

CH3

LiH_2 ; BeH_2 , BH_2 , (растет геом. сир.) 1978
 CH_2 , NH_2 , H_2O , FH_2 , HeH_2 , SiH_2 , PH_2 , SH_2 , BX-1784
 N_2H_2 , NaH_2 , MgH_2 , CeH_2 , ArH_2
Takahata Y.

Chem. Phys. Lett., 1978, 59, n 3, 472-474 (англ.)

The effects of the $1b_1$ molecular orbital on the geometry of AH_2 systems.

PNEXLUS., 1979, 8528

10

9 pages

ClH_3

[ammuck 10606] 1980

Gliderwell C.

мор. ном.
ем. ное.
J. Mol. Struct., 1980,
67, 121-32.



ем. FH_3 - III

ClH₃

1984

(101:79096w Ab initio study of the structure, stability and pseudorotation of the chlorine trihydride (ClH₃) molecule. Pershin, V. I.; Boldyrev, A. I.; Kostin, V. I. (Inst. Khim., Vladivostok, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1984, 29(7), 1644-9 (Russ). The equil. geometry and vibration frequencies of ClH₃ were calcd. by the Hartree-Fock-Roothaan method by using double-zeta Huzinaga-Dunning basis set with polarization. The potential surface for pseudorotation of ClH₃ and its assocd. potential barrier were also studied.

Vi, смружм
нарам,
помеху. нолерхн,
мюр. расрим
С.А. 1984, 101, N 10

СН₃

1984

21 Б1016. Ab initio исследование структуры, стабильности и псевдовращения молекулы CH_3 . Першин В. Л., Болдырева А. И., Костин В. И. «Ж. неорганической химии», 1984, 29, № 7, 1644—1649

Методом Хартри—Фока рассчитаны равновесная геометрия и частоты нормальных колебаний молекулы CH_3 . Использован двухэкспонентный базис гауссовых функций Хузинаги—Даннинга, дополненный поляризац. $3d$ -функциями на атоме С и $2p$ функциями на атомах Н. Геометрия оптимизировалась для четырех альтернативных конфигураций, имеющих симметрию C_{2v} (T -образная и Y -образная конфигурация), D_{3h} и C_{3v} . Низшую энергию имеет T -образная конфигурация; конфигурация симметрии D_{3h} лежит на 53 ккал/моль выше основной, так что молекула безбарьерно распадается на $\text{HCl} + \text{H}_2$. Рассмотрен характер изменения МО при переходе от T -образной конфигурации к конфигурации симметрии D_{3h} . Обсужден путь р-ции аксиально-экваториального обмена (псевдовращения), рассчитана потенциальная кривая перегруппировки; для барьера получена оценка 53 ккал/моль.

А. А. Сафонов

расчет М.П.,
Д.И., структ.

Х. 1984, 19, № 21

СН₃

1984

11 Д59. АВ INITIO исследование структуры, стабильности и псевдовращения молекулы СН_3 . Першин В. Л., Болдырев А. И., Костин В. И. «Ж. неорганич. химии», 1984, 29, № 7, 1644—1649

Методом Хартри—Фока—Рутана с использованием ДЭХД+П базиса Хузинаги—Даннинга рассчитаны равновесная геометрия и частоты норм. колебаний молекулы СН_3 . Исследована потенц. поверхность псевдовращения СН_3 , и оценен потенц. барьер на пути аксиально-экваториального обмена. Резюме

стр., стабильн.
ав initio
расчет

ср. 1984, 18, n 11

H_3Cl

1986

Graver Georges,
Burger Hans.

пост.
центро-
бен.
искажен.

J. Mol. Spectrosc. 1986,
115(2), 393-418.

(см. SiH_3Cl ; III)

H_2-HCl

1989

· 24 Б1596. Инфракрасные спектры слабых комплексов H_2 , O_2 и N_2 с HCl в твердом неоне. Infrared spectra of the weak H_2 , O_2 , and N_2 complexes with HCl in solid neon / Bohn R. B., Hunt R. D., Andrews L. // J. Phys. Chem.— 1989.— 93.— С. 3979—3983.— Англ.

Методом ИК-спектроскопии идентифицированы комплексы X_2-HCl ($X=H, O, N$) образующиеся в матрице ~~из неона~~. Положение полос (в cm^{-1}) вал. кол. водород — хлор в комплексах: H_2-HCl — 2879,4; N_2-HCl — 2871,4; O_2-HCl — 2881,9 (наиболее прочный комплекс). Предполагается, что комплексы H_2-HCl и N_2-HCl имеют сходную структуру аналогичную структуре комплексов X_2-HF (J. Chem. Phys.— 1987.— 86.— С. 3781). В комплексе O_2-HCl , судя по малому возмущению частоты вал. кол. $\nu_s(HCl)$ (сдвиг в низкочастотную сторону на $1,8 cm^{-1}$ относительно Q -ветви полосы HCl в тв. Ne), связь осуществляется не через атом водорода. При более высоких содержаниях HCl в спектрах идентифицированы полосы комплексов $X_2-(HCl)_2$, а при повышении содержания кислорода — комплексов $(O_2)_2-HCl$. В. М. Ковба

И.И.

1242
X. 1989, N 24

O_2-HCl , N_2-HCl

H_3Cl^{2+}

1992

H_4Cl^{3+}

Boldyrev A.I.,
Simons J.

J. Chem. Phys. 1992. 97,

N6. C. 4272-4281.

и. н.

( H_4O^{2+} ; III)



1992

Ischtwan Josef,
Smith B. J. et al.норменц.
поверх.,
ab initio
расчетJ. Chem. Phys. 1992,
97(2), 1191-210.(см. ● $[\text{HeH}_2]^+$; III)