

Cc Fm

1973

 CrF_n $n=1-4, 6$

24 Б280. Молекулярные постоянные фторидов и хлоридов хрома и марганца. Соломоник В. Г., Краснов К. С., Морозов Е. В. «Изв. высш. учеб. заведений. Химия и хим. технол.», 1973, 16, № 8, 1291—1293

Для расчета статистическими методами химических равновесий в газовой фазе с участием галогенидов хрома и марганца выполнена оценка геометрических параметров и частот колебаний молекул MX_n и CrX_6 ($\text{M} = \text{Cr, Mn}$; $\text{X} = \text{F, Cl}$; $n = 1-4$). Частоты колебаний рассчитаны в приближении валентного силового поля путем переноса силовых постоянных из родственных молекул.

Автореферат

М. П.

С. П.

X. 1973 № 24

+48

☒

 MnF_n CrCl_n CrF_n CrF_6 CrCl_6

Cz Fc

1976

Pandey A.N., et al.

Acta Cienc. Indica, 1976,
2(1), 63-72.

(cell. noc.
cp. cell. cell.)

(cell. PF6-) III

Хром фториды

1979

Молибден

Фториды

6 Д222. О зависимости энергий валентных состояний переходных элементов в переменновалентных рядах галогенидов от их эффективных зарядов. Первов В. С., Фалькенгоф А. Т., Муравьев Э. Н. «Координац. химия», 1979, 5, № 2, 155—158

Методом Йоргенсена рассчитаны эффективные заряды во фторидах хрома и молибдена. Установлено, что полученные результаты коррелируют с эксперим. значениями энергий последовательного разрыва связей. Автореферат

расчет эффектив. зарядов.

(41)



Ф.1979/6

ГФУ(2) 10 м. 18225 1982

Цооккма Н.А., Рудневой
Е.Б. и др.

термод.
ор-сер,
сер. 12.

Депониров. рук. ВИНТИ,
1982, N 3271-82 Ден.

Фториды Cr
 $CrX_k (k=1-6)$

1984

12 Б1005. Фториды металлов подгруппы хрома.
Первов В. С., Буцкий В. Д. «Ж. неорганич. химии»,
1984, 29, № 3, 570—581

С целью описания фундаментальных закономерностей, определяющих изменения хим. св-в галогенидов переходных металлов $MX_k (k=1-6)$ в переменновалентных рядах, систематизированы и обсуждены эксперим. сведения о простых фторидах металлов подгруппы хрома. Показано, что основной причиной нерегулярности св-в фторидов хрома, молибдена и вольфрама являются немонотонные изменения энергий валентных состояний центрального атома М вследствие эффектов ионности.

Резюме

(+2) ~~IX~~

Х. 1984, 19, N 12



Фториды Mo
— — — W

GrF

1994

120: 144704b Octahedral and Prismatic Isomers of CrF_6 : Energies and Vibrational Frequencies. Marsden, Colin J.; Moncrieff, David; Quelch, Geoffrey E. (School of Chemistry, University of Melbourne, Parkville, 3052 Australia). *J. Phys. Chem.* 1994, 98(8), 2335-43 (Eng). Detailed, ab-initio, electronic-structure calcs. are reported for the octahedral and prismatic isomers of mol. CrF_6 . A carefully graded series of basis sets was used. Correlation effects were calcd. at the CCSD(T) level, and some exploratory MR-CISD calcs. were done. Vibrational frequencies calcd. at the SCF level are reported. In agreement with other recent work, the octahedral isomer is shown to be the most stable for CrF_6 ; the crucial role played by f-functions in the Cr basis is emphasized. Triple excitations preferentially stabilized the octahedral isomer. The authors' final value for the octahedral-prismatic total-energy sepn. is 59.3 kJ/mol, which is much lower than the CASPT2 (complete active space with second-order perturbation theory) result reported by K. Pierloot and B. O. Roos (1992).

CrF₆ молекула,
Pi, геометрические
свойства

C.A. 1994, 120, N12