

6a-8

Ga SO₂

1993

120: 283312k IR-spectra of the gallium-sulfur dioxide system isolated in argon matrixes. Chertikhin, G. V.; Zaitsevskii, A. V.; Serebrennikov, L. V. (Khim. Fak., Mosk. Gos. Univ., Moscow, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 1993, 67(8), 1642-4 (Russ). The IR spectra were studied of the reaction products of Ga + SO₂ in an Ar matrix. The principal product of the reaction is GaSO₂ existing in at least 3 isomeric forms: the bands 1034 and 940 cm⁻¹ belong to the 1st isomer (a cyclic structure with a Ga-O bind), bands 1254/1227 and 1130/1110 cm⁻¹ belong to the 2nd isomer (acyclic structure), and bands 1084/1067 cm⁻¹ belong to the 3rd isomer (probably having an ionic structure).

uk chertikhin
matryukhin,
Di, chertikhin

C. A. 1994, 120, N 22

GaSO_2

1993

4 Б1188. ИК-спектры системы $\text{Ga} + \text{SO}_2$, изолированной в аргоновых матрицах /Чертihin Г. В., Зайцевский А. В., Серебренников Л. В. //Ж. физ. химии. — 1993. — 67, № 8. — С. 1642—1644. — Рус.

Изучены ИК-спектры продуктов р-ции $\text{Ga} + \text{SO}_2$ в матрицах из аргона. Показано, что основным продуктом р-ции является молекула GaSO_2 , существующая по крайней мере в трех изомерных формах: к первому изомеру (циклич. строения со связями $\text{Ga}-\text{O}$) отнесены полосы 1034 и 940 cm^{-1} , ко второму (ациклическому) — полосы 1254/1227 и 1130/1110 cm^{-1} , третий изомер, вероятно, имеет ионное строение, и к нему отнесена полоса 1084/1067 cm^{-1} .

де Л.

Х. 1994, № 4

HGaS

1994

Nowek Andrzej,
Leszczynski Jerzy.

потемн.

поверхн.,
ейдбчлвн.,

Vi, теор.

расчет

J. Phys. Chem. 1994,
98 (50), 13210-14.

( сел. HGaO; III)

1994

F: HGaS

P: 3

2Б145. Исследование молекулярной структуры и ИК-спектров HGaX и HXGa (X=O, S и Se) в хартри-фоковском приближении и в приближении, выходящем за пределы метода Хартри-Фока. Hartree-Fock and post-Hartree-Fock study on molecular structures and IR spectra of HGaX and HXGa (X=O, S, and Se) systems / Nowek Andrzej, Leszczynski Jerzy // J. Phys. Chem. 1994. - 98, N 50. - С. 13210-13214. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО, а также с учетом электронной корреляции в рамках МП2-МП4 рассчитаны поверхности потенциальной энергии для гипотетич. систем HGaX и HXGa (X=O, S, Se). Использован трехэкспонентный базис с включением поляризац. функций. Исследована относит. стабильность и энергетика диссоциации с разрывом обеих связей. Глобальному минимуму отвечают сильно изогнутые системы HXGa, что противоречит правилам Уолша.

Р.жс.Х. №2, 1996.

1994

F: HGaSe

P: 3

2Б145. Исследование молекулярной структуры и ИК-спектров HGaX и HXGa (X=O, S и Se) в хартри-фоковском приближении и в приближении, выходящем за пределы метода Хартри-Фока. Hartree-Fock and post-Hartree-Fock study on molecular structures and IR spectra of HGaX and HXGa (X=O, S, and Se) systems / Nowek Andrzej, Leszczynski Jerzy // J. Phys. Chem. 1994. - 98, N 50. - С. 13210-13214. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО, а также с учетом электронной корреляции в рамках МП2-МП4 рассчитаны поверхности потенциальной энергии для гипотетич. систем HGaX и HXGa (X=O, S, Se). Использован трехэкспонентный базис с включением поляризац. функций. Исследована относит. стабильность и энергетика диссоциации с разрывом обеих связей. Глобальному минимуму отвечают сильно изогнутые системы HXGa, что противоречит правилам Уолша.

Р.ж.Х. №2, 1996.

1995

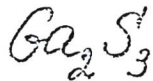
F: Ga₂S₃

P: 3

4B153. Электронная структура молекул X[2]Y[3] (X=B, Al, Ga; Y=O, S). Теоретическое изучение. Electronic structure of X[2]Y[3] molecules (X=B, Al, Ga; Y=O, S): A theoretical study / Jemmis Eluvathingal D., Subramanian G., Santosh S., Leszczynski Jerzy // Proc. Indian Acad. Sci. Chem. Sci. - 1995. - 107, N 4. - С. 423-429. - Англ.

Неэмпирическим методом МО и методом функционала плотности исследованы молекулы X[2]Y[3], X=B, Al, Ga; Y=O, S. Для B[2]O[3], B[2]S[3] и Al[2]S[3] предпочтительной является изогнутая структура симметрии C[2v], в то время как Al[2]O и Ga[2]O[3] имеют линейную структуру. Оба теор. подхода (МП2/6-31 ГФ{*} и B3LYP/6-311+ГФ{*}) дают сопоставимые результаты.

РМХ 1997



1997

Jemmis E.D., Giju K.T.
et al.

суперклет. Electron. J. Theor. Chem.
1997, 2, 130-138.

(сер.  B₂O₃; 11)

$\text{Ga}_3\text{I}_3\text{H}_3$

1998

Jemmis, Elurathingal &
et al.,

моном.

рацем

см-н,

стабильн.

Inorg. Chem.

2110 - 2116

1998, 37(9)

($\text{Ga} \cdot \text{B}_3\text{N}_3$

●, H_6 , III)

GaS_2

(Dm. 40246)

2000

Yuxiang Bu, Xinyu Song
et al.,

Chem. Phys. Lett., 2000,
N 5-6, 725-732.

Theoretical prediction of
the structures and properties
of cyclic As_2 and GaS_2 systems

at density functional theory
and all-electron correlation
levels -

2000

om. 40244

F: GaSO

P: 3

133:125573

The bonding character of the cyclic
AlSO and GaSO species: ab initio investigations at
density functional theory and the electron
correlation levels. Bu. Y. Key Laboratory of

Colloid and Interface Chemistry of the Educational
Ministry, Shandong University Jinan 250100,
Peop. Rep. China Chem. Phys. Lett., 322(6), 503-
512 (English) 2000. The structural properties have
been predicted for cyclic AlSO and GaSO at DFT, MPn,
QCISD(T) and CCSD(T) levels with a 6-311+G* basis.
Results indicate that the cyclic AlSO species possesses
a $2A''$ ground state with a $2A'$ excited state higher by
16.2 kcal/mol at CCSD(T)/6-311+G* level, while the
cyclic GaSO only has a $2A''$ ground state without a $2A'$
excited state. Various calcns. yield dissocn. energies
within 4.0 kcal/mol of 65.8 and 52.3 kcal/mol for the
two ground states, resp. These two cyclic AlSO and GaSO
species in the ground states should be classified as
thiosuperoxide. However, they are not as ionic as LiO_2
or $LiSO$, and are also less ionic than the cyclic AlO_2 .

6a L₂

2001

Bu, Yuxiang, et al.,

cmp-ra, Int. J. Quantum. Chem.
смагучий, 2001, 81(3), 222-231.
теор. расчет

(cu. fab₂ ; III)

6a S₂-14a

2001

mp-PA, D₁

ANCOF.
paler

135: 262517a Novel bonding character of the cyclic AlS₂ and GaS₂ systems. Song, Xin-Yu; Nie, Yi; Bu, Yu-Xiang (School of Chemistry & Chemical Engineering, Shandong University, Jinan, Peop. Rep. China 250100). *Chin. J. Chem.* 2001, 19(7), 637-640 (Eng), Science Press. The geometries, the harmonic vibrational frequencies and the bonding properties have been predicted for cyclic AlS₂ and GaS₂ species at the d. functional theory (DFT), MPn (n = 2, 3, 4), QCISD(T) and CCSD(T) levels with 6-311+G(2df) basis set. The novel bonding character is discussed.

C. A. 2001, 135, N18.