

C4-Cl-0

CrOCl

bp-2041-vii

1962.

Forsberg H.E.

"Acta Chem. Scand"

Veil XYZ

1962, 16, N3, 777



$\text{CrO}_2\text{Cl}(\sim)$

1968

5 Д805. Импульсный фотолиз хромилхлорида.
Halonbrenner Rolf, Huber J. Robert, Wild
Urs, Günthard Hans H. A flash-photolysis study of
chromyl chloride. «J. Phys. Chem.», 1968, 72, № 11,
3929—3935 (англ.)

спектр

Методом импульсного фотолиза исследованы промежуточные продукты фотовозбуждения хромилхлорида (CrO_2Cl_2) в газовой фазе. Из анализа осциллограмм изменения пропускания под фотоимпульсом следует образование двух промежуточных состояний: CrO_2Cl и CrO_2 по схемам: $\text{CrO}_2\text{Cl}_2 \xrightarrow{h\nu} \text{CrO}_2\text{Cl}_2^* \xrightarrow{-\text{Cl}} \text{CrO}_2\text{Cl}$; $\text{CrO}_2\text{Cl} \xrightarrow{h\nu} \text{CrO}_2\text{Cl}^* \xrightarrow{-\text{Cl}} \text{CrO}_2$. Измерены спектры поглощения CrO_2Cl и CrO_2 и кинетика гибели радикала CrO_2Cl .
А. К. Чибисов

ф. 1969.5 Д

+2



CrO_2Cl_5

Burroughs Peter,
et al.

1974

предп.
сметоч.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1974, Part 2,
70 N/2, 1895-11

● (cr RuO_4 ; III)

GrOCl₄-

Om. 23325

1976

расчет жем.
железист.

переход.

сильно окисленный.

Garner C.D., Kendrick
J., et al.,

Inorg. Chem., 1976, 15,
N 6, 1287-1291.

Сх-О-Сл

Ковба В.М., Мамцев А.А.

1980

"Спектры и строение молекул." М., 1980,
3-й изд.

Лит. пос.

Сл. С-2-Сл
14

[CrOCl₄]-

[MoOCl₄]-

[MoOBr₄]-

23324 OM

1980

93: 101675z Ground-state electronic structure and the nature of excited states of oxotetrahalo complexes of chromium(V) and molybdenum(V): a self-consistent field multiple scattering X α study. Weber, Jacques; Garner, C. David (Dep. Chem., Univ. Geneva, 1211 Geneva, 4 Switz.). *Inorg. Chem.* 1980, 19(8), 2206-9 (Eng). MO calcs., using the all-electron SCF multiple scattering X α method, were carried out for the complexes [CrOCl₄]-, [MoOCl₄]-, and [MoOBr₄]-. In the ground-state electronic structure of each system, the ordering of predominantly metal *d* orbitals is $d_{xy} < d_{xz,yz} < d_{x^2-y^2} < d_{z^2}$, in agreement with previous predictions for CrO₃⁺ and MoO₃⁺ complexes. The main features of the chem. bonding in the complexes are discussed by using an anal. of the charge distribution of the valence levels. Calcs. have been performed on the excited states of the complexes in an attempt to clarify the interpretation of their electronic absorption spectra. The results are very similar for the 3 systems and suggest that the lowest energy absorption is due mainly to the $d_{xy} \rightarrow d_{xz,yz}$ transition with some possible addnl. features due to halogen to metal charge-transfer excitations.

nb. eex,
pacer

(+2) (A)

C.A. 1980, 93 w10

1982.

(CrOCl₄)

Вей: 149440

Электрон.
структура

X. 1982, 19,
418.

18-B27. Электронная структура и параметры ЭПР (CrOCl₄)-. Sunil K. K., Harrison J. F., Rogers Max T. Electronic structure and ESR parameters of (CrOCl₄)-. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 6, 3078—3086 (англ.)

Проведены теор. расчеты электронной структуры (CrOCl₄)⁻ с использованием ССП-Х_α метода рассеянных волн. Сопоставлены величины главных компонент g- и А-тензоров в спектрах ЭПР (CrOCl₄)⁻, рассчи-

танные с волновыми функциями метода ССП-Х_α и расширенного метода Хюккеля. Для случая комплексов с электронной конфигурацией d¹ и симметрией C_{4v} выведены выражения, связывающие компоненты g- и А-тензора с коэф. при АО в МО. Эти выражения учитывают вклады от заполненных и незаполненных b₁-орбиталей, а также вклады от спин-орбитального взаимодействия на лигандах. Рассчитанные энергии переходов 2b₂→7e и 2b₂→4b₁ составляют 8,45·10³ и 20,3·10³ см⁻¹ соотв. Результаты обсуждаются в сопоставлении с данными для CrO и CrO³⁺. Обсуждаются нек-рые трудности, возникающие при применении расширенного метода МО Хюккеля к расчетам параметров спектров ЭПР. В. В. Жуков

CrOCl_4

Om. 22970

1983

Bobkova V. A., Alekshon-
kova Yu. A.

сер. пош.,
среднеквадрат.
амплитуды
колебаний.

Deposited Doc.

1983, VINITI 4039-
83, 17pp.

(сер. CrOF_4 ; III)

CrOCl_2

1985

Кочиков И.В., Ковбо В.И. и др.

Применение колебат. спект-
ров к исслед. неорг. и коор-
динац. соедин. 10 Всес. науч.
совещ. Тез. докл. Б.И., 1985,
24.

См.
пост.,
 V^{I} ;

(См. CrO_2F_2 ; III)

$[CrCl_2(H_2O)_4]^+$ 1985

Ravikumar K.G.,

Gunasekaran S., et al.

Vii, u. n.

Acta phys. pol., 1986,

A67, N 6, 1129-1132.

(cr. $[TiCl_2(H_2O)_4]^+$; III)



1985

Ravikumar K.G.,

Gunasekaran S., et al.

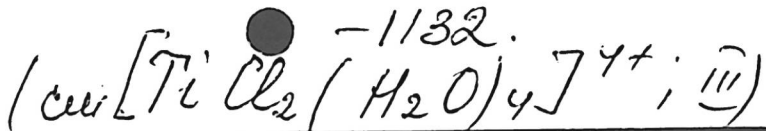
расчёт
нормальных

Acta phys. pol.,

колебаний.

1985, A 67, N 6, 1129-

-1132.



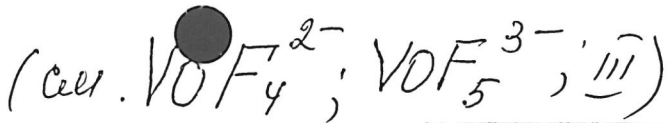


meop.
paerim

1987

Hasanein A. A.,
Makhyoun M. A.

Afinidad 1987,
44(407), 41-4.



Сн От Слн Назаренко И.И., 1988
m=1,2 Юмзман В.С., Ёжов Ю.С.
n=1,2,3,4 ЦН-т высок. температур АН
ССР-м., 1988-29с-Библиогр.
Ч5 назван.-Рус.-Дел. в ВИННТИ
28.09.88, N 7181-В88.

(ссл. Сн От Фн m=1,2 n=1,2,3,4; III)

[G.D. 4] - [Am. 33543] 1990

Deeth R. F.,

J. Chem. Soc. Dalton
Trans. 1990, N1, 365-
368

Theoretical Support for
the latest Assignment

of the Electronic Spectrum
of $[\text{CoCl}_4]^-$

Grill

1994

19 Б1032. Теоретическое исследование внутренней конверсии в хромилхлориде. Theoretical investigation of internal conversion in chromyl chloride /Rashev S. //Proc. Indian Acad. Sci. Chem. Sci. .—1991 .—103 ,№ 3 .—С. 369—373 .—Англ.

Проведено теор. исследование безызлучат. дезактивации нижнего синглетного электронно-возбужденного состояния хромилхлорида (I). Использована модель «горячей молекулы» Накашимы и Йошихары (см. J. Phys. Chem. .—1989 .—93 .—7763). Вычислена плотность колебат. подуровней основного электронного состояния S_0 , в области энергий колебат. подуровней нижнего электронно-возбужденного синглетного состояния S_1 и оценена скорость безызлучательных переходов из S_1 в S_0 . Расчет правильно воспроизвел особенности экспериментально наблюдаемого затухания ФЛ I. Эти особенности объяснены наличием нескольких каналов безызлучат. дезактивации с участием различных колебат. подуровней.

К. Я. Бурштейн

М.П.

Х. 1992, N 19

600

1991

9 Б1104. Изучение внутренней конверсии в хромил-хлориде. Investigation of internal conversion in chromyl chloride / Rashev S. // J. Chem. Phys.— 1991.— 95, № 5.— С. 3258—3266.— Англ.

Рассчитана скорость безызлучательной дезактивации нижнего синглетного электронно-возбужденного состояния хромилхлорида. Показано, что безызлучательная дезактивация идет через несколько колебат. подуровней основного состояния. Эти колебат. подуровни разделены достаточно большими энергетич. щелями и скорости переходов через них разные, поэтому затухание флуоресценции имеет неэкспоненциальный характер. Такое объяснение согласуется с предположением авторов работы, в к-рой данный эффект был обнаружен экспериментально (см. Chem. Phys. Lett.— 1989.— 155, — 243).

К. Я. Бурштейн

М.А.

X.1992, № 9

Crall

[om. 36726]

1992

структура,
колебательные
расчеты,
теоретический
расчет

Losa C., Andzelm J., et al.,
J. Phys. Chem. 1992, 96,
6630-36.

CrOCl

1995

Kim Sang-Ho, Kang
Jee-Ren, et al.

Синтез, Synth. Metals.
теор. 1995, 70, N1-3. C.

расчёт

1203 - 1204.

(сер. TiOCl ; iii)

1996

F: CrO₂Cl₂

P: 3

6Б157. Изучение химических свойств диоксодигалогенидов хрома(6+). Является ли метод функционала плотности наиболее подходящим методом изучения. Exploring chromium (VI) dioxodihalides chemistry: Is density functional theory the most suitable tool? / Torrent M., Gili P., Duran M., Sola M. // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 23. - С. 9499-9510. - Англ.

В различных вариантах неэмпирич. метода ССП и метода функционала плотности исследованы свойства CrO[2]F[2]. Сопоставлены точность результатов и затраты машинного времени на расчеты. Сделан вывод, что более подходящим является метод функционала плотности и с его помощью рассчитаны структурные и спектроскопич. характеристики CrO[2]X[2], X=F, Cl, Br, J. Библ. 85.

Рмх 1997

F: Cr2Cl104-

P: 3

1999

132:83943 Metal-Metal Bonding in
M2Cl6(H2PCH2PH2)2, M2Cl6(PH3)4, and M2Cl (M = Cr,
Mo, W) Edge-Shared Dimer Systems. Stranger,
Robert; Lovell, Timothy; McGrady, John E.

Department of Chemistry The Faculties, The
Australian National University Canberra 0200,
Australia Inorg. Chem., 38(24), 5510-5518

(English) 1999 D. functional theory is used
to det. the electronic structures, geometries, and
periodic trends in metal-metal bonding in the homo-
and heterobimetallic d3d3 edge-shared systems
M2Cl104-, M2Cl6(PH3)4, and M2Cl6(H2PCH2PH2)2 (M =
Cr, Mo, W). The much shorter metal-metal distance
these complexes relative to M2Cl104- (M = Mo, W)
are shown to arise solely electronic differences
between chlorine and phosphine donors. Due to inv
of the .delta. and .delta.* orbitals, the complexes



C.F. 2000, 132

M₂Cl₆(PH₃)₄ and M₂Cl₆(H₂PCH₂PH₂)₂ (M = Mo, W) are found to possess formal metal-metal double bonds. The periodic trends in metal-metal bonding in these systems are rationalized in terms of the energetic contributions of orbital overlap (.DELTA.Eovlp) and spin polarization (.DELTA.Espe). The redn. in .DELTA. and increase in .DELTA.Eovlp on replacement of axial chlorides with phosph both favor stronger metal-metal bonding in the phosphine-based complexes. strong linear dependence obsd. between .DELTA.Espe and .DELTA.Eovlp enable metal-metal bonding in these systems to be predicted simply from single- π spin-polarization energies. The antiferromagnetic coupling in M₂Cl₆(H₂PC (M = Mo, W) and MoWCl₆(H₂PCH₂PH₂)₂ is shown to be mostly due to coupling metal δ electrons, with a smaller contribution from the π electr particularly for the dimolybdenum complex.