов Ю. И., Мальцева Н. Н., Кедрова Н. С., Кузнецов Н. Т. «9 Всес. совещ. по терм. анал., Ужгород, сент., 1985. Тез. докл.» Киев, 1985, 196

Гидрид цинка постепенно разлагается уже при комн. т-ре, кривая ДТА характеризуется двумя эндотермич. эффектами: при $80^\circ C$, сопровождающимся газовыделением и связанным с разложением, и при $419^\circ C$, относящимся к плавлению Zn . Исследована кинетика газовыделения из образца в среде аргона. Показано, что вслед за участком начального газовыделения с убывающей скоростью наблюдается период индукции и обл. нарастания скорости, что указывает на протекание типичной топохим. р-ции. С ростом т-ры период индукции сокращается и исчезает при $90-95^\circ C$. Отмечено ускорение термич. разл. образца ZnH_2 после предварительного УФ-облучения. По резюме

термическое
разложение

х. 1986, 19, N 4

Гидридные
соединения Zn

1986

20 В12. Синтез и свойства гидридных соединений
цинка. Кедрова Н. С., Мальцева Н. Н., Кузне-
цов Н. Т. «Химия и технол. редк., цв. мет. и солей.
Всес. конф. Тез. докл.» Фрунзе, 1986, 159—160

систе и
св-ва

Х. 1986, 19, N 20

ZrH₂

1990

УЗ Б1147. Поверхность потенциальной энергии для реакции внедрения Zr в молекулу H₂. Potential energy surfaces for insertion of Zr into H₂ / Wang J. Z., Das K. K., Balasubramanian K. // Mol. Phys.— 1990.— 69, № 1.— С. 147—159.— Англ.

Методом конфигурац. вз-вия с несколькими исходными конфигурациями с использованием волновых ф-ций метода ССП в полном активном пространстве орбиталей рассчитаны ПВ потенциальной энергии 12 электронных состояний ZrH₂ (I). Остовные электроны Zr описаны с помощью — релятивистского эффективного остовного ПТ. Использован валентный базис ГФ типа (4s4p4d1f), для H использован базис (5s/3s), дополненный поляризац. ф-циями p-типа. Найдено, что внедрение атома Zr в основном ³F состоянии в молекулу H₂ требует преодоления барьера в 11 ккал/моль, тогда как внедрение атома Zr в возбужденном состоянии ¹D происходит без активац. барьера. В основном состоя-

М.П.

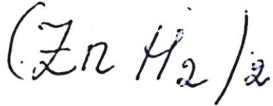
X. 1991, № 3

нии симметрии 1A_1 молекула I имеет угловую равновесную структуру с длиной связи 1,806 Å и углом 123°. Выше расположены два почти вырожденных состояния 3B_1 и 3A_1 также с угловой геометрией. Для большинства электронных состояний минимумы, соответствующие линейной конформации I, расположены выше по энергии, чем минимумы, соответствующие угловой конформации. Рассчитанные дипольные моменты I свидетельствуют, что связи Zr—H в этой молекуле имеют ионный характер с полярностью $Zr^+—H^-$. Согласно анализу заселенностей по Малликену имеется значит. $4d5s5p$ -гибридизация на атоме Zr.

Н. В. Харчевникова



1994



Kaupp Martin,
von Schnerzing Hans
Georg.

$(AsH, Tb,$
 $Tm, neop.$
 $parvum)$

Inorg. Chem. 1994, 33
(21), 4718-22.

