

CL-F-0

FClO_4 (структура) XI 1546 1962

Agahigian H., Gray A. P.,
Vickers G. D.,

Canad. J. Chem., 1962,
40, N1, 157-58

ЕСТЬ Ф. К.

10

Вас есть

РХ63

FClO_3 (эфир. нафта) XI 1598 1968.

Clark A.H., Beagley B., Cruickshank D.^{W.J.}

Chem. Commun., 1968 (1), 14-15.

The structural parameters of perchloryl fluoride and perchloric acid.

10

⑤

CA 1968, 68, 16, 15229

ClOF_3

Baugon R., et al. 1970

C. r. Acad. sci, 1970,

ремолюс

C271, n 22, 1366.

Новой оксидиров
хлора; оксидирован
хлора, ClOF_3 .

(с ClOF_3) I

1970

BH₃; CH₂CO; транс-Н₂O; цис-Н₂O;
NH₃; HNCN; C₂N₂; FC₂H; транс-NO₂H;
цис-NO₂H; CMFO; NaO₂; FNO₂; ClF₂O;
F₃B; BH₄⁻; CH₄; NH₄⁺; NH₂OH; CH₂Na;
CH₃COCH₃; HCSCN; HCOOH; NO₃H;
FCOOH; C₂H₄; N₂H₄; CH₃OH; CH₃SH;
HCONH₂; цис-транс-3DHCCOH; цис-транс-FCHFCH;
T-2CCH₂; CH₃NH₂; (CH₂)₁₀O; CH₂CN; CH₃CH₂NH;
CO(NH₂); B₂H₆ (I, A e, i, расет)
Carlo R., Fraga S., An fis. Real. Soc. esp.
fis. quim., 1970, 66, W7-8, 271-74, 5+5
XT 3041

ClO_2^+

1971

4 Б177.) К вопросу о существовании катиона дифтор-
моноксидхлора (5+) ClO_2^+ . Bougon Roland,
Isabey Jacques, Plurien Pierre. Sur la mise
en évidence du cation difluoromonoxychloré (V) ClO_2^+ .
«C. r. Acad. sci.», 1971, C273, № 5, 415—417 (франц.)

Исследование спектра КР 5% р-ра ClO_2 (I) в HF
позволило установить существование в р-ре иона
 ClO_2^+ (II), спектр к-рого значительно отличается от
спектра I и аналогичен спектру КР изoeлектронной мо-
лекулы SO_2 . Исследованы спектры КР комплексов I
с SbF_5 , AsF_5 и BF_3 в тв. состоянии и в р-ре HF. Пока-
зано, что в этих комплексах также присутствует ион II.
Предложено отнесение колебаний II для модели с
симметрией C_s : $\nu_1 (a') = 1339$ (1329 для Cl^{37}); $\nu_2 (a') = 746$;
 $\nu_3 (a') = 516$; $\nu_4 (a') = 409$; $\nu_5 (a'') = 729$; $\nu_6 (a'') = 391 \text{ см}^{-1}$.
Е. Разумова

X, 1972, 4

1972

9 Д411. Дифторхлорат-анион ClO_2F_2^- . Колебательный спектр и силовые постоянные. Christe Karl O., Curtis E. C. The difluorochlorate(V) anion, ClO_2F_2^- . Vibrational spectrum and force constants. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 1, 35—39 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения ($150\text{—}4000\text{ см}^{-1}$) и спектр комб. рас. твердого дифторхлората цезия $\text{CsF} \cdot \text{ClO}_2\text{F}$ в таблетках с AgBr . Найденные полосы свидетельствуют о существовании аниона ClO_2F_2^- с симметрией C_{2v} ; выполнено их полное отнесение. Отмечено также присутствие ряда полос ClO_3^- и HF_2^- , наличие которых объяснено большой гигроскопичностью CsClO_2F_2 . Сделан вывод, что анион имеет структуру типа тригональной бипирамиды, где атомы F расположены аксиально, а атомы O и электронное облако свободной пары характеризуются экваториальным положением. По модели валентного силового поля рассчитаны значения силовых констант: $f_r(\text{ClF}) = 1,6$; $f_{rr} = -0,1$; $f_R(\text{ClO}) = 8,3$ и $f_{RR} = 0,1$ мдин/А. Установлено, что связь атомов Cl и O имеет двойной характер, а более слабые связи Cl—F — в значительной степени ионного типа. Библ. 42.

С. Ф. Б.

(сил. пос)

Ф. 1972.
99. ClO_2F_2^-

ClO₂⁻
2 2

1982

17 Б253. Дифторхлорат (V) анион, ClO₂F₂⁻. Колебательный спектр и силовые постоянные. Christie Karl O., Curtis E. C. The difluorochlorate(V) anion, ClO₂F₂⁻. Vibrational spectrum and force constants. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 1, 35—39 (англ.)

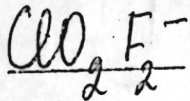
Измерены ИК-спектры (газ. кристалл) и спектр КР, (кристалл) CsF·ClO₂F в области 100—1400 см⁻¹. Проведено отнесение наблюдаемых полос к различным типам колебаний по данным о колебательных спектрах родст-

X. 1982. 17

венных молекул: XeO_2F_2 , ClO_2^- , ClO_2F , ClO_2^+ , ClF_3 и др. Спектры согласуются с наличием аниона ClO_2F_2^- симметрии C_{2v} . Показано, что анион ClO_2F_2^- имеет структуру тригон. бипирамиды, в которой атомы фтора занимают аксиальные положения, а два атома кислорода и свободная пара электронов занимают три экваториальных положения тригон. бипирамиды. Проведен анализ нормальных колебаний аниона ClO_2F_2^- в приближении модифицированного валентного силового поля. Получены силовые постоянные связи $\text{Cl}=\text{O}$ (8,3 мдин/А) и связи ClF (1,6 мдин/А). Отмечено, что связи $\text{Cl}=\text{O}$ имеют преимущественно ковалентный характер, тогда как связи $\text{Cl}=\text{F}$ в значительной степени ионные.

А. П. Курбакова

1972



52189g—Difluorochromate(V) anion, ClO_2F_2^- . Vibrational spectrum and force constants. Christe, Karl O.; Curtis, E. C. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell, Conoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1972, 11(1), 35-9 (Eng). The ir and Raman spectra of solid $\text{CsF}.\text{ClO}_2\text{F}$ were recorded. They are consistent with a ClO_2F_2^- anion of symmetry C_{2v} . The structure can be derived from a trigonal bipyramid, where the 2 F atoms occupy the axial and the 2 O atoms and the lone electron pair occupy the equatorial positions. A modified valence force field was computed for ClO_2F_2^- , indicating double-bond character for the ClO bonds and rather weak ClF bonds with high ionic contributions.

✓
Curt. N.

C.A. 1972, 76, 10

1982

 ClO_2F_2^+

42589u Difluoroperchloryl cation, ClO_2F_2^+ . Christe, Karl O. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Nucl. Chem. Lett.* 1972, 8(5), 453-5 (Eng). ClO_2F_2^+ was prepd. as a PtF_6^- salt by reacting FClO_2 with PtF_6 in a sapphire reactor at 25° . The cation was characterized by its ir spectrum.

Vi

C.A. 1982. 77. 6

1972

ClF_2O_2

(Wong)

71

unpublished

C. A. 1972 77.6

42591p Chlorine trifluoride dioxide, ClF_2O_2 . Christe, Karl O. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Nucl. Chem. Lett.* 1972, 8(5), 457-9 (Eng). A sample of $\text{ClO}_2 + \text{PtF}_6^-$ contg. 10% $\text{ClF}_2\text{O}_2 + \text{PtF}_6^-$ was treated with excess FNO at -78° in a sapphire reactor and the products were sepd. by fractional condensation. The -142° fraction contained a compd. identified by its ir spectrum as ClF_2O_2 . The obsd. frequencies and band contours are in excellent agreement with those expected for a trigonal bipyramidal structure of symmetry C_{2v} .



1972

ClF₃O

2 Д428. Окситрифторид хлора. III. Колебательные спектры, силовые постоянные и термодинамические свойства. Christie Karl O.; Curtis E. C. Chlorine trifluoride oxide. III. Vibrational spectrum, force constants, and thermodynamic properties. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 9, 2196—2201 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразного, твердого и изолированного в матрице из N₂ при 4° K ClF₃O, а также его спектры комб. рас. в газообразном и жидком состояниях в области 100—4000 см⁻¹. Обнаружено 9 полос фундаментальных колебаний, что подтверждает симметрию молекулы C_s, выполнено отнесе-

(Vi)

Tg p

(+1) в. II карт.

Д пер-1973-2

ние наблюдавшихся полос. Показано, что колебательные спектры ClF_3O согласуются с тригонально-бипирамидальной моделью, в которой 2 атома F расположены в вершинах, а атомы F, O и одна свободная электронная пара — в остальных углах. По модифицированной модели валентного силового поля выполнен расчет частот. Найдено, что аксиальные связи ClF ($f_r = 2,3$ мдин/Å) значительно слабее, чем экваториальная ($f_R = 3,16$ мдин/Å); порядок связи ClO ($f_D = 9,37$ мдин/Å) близок к двум. В жидком и твердом состояниях доказано существование ассоциации посредством аксиальных атомов F. Рассчитаны термодинамич. ф-ции молекулы для области 0—2000° К. Библ. 32. С. Ф. Б.

ClF₃O

1972

132688e Chlorine trifluoride oxide. III. Vibrational spectrum, force constants, and thermodynamic properties. Christe, Karl O.; Curtis, E. C. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1972, 11(9), 2196-201 (Eng). The ir spectra of gaseous, solid, and matrix isolated ClF₃O and the Raman spectra of gaseous and liq. ClF₃O are reported. Nine fundamental vibrations were obsd. consistent with symmetry C_{2v}. The vibrational spectrum of ClF₃O agrees well with a trigonal-bipyramidal model with 2 F atoms at the apexes and 1 F atom, 1 O atom, and 1 localized free-electron pair at the

(Vi)
(T.g.p)

C.A. 1972, 77, 20

remaining corners. A modified valence force field was computed for ClF_3O . These data indicated that the axial ClF bonds ($f_r = 2.34$ mdyne/Å) are considerably weaker than the equatorial one ($f_R = 3.16$ mdyne/Å) and that the bond order of the ClO bond is close to 2 ($f_D = 9.37$ mdyne/Å). The Raman spectrum of the liq. and the ir spectrum of the solid indicate assocn. through the axial F atoms. Thermodynamic properties were computed for ClF_3O in the range 0-2000°K.

ClF_3O

1972.

1) 7 Б232. Окись трифторида хлора. III. Колебательный спектр, силовые коэффициенты и термодинамические свойства. Christie Karl O., Curtis E. C. Chlorine trifluoride oxide. III. Vibrational spectrum, force constants, and thermodynamic properties. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 9, 2196—2201 (англ.)

(реач.)
(С.п; т.г.ф)

Исследованы ИК-спектры газ.; тв. и матрично-изолированного ClF_3O в области $4000-200 \text{ см}^{-1}$ и спектры КР газ. и жидк. ClF_3O при возбуждении $\lambda 5145 \text{ Å}$ Ar^+ -лазера. В соответствии с симметрией C_3 для ClF_3O найдено 9 фундаментальных колебаний. Колебательный спектр ClF_3O хорошо согласуется с тригонально-бипирамидальной моделью с двумя атомами фтора в вершинах, атомами фтора и кислорода и неподеленной парой электронов в остальных углах. Проведен расчет силового

Х. 1973. № 7

(41) Т.г.ф. ▣

поля ClF_3O . Результаты расчета показывают, что аксиальные ClF связи ($f=2,34$ мдин/А) значительно слабее экваториальной ($3,16$ мдин/А); порядок связи ClO близок к двум. ($f=9,37$ мдин/А). Спектр КР ClF_3O в жидк. состоянии и ее ИК-спектр в крист. состоянии указывают на ассоциацию через аксиальные атомы фтора. Вычислены термодинамич. св-ва для ClF_3O в интервале t -р $0-2000^\circ\text{K}$. Сообщ. I см. РЖХим, 1973, 3В7.

Я. М. Кимельфельд

ClF_3O^-

1972.

7 Б233. Окись трифторида хлора. VI. Тетрафтороксихлорат (V)-анион, ClF_4O^- . Колебательные спектры и силовые коэффициенты. Christe Karl O., Curtis E. C. Chlorine trifluoride oxide. VI. The tetrafluorooxychlorate (V) anion, ClF_4O^- . Vibrational spectra and force constants. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 9, 2209—2211 (англ.)

Исследованы ИК-спектры и спектры КР $\text{Cs}+\text{ClF}_4\text{O}^-$ и $\text{Rb}+\text{ClF}_4\text{O}^-$. По аналогии с XeF_4O и ClF_5 в спектрах найдено 9 основных колебаний, указывающих на симметрию C_{4v} для аниона. Предложены отнесения для частот основных колебаний и проведен расчет нормальных колебаний для аниона ClF_4O^- . Силовой коэф. для вал. кол. связи $\text{Cl}=\text{FO}$ равен 9,13 мдин/А, что соответствует ожидаемому для ковалентной двойной связи. Несколько меньшая величина этого силового коэф., чем соответствующего коэф. у ClF_3O , может быть объяснена отриц. зарядом на центральном атоме хлора. Силовой коэф. связи $\text{Cl}=\text{F}$ равен 1,78 мдин/А. Это значение согласуется с моделью ClF_4O^- , имеющей две пары семи-ионных трех-центровых четырехэлектронных р-ров σ -связей $\text{Cl}-\text{F}$.
Сообщ. III см. пред. реферат. Я. М. Кимельфельд

(с.н.)

X. 1973.

№ 7

ClF₄O⁻

1972

(encl. not)

132855g Chlorine trifluoride oxide. VI. Tetrafluorooxychlorate(V) anion, ClF₄O⁻. Vibrational spectra and force constants. Christe, Karl O.; Curtis, E. C. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1972, 11(9), 2209-11 (Eng). The ir and Raman spectra of Cs⁺ClF₄O⁻ and Rb⁺ClF₄O⁻ were recorded. Nine fundamental vibrations were obsd. consistent with a C_{4v} structure analogous to that of XeF₄O and ClF₅. An assignment of the fundamental vibrations is proposed and a modified valence force field was calcd. The bonding in ClF₄O⁻ is best described by a mainly covalent Cl:O double bond and 2 semiionic 3-center, 4-electron $p-p \sigma$ Cl-F bond pairs.

C. A. 1972. 77, N20

1972

 ClF_2O^+ (curr.
no cur.)

132861f Chlorine trifluoride oxide. VII. Difluorooxychloronium(V) cation, ClF_2O^+ . Vibrational spectrum and force constants. Christe, Karl O.; Curtis, E. C.; Schack, Carl J. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1972, 11(9), 2212-15 (Eng). The vibrational spectra were recorded for the solid 1:1 adducts, $\text{ClF}_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$, $\text{ClF}_2\text{O} \cdot \text{AsF}_5$, and $\text{ClF}_2\text{O} \cdot \text{SbF}_5$, and for $\text{ClF}_2\text{O} \cdot \text{BF}_3$ in HF soln. These spectra are entirely consistent with the ionic structures, $\text{ClF}_2\text{O}^+ \text{BF}_4^-$, $\text{ClF}_2\text{O}^+ \text{AsF}_6^-$, and $\text{ClF}_2\text{O}^+ \text{SbF}_6^-$, resp. Six fundamental vibrations were obsd. for ClF_2O^+ , consistent with symmetry C_{2v} . The structure of ClF_2O^+ can be derived from a tetrahedron with the Cl atom located at the center and with 2 F atoms, 1 O atom, and 1 free-electron pair at the 4 corners. The vibrational spectrum and structure of ClF_2O^+ closely resemble those of isoelectronic SOF_2 . An assignment of the fundamental vibrations is proposed for ClF_2O^+ , and a modified valence force field was calcd. A mainly covalent bond model is considered most likely for ClF_2O^+ .

C. A. 1972. 77. N20

ClF_2O^+

(с.н; vi)

X. 1973
N 7

7 Б234. Окись трифторида хлора. VII. Катион дифтороксихлорония (V) ClF_2O^+ . Колебательный спектр и силовые коэффициенты. Christie Karl O., Curtis E. C., Schack Carl J. Chlorine trifluoride oxide. VII The difluoroxychloronium (V) cation, ClF_2O^+ . Vibrational spectrum and force constants. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 9, 2212—2215 (англ.)

Исследованы колебательные спектры тв. аддуктов $\text{ClF}_3\text{O} \cdot \text{BF}_3$, $\text{ClF}_3\text{O} \cdot \text{AsF}_6$ и $\text{ClF}_3\text{O} \cdot \text{SbF}_5$ и $\text{ClF}_3\text{O} \cdot \text{BF}_3$ в р-ре HF. Спектры находятся в соответствии с ионной структурой соединений: $\text{ClF}_2\text{O}^+ \cdot \text{BF}_4^-$, $\text{ClF}_2\text{O}^+ \cdot \text{AsF}_6^-$ и $\text{ClF}_2\text{O}^+ \cdot \text{SbF}_6^-$. В спектрах катиона ClF_2O^+ наблюдается в соответствии с симметрией C_s шесть основных колебаний. Катион ClF_2O^+ , по-видимому, представляет собой тетраэдр с атомом хлора в центре и имеющий в вершинах два атома фтора, атом кислорода и неподеленную пару электронов. Колебательный спектр и структура ClF_2O^+ близки по параметрам изоэлектронному SO_2F_2 . Проведены отнесение основных колебаний ClF_2O^+ и расчет нормальных колебаний; колебательным спектрам ClF_2O^+ удовлетворяет модель с ковалентными связями. Сообщ. VI см. пред. реферат. Резюме

1972.

1972

XI 3149

Gans P.

 ClO_3F (cur. n.) ClO_4F

J. Mol. Struct. 1972, 12, N3, 411-
 тем номером в в-базе 425 (англ.)

Force - constant computations.

III. Force - constant ranges for
 perchloryl fluoride and
 some improvements in the
 Fletcher - Powell method of
 P.H.C. Liu, 1972, 24595 refinement (15)

1972

FClO_2

крас.
лет.;
структур.
исслед.;
м.б. спектр

L/146958j Microwave spectrum, structure, and nuclear quadrupole coupling constants of chloryl fluoride. Parent, C. R.; Gerry, M. C. L. (Dep. Chem., Univ. B.C., Vancouver, B.C.). *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1972, (5), 285-6 (Eng). The microwave spectrum of FClO_2 was recorded, and rotational consts., principal moments of inertia, and nuclear quadrupole coupling consts. detd. for $^{19}\text{F}^{35}\text{Cl}^{16}\text{O}_2$ and $^{19}\text{F}^{37}\text{Cl}^{16}\text{O}_2$. The structure of FClO_2 was deduced, F-Cl and Cl-O being 1.664 and 1.434 Å, resp., and O-Cl-O and F-Cl-O being 113.5 and 103.2°, resp.

C.A. 1972. 76. 24.

ClF₃O

1972.

patent
current

133156d Chlorine trifluoride oxide. II. Photochemical synthesis. Pilipovich, Donald; Rogers, H. H.; Wilson, R. D. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1972, 11(9), 2192-5 (Eng). Chlorine trifluoride oxide, ClF₃O, was synthesized from several gaseous reaction systems using uv activation. The fluorination of both ClO₂F and ClO₃F, using ClF₃ or F₂ as fluorinating agents, gave excellent yields of ClF₃O. In addn., the direct photochem. synthesis of ClF₃O from Cl₂, F₂, and O₂ was successfully achieved. Other systems yielding ClF₃O were ClF₃-O₂ and ClF-IF₃O. Attempts to photochem. prep. either BrF₃O from BrF₃ and O₂ or BrF₇ from BrF₅ + F₂ were unsuccessful.

C. A. 1972, 77, N20

ClO_2F_3

1972

V 2 Д141. Расчеты ClO_2F_3 методом ССП МО ЛКАО.
Rode B. M., Engelbrecht A. LCAO MO SCF calculations on ClO_2F_3 . «Chem. Phys. Lett.», 1972, 16, № 1, 26—27 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2 исследовано электронное строение ClO_2F_3 в конфигурациях с симметрией D_{3h} , C_{2v} и C_s с оптимизацией геометрии при наложении требования сохранения симметрии. Рассчитаны электронные и полные энергии, энергии связи, равновесная геометрия, дипольные моменты, зарядовые распределения. Наиболее стабильной оказалась конфигурация с симметрией C_{2v} , при этом наибольший вклад в стабилизацию вносит электронная энергия. В этой конфигурации перенос заряда с атома Cl на атомы S и F является наименьшим. Дипольный момент оценен в 1,403 ед. Дебая. В. Л. Лебедев

Рис. 73-2

1972.

 ClO_2F_3

5 Б23. Расчеты ClO_2F_3 по методу МО ЛКАО ССП.
 Rode B. M., Engeltrecht A. LCAO MO SCF calculations on ClO_2F_3 . «Chem. Phys. Lett.», 1972, 16, № 1, 26—27 (англ.)

Эл. стр.

В рамках приближения ППДП/2 метода МО ЛКАО ССП с вариацией длин связей и валентных углов рассчитано электронное строение молекулы ClO_2F_3 (I) для возможных тригон. бипирамидальных структур симметрии D_{3h} , C_{2v} и C_s . Вычислены электронные энергии, полные энергии, энергии связи, распределение электронной плотности и дипольные моменты для всех конформаций. Найденный порядок устойчивости $C_{2v} > C_s > D_{3h}$ объяснен вкладом электронной энергии (энергия ядерного отталкивания возрастает в последовательности $D_{3h} > C_s > C_{2v}$). Найденная наиболее устойчивой геометрия C_{2v} отвечает правилу Джиллеса (о предпочтительности аксиальных позиций в пирамидальных молекулах для более электроотриц. лигандов — атомов фтора) и согласуется с данными по ИК-спектрам для I.

Е. Шусторович

Ж. 1973. № 5.

ClOF_3

1972

ClOF_5

Rosolovskii V. Ya. et al.

(экспер.
Vi
m.g. eb-lu.) (Inst. Nov. Khim Probl.
Chernogolovka. USSR).
Deposited Publ. 1972. VINITI
5437-73.

all NO_3^- ; III

CLOF

1972

Rosolovskii V. Ya. et al.

(Inst. Nov. Khim. Probl.

Chernogolovka USSR.)

Deposited Publ. 1972. VINITI

5437-73.

(структ.
Vi
т.д. ет-а)

CU NSF; III

ClO_2F_3

1972

Rosolovskii V. Ya. et al.

(Inst. Nov. Khim. Probl.,
Chernogolovka USSR)

deposited Publ. 1972, VINITI
5437-73.

(ср. укр.
vi
m. g. eb-la)

all NO_2F ; III

004F

1972

(крат.
vi
т.г. еб. 62)

Rozolovskii V. Ya. et al.
(Inst. Nov. Khim. Probl.
Chernogolovka, USSR.)
Deposited Publ. 1972. VINITI
5437-73

003F; III

1973

ClOF₃

T29450g Prediction of molecular structure. Hargittai, I.;
 Mijlhoff, F. C. (Neth.). *Chem. Weekbl.* 1973, 69(27), 9-10
 (Neth). The valence shell electron pair repulsion (VSEPR)
 theory was used to predict and explain the geometry of classes
 of inorg. compds. Application of the VSEPR theory to ClOF₃,
POF₃, SO₂F₂, PX₃ (X = Cl, Br, F, I), and YH₃ (Y = N, P,
As, and Sb) is discussed. D. G. Oei

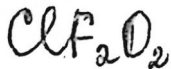
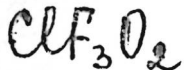
compyng
 ka

CA1973

79,22

(+10) ☒

1973



7 Б197. Оксифториды хлора. Christie Karl O., (Curtis Earl C., Wilson Richard D. Chlorine oxyfluorides. «7th Int. Symp. Fluorine Chem., Santa Cruz, Calif., 1973». S. l., s. a., № 1—25 (англ.)

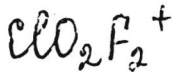
Изучены ИК- и КР-спектры ClF_3O_2 (I) и ClF_2O_2^+ (II). С использованием данных по изотопозамещ. проведено отнесение частот и проведен расчет нормальных колебаний I и II в модифицированном валентно-силовом поле. Обсуждено строение I и II. А. П. Курбакова

Di; геометр.

Х. 1974 № 7

(+1)





1973

✓ 167954m Difluoroperchloryl cation, ClO_2F_2^+ . Christe, Karl O.; Wilson, Richard D.; Curtis, E. C. (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell, Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1973, 12(6), 1358-62 (Eng). The reaction of FClO_2 with PtF_6 yields a product contg. $\text{ClO}_2\text{F}_2^+\text{PtF}_6^-$. A synthetic method is described that converts this salt into $\text{ClO}_2\text{F}_2^+\text{BF}_4^-$ or $\text{ClO}_2\text{F}_2^+\text{AsF}_6^-$. All 3 salts are stable at 25° and according to their ir, Raman, and ^{19}F NMR spectra are ionic in both the solid state and HF soln. The vibrational spectrum of ClO_2F_2^+ resembles that of isoelectronic SO_2F_2 , suggesting a pseudotetrahedral structure of symmetry C_{2v} . A modified valence force field is reported for ClO_2F_2^+ .

C.A. 1973. 78 N 26

1973

 ClO_2F_2^+

24 В5. Катион дифторперхлорил, ClO_2F_2^+ . Christie Karl O., Wilson Richard D., Curtis E. C. The difluoroperchloryl cation, ClO_2F_2^+ . «Inorg. Chem.», 1973, 12, № 6, 1358—1362 (англ.)

Для получения $\text{ClO}_2\text{F}_2^+\text{BF}_4^-$ (I) смесь $\text{ClO}_2\text{F}_2^+\text{PtF}_6^-$ (II) и $\text{ClO}_2\text{PtF}_6^-$ (III) обрабатывают FNO_2 (IV) в течение 48 час. при -78° . Процесс описывается ур-нием: $\text{II} + \text{III} + \text{IV} \rightarrow \text{FClO}_2$ (V) + ClF_3O_2 (VI) + $2\text{NO}_2 + \text{PtF}_6^-$. Не-прореагировавший IV отделяют фракционной конденса-цией при т-рах от -112 до -196° ; разделить смесь V и VI фракционной конденсацией не удастся. Далее смесь V и VI смешивают с BF_3 (VII), многократно меняют т-ру от -196 до 25° и затем выдерживают несколько ча-сов при -78° . Избыточный VII отгоняют под вакуумом, а в остатке получают тв. белый I. Для получения белого тв. $\text{ClO}_2\text{F}_2^+\text{AsF}_6^-$ (VIII) смешивают I и AsF_5 (IX) при -196° в тефлоновой ампуле, смесь выдерживают при -78° 0,5 час. и при 25° 1 час. После удаления при 25° летучих VII и IX получают VIII. II, VIII и I устойчивы при т-ре 25° и энергично взаимодействуют с H_2O и орг.

спектр.

сил.

нось.

X. 1973. N 24

в-бами. В безводи. HF I, VIII и II р-ряются без разложения. Получены рентгенограммы порошка I и VIII, приведены их значения J и d . I кристаллизуется в ромбич. сингонии с параметрами решетки a 5,45; b 7,23 и c 13 Å; $Z=4$. Получены спектры ЯМР ^{19}F I, VIII и II в р-рах HF; установлено, что характер спектра существенно усложняется с понижением т-ры. Получены и обсуждены ИК- и КР-спектры I, VIII и II в р-ре HF. Найдено, что спектры содержат полосы поглощения характерные для катионов BF_4^- , AsF_6^- и PtF_6^- . Идентичность спектра КР для тв. I и его р-ра в HF в совокупности с данными ЯМР-спектроскопии позволяет утверждать, что I является ионным соединением. Колебательные спектры аниона ClO_2F_2^+ очень близки таковым для изоэлектронного SO_2F_2 и позволяют предположить для первого псевдотетрагональную структуру симметрии C_{2v} . Из спектроскопич. данных рассчитаны силовые постоянные для катиона ClO_2F_2^+ .

Д. В. Дробот

ClF₃O₂

1943

3 Д364. Двуокись трехфтористого хлора. Колебательный спектр, силовые постоянные и термодинамические свойства. Christie Karl O., Curtis E. C. Chlorine trifluoride dioxide. Vibrational spectrum, force constants, and thermodynamic properties. «Inorg. Chem.», 1973, 12, № 10, 2245—2251 (англ.)

Получены спектры комб. рас. газообразного и жидкого ClF₃O₂, а также его ИК-спектры поглощения (250—4000 см⁻¹) в газообразном, жидком состояниях в матрице из N₂. В предположении симметрии C_{2v} выполнено отнесение 12 фундаментальных колебаний молекулы; рассчитаны значения силовых постоянных. Приведены величины термодинамич. параметров ClF₃O₂. Библ. 26. С. Ф. Б.

м.н.

Т.г.ф.

Ф. 1944. КЗ

⊗ ⊕ Т.г.ф.

от нас 1500

1973

 ClF_3O_2

8 Б222. Двуокись трехфтористого хлора. Колебательные спектры, силовые постоянные и термодинамические свойства. Christe Karl O., Curtis E. C. Chlorine trifluoride dioxide. Vibrational spectrum, force constants, and thermodynamic properties. «Inorg. Chem.», 1973, 12, № 10, 2245—2251 (англ.)

спектр
сил. конст.

Исследованы ИК-спектры ($250\text{—}4000\text{ см}^{-1}$) газообразного, тв. и матрично-изолированного ClF_3O_2 (I) и спектры КР газообразного и жидкого I. В спектрах наблюдаются все 12 основных колебаний I, десять из к-рых, как минимум, активны и в ИК- и спектрах КР, причем 4 или 5 линий КР поляризованы. Это позволяет приписать I структуру C_{2v} . Об этой структуре свидетельствуют и относит. интенсивности полос и частоты вал. кол. CF_2 , а также сравнение с другими в-вами, имеющими такую же геометрию. На основе структуры C_{2v} предложено отнесение наблюдаемых частот в ИК- и спектрах КР (с использованием данных по контурам ИК-полос газа и мат-

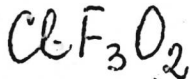
Х. 1974 N 8



① Тг. гр.

ричного ИК-спектра). Большую интенсивность полосы ν_3 (A_1) в спектре КР объясняют взаимодействием этого колебания с ν_2 (A_1), близким по частоте. Вычислены силовые постоянные связей и термодинамич. св-ва для области т-р 0—2000° К. Обсуждается электронная структура связей в I. Незначительные сдвиги частот в спектрах конденсированных фаз по сравнению со спектрами газообразного и матрично-изолированного образцов указывают на слабую ассоциацию в конденсированных фазах.

А. Б. Мостовой



1973

Ji

T.g. gp.

120028t Chlorine trifluoride dioxide. Vibrational spectrum, force constants, and thermodynamic properties. Christie, Karl O.; Curtis, E. C. (Rocketdyne Div., Rockwell Int., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1973, 12(10), 2245-51 (Eng). The ir spectra of gaseous, solid, and matrix-isolated ClF_3O_2 and the Raman spectra of gaseous and liq. ClF_3O_2 are reported. Twelve fundamental vibrations were obsd., consistent with a structure of symmetry C_{2v} . A modified valence force field and thermodyn. properties were computed for ClF_3O_2 .

C.A. 1973, 79 ~ 20   (+1) Tg gp.

ClF_3 , ClOF_3 (chemp & MP) 1974

Cl-F (noem. pascijennicis)
XI-4711

Alexandre M., Rigny P.,

Can. J. Chem., 1974, 52 (21),

3676-81.

Study of liquid chlorine fluo-
rides and oxyfluorides...

C.A. 1975, 82, 24052 u

10

(ϕ)⁵

FCIO

ВФ-Х1-4024

1974

19 Б284. Матричный спектр инфракрасного поглощения и колебательный анализ промежуточного FCIO. Andrews Lester, Chi Frank K., Arkell Alfred. Matrix infrared spectrum and vibrational analysis of the FCIO intermediate. «J. Amer. Chem. Soc.», 1974, 96, № 7, 1997—2000 (англ.)

Ди; геом.

Измерены спектры ИК-поглощения смеси $\text{ClF} + \text{O}_3$, изолированной в Ar-матрице, после облучения светом Hg-лампы высокого давления ($\lambda = 2200 - 3600 \text{ \AA}$). В ИК-спектре обнаружено появление новых полос поглощения $1038, 593 \text{ и } 315 \text{ см}^{-1}$, к-рые отнесены к кол. образующегося FCIO (I): $\nu_1, \nu_2 \text{ и } \nu_3$, соотв. В спектре обнаружен также FCIO_2 , являющийся продуктом дальнейшего превращения I по схеме: $\text{FCIO} + \text{O} \rightarrow \text{FCIO}_2$ или $\text{FCI} + \text{O}_2 \rightarrow \text{FCIO}_2$. В работе использовался изотоп O^{18} . Проведен расчет нормальных кол. I. Для расчета использованы след. геометрич. параметры I: $r_{\text{FCI}} = 1,80 \text{ \AA}$, $r_{\text{Cl-O}} = 1,57 \text{ \AA}$ и $\angle \text{FCIO} = 120^\circ$. Отмечено, что $\nu_{\text{Cl-O}}$ I по частоте выше $\nu_{\text{Cl-O}}$ в свободном радикале ClO, что связывается с влиянием электроотрицательного атома F, понижающего электронную плотность на фрагменте ClO.

Х. 1974

N 19

Х-5-4803

⊕ ⊗

Енабу

Г. Кузьянц

FClO

39-XI-4024

1974

*4-4803

(Vi')

photochem

ClF + O₃

и.к., матрица

to the literature

138921j Matrix infrared spectrum and vibrational analysis of the chlorosyl fluoride intermediate. Andrews, Lester; Chi, Frank K.; Arkell, Alfred (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1974, 96(7), 1997-2000 (Eng). Photolysis of Ar matrix samples contg. ClF and O₃ with 2200-3600-Å radiation produced new absorptions at 1038, 593, and 315 cm⁻¹ which were assigned to the new FClO intermediate species. Secondary reactions produced the known FClO₂ mol. The obsd. Cl and O isotopic frequencies and band intensities identified isolated F-Cl and Cl-O stretching modes which defined the F-Cl-O structural arrangement.

C.A. 1974. 80. N24

серия!

40522.1921

Ph, TE, Ch

 ClOF_3 (ук. сущ.)

40534

Ox.

1974

2157

Bougon F., Huy T. Bui, Cadet A., Charpin P., Rousson R. Adducts of chlorine oxide trifluoride with group V element pentafluorides. Structural study of the hexafluoro anions.

"Inorg. Chem.", 1974, 13, N 3, 690-695
(англ.)

092 095

0 1 10 5000

ВИНИТИ

60206.3453

Ph, Ch, TC

30526GR

ClOF_3

1975

* 4-11798

Clark R.J.H., Ellestad O.H.

The vapour phase Raman spectra, Raman band contour analyses, Coriolis coupling constants, and c-species force constants for the molecules HCF_3 , ClCF_3 , BrCF_3 , and ICF_3 .
"Mol. Phys.", 1975, 30, N 6, 1899-1911
(англ.)

523 528

545

0553

ВИНИТИ

70420.54

Me1, Ch, TC

K⁺ ClO_4^- $14 \times 10^{-18} m$

1976

 $Cl^-(H_2O)_n$ not ϕ -value $\times 10^{-18} m$

k p. N 70420.50

Abraham Farid F., Mruzik Michael R., Pound G. Marshall. Thermodynamics and structure of hydrated halide and alkali ions. "Faraday Discuss. Chem. Soc.", 1976, N 61, 34-47. Discuss., 63-76
(ЕНГЛ.)

817 826 8 4 8 0857. mmk ВИННТИ

ClO_2F_2^-

1976

10 Б172. Средние амплитуды колебаний аниона ClO_2F_2^- . Baran Enrique J. Mittlere Schwingungsamplituden des ClO_2F_2^- -Anions. Kurze Mitt. «Monatsch. Chem.», 1976, 107, № 6, 1303—1305 (нем.; рез. англ.)

Рассчитаны средние амплитуды колебаний иона ClO_2F_2^- из данных по частотам колебаний с помощью метода «характеристич. колебаний». Полученные значения сопоставлены со ср. амплитудами колебаний др.

молек. фрагментов, содержащих связи $\text{Cl}-\text{O}$ и $\text{Cl}-\text{F}$. Результаты расчета обсуждены в терминах св-в связей молекул с внутригалогенными связями. Ю. Н. Пачченко

средние

амплит.

колебан.



Х, 1977, N10

ClO_2F_2^-

1976

86: 80959h Mean amplitudes of vibration of the ClO_2F_2^- anion. Baran, Enrique J. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, La Plata, Argent.). *Monatsh. Chem.* 1976, 107(6), 1303-5 (Ger). The mean amplitudes of vibration of the ClO_2F_2^- anion were calcd. by using known spectroscopic data. The results are briefly discussed and comparisons are made with other species contg. Cl-O and Cl-F bonds.

cf: Kbagp.
acc nacc.
Kallid.

C.A. 1977. 86 W12

60514.9172

Ch. EC

58811GR

ClF_3O_2

1976

#4-12836

Christe K.O., Wilson R.D., Gold-
berg I.B. Some observations on the reac-
tion chemistry of iodoxygenyl salts and
on the blue and purple compounds belie-
ved to be ClF_3O_2 . "J. Fluor. Chem.",
1976, 7, N 5, 543-549 (англ.)

593.594

21

0619

гиз

ВИНИТИ

60429.3732
Ch, TC

29848

1976

FClO^+

* 4-12814

Eachus Raymond S., Symons Martyn

C.R.

Unstable intermediates. Part CLXII. Electron spin resonance studies of ClOCl^+ , FClO^+ , and Cl_2^+ .

"J.Chem.Soc.Dalton Trans.", 1976, N 5,
431-434 (англ.)

0612 ПАМ

580 586

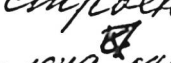
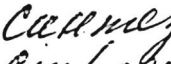
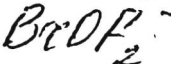
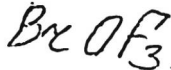
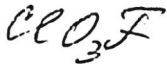
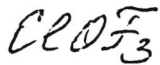
ВИНИТИ

1976

Д. 4 В16 Д. Изучение строения некоторых оксофторидов галогенов. Tantot Georges. Etude structurale de quelques dérivés oxyfluorés des halogènes. Thèse doct. sci. phys. Univ. Pierre et Marie Curie Paris, 1976. 229 p., ill. (франц.) -

Методами ИК- и КР-спектроскопии, ЯМР (F^{19} , O^{17}), рентгенографии, дифракции нейтронами на основе теор. расчётов. изучены оксофториды галогенов. Соединение ClO_2F (I) имеет пирамидальное строение в жидк., газ. и тв. состояниях, причем в жидк. и газ. фазах I ассоциирован за счет образования лабильных полимеров; для тв. фазы I определены сингония и вероятная ф. гр. Исследованы катион ClO_2^+ , анионы $ClO_2F_2^-$ и $BrO_2F_2^-$, а также соединения $ClOF_3$ (II) и ClO_3F (III). Установлено, что для II и III отсутствуют превращения в тв. состоянии и II ассоциирован в жидк. фазе (проведена только качеств. оценка). Теор. расчеты касались геометрии молекул в рамках метода ЛКАО-МО с учетом подхода метода отталкивания валентных электронных пар. Получена хорошая корреляция с эксперим. данными. На основе этого высказано предположение о существовании и возможности получения части $BrOF_3$, $BrOF_2^-$, $BrOF_4^-$, BrO_2F_3 и SO_3F^- .

Р. А. Лидин



с. 1949, №4 (71)

Focle

оттиски 6010

1948

14 Б44. Большие поправки к теореме Купменса и неэмпирический расчет потенциалов ионизации для ~~HOCl~~ FOCI и Cl₂O. Chong D. P., Herring F. G., Takahata Y. Prediction of large corrections to Koopmans' theorem and the ab initio vertical ionization potentials of HOCl, FOCI and Cl₂O. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1978, 13, № 1, 39—47 (англ.)

Т (кв. лх)
расчет

Показано, что наличие в молекулах HOCl, FOCI и Cl₂O (также как и в изученных ранее F₂O и HOF) низлежащих виртуальных σ -орбиталей приводит к большим поправкам к теореме Купменса для потенциалов ионизации (ПИ) с π -уровней. Такая же ситуация справедлива и для ПИ с σ -уровней. Вычисленные в рамках теории возмущений 2-го и 3-го порядков поправки к теореме Купменса улучшают значения вертикальных ПИ для молекулы Cl₂O в среднем на 1,0—1,5 эв. Для остальных систем вычисленные т. обр. значения ПИ

(+1) X

х. 1948, N 14

1978

ClF₄O⁻BrF₄O⁻IF₄O⁻

C.A. no. 1

88: 96846w Vibrational spectra and force fields of the tetrafluorooxohalate(V) anions tetrafluorooxochlorate(1-), tetrafluorooxobromate, and tetrafluorooxoiodate. Christe, Karl O.; Wilson, Richard D.; Curtis, E. C.; Kuhlmann, Werner; Sawodny, Wolfgang (Rocketdyne Div., Rockwell Int., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1978, 17(3), 533-8 (Eng). Improved syntheses are described for BrF₄O⁻ and IF₄O⁻ salts, and their vibrational spectra are reported. The spectra of CsBrF₄O are simpler than those previously reported for KBrF₄O and thus allow more reliable assignments. For comparison, the low-temp. Raman spectrum of CsClF₄O has also been recorded. Normal-coordinate analyses have been carried out for the ClF₄O⁻, BrF₄O⁻, and IF₄O⁻ anions and are compared to those of the structurally related HALF₄⁻ anions and HALF₃ mols. and those of XeF₄, XeF₄O, and XeF₅⁺.

(+2)



C.A., 1978, 88, N14

1979

 ClF_4O^- BrF_4O^- JF_4O^-

Р. Е. А. Кос

(+2) $\boxtimes$

2.1979, 122

22 Б214. Средние амплитуды колебаний тетрафтор-оксогалат (V) анионов: ClF_4O^- , BrF_4O^- и JF_4O^- .
 Baran E. J. Mittlere Schwingungsamplituden der Tetrafluorooxohalat (V)-Anione: ClF_4O^- , BrF_4O^- und JF_4O^- . «Monatsh. Chem.», 1979, 110, № 3, 715—719 (нем.; рез. англ.)

Вычислены средние амплитуды колебаний ионов XF_4O^- ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{J}$) в интервале т-р 0—1000 К. Средн. амплитуды связей $\text{X}-\text{O}$ ($\text{X}=\text{Cl}$ и Br) имеют примерно те же значения, что вычисленные ранее соотв-щие величины в молекулах ClO_2F и BrO_2F , хотя силовые постоянные связей $\text{X}-\text{O}$ в XO_2F и XF_4O^- довольно существенно различаются. Хотя силовая постоянная $\text{Cl}-\text{O}$ в ClF_4O^- существенно выше, чем при $\text{X}=\text{Br}$ и $\text{X}=\text{J}$ (9,38; 6,70 и 6,56 мдин/А соотв.), соответствующие средние амплитуды колебаний примерно одинаковы. Средние амплитуды колебаний связей $\text{X}-\text{F}$ близки к соотв-щим значениям в анионах XF_4^-

и XF_2^- . Во всех трех рядах анионов наблюдается сильная т-рная зависимость средн. амплитуд колебаний $\text{X}-\text{F}$. В исследованном ряду анионов XF_4O^- с увеличением ат. веса центрального атома наблюдается рост силовых постоянных $\text{X}-\text{F}$ и снижение амплитуды соотв-щих колебаний. Амплитуды несвязанных «коротких» пар $\text{F}\dots\text{F}$ (угол 90°) выше, чем соотв-щие значения для «длинных» пар (угол 180°); в 1-м случае величины согласуются с данными по XF_4^- , во 2-м — с результатами по XF_2^- . Амплитуды $\text{F}\dots\text{O}$ практически не изменяются при изменении X .

Е. Разумова

1979

 ClF_4O^- BrF_4O^- IF_4O^-

91: 81157k Mean vibration amplitudes of tetrafluoroox=ohalate(V) anions: ClF_4O^- , BrF_4O^- and IF_4O^- . Baran, Enrique J. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *Monatsh. Chem.* 1979, 110(3), 715-19 (Ger). Mean amplitudes of vibration of the title anions were calcd. in the temp. range between 0 and 1000 K, using recently reported spectroscopic data. The results are briefly discussed and some comparisons with related species are made.

C. J. Baran

A. M. G. G.

K. A. G. G.

(12)

A

C. J. Baran, G. M. G.

ClOF

1980

Баришев А. В. и др.

Аб

Изв. АН СССР. Сер. хим. н.,
1980, № 9, 1963-71.

● (с ClO₂F) III

FClO^+

1980

Hinshcliffe A.

структ.
и электр.
св-ва

J. mol. Struct., 1980,
63, n1, 141-144.

• see OCl_2^+ ; III

1981

ClO_3F
 $\text{ClO}_2\text{F}, \text{ClOF}$

3 Б1175. Масс-спектрометрическое определение термодимических характеристик хлор-, фтор-, кислород-, азотсодержащих газообразных молекул и радикалов. Балусев А. В., Горохов Л. Н., Росоловский В. Я. «12-й Менделеев. съезд по общ. и прикл. химии. Реф. докл. и сообщ. № 3». М., 1981, 198

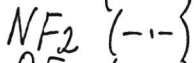
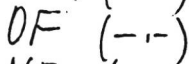
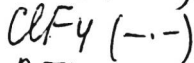
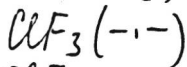
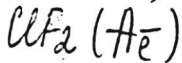
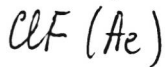
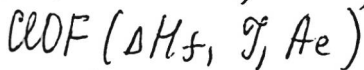
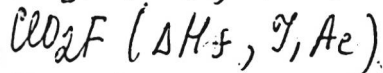
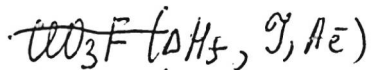
$\Delta H_f^\circ, \gamma, A_e$
~~Обзор~~

Масс-спектрометрическим методом измерены энтальпии образования $\text{ClO}_3\text{F}, \text{ClO}_2\text{F}, \text{ClOF}, \text{ClO}_2, \text{OF}$, электронное сродство $\text{ClF}_4, \text{ClF}_3, \text{ClF}_2, \text{ClF}, \text{ClO}_2\text{F}, \text{ClOF}, \text{ClO}_3, \text{ClO}_2, \text{OF}, \text{NF}_2, \text{OF}_2$, потенциалы ионизации $\text{ClO}_3\text{F}, \text{ClO}_2\text{F}, \text{ClOF}, \text{ClO}_3, \text{ClO}_2, \text{OF}, \text{NF}$ энергии разрыва связи $\text{F}-\text{ClO}_3, \text{F}-\text{ClO}_2, \text{F}-\text{ClO}, \text{O}-\text{ClO}_2\text{F}, \text{O}-\text{ClOF}, \text{O}, \text{O}-\text{ClOF}, \text{OF}-\text{ClO}_2, \text{OF}-\text{ClO}, \text{OF}-\text{Cl}, \text{OF}-\text{O}, \text{O}-\text{F}, \text{F}-\text{ClF}_4, \text{F}-\text{ClF}_3, \text{F}-\text{ClF}_2, \text{F}-\text{ClF}, \text{F}_2\text{N}-\text{NF}_2, \text{F}_2\text{N}_2-\text{F}_2, \text{F}_3\text{N}_2-\text{F}, \text{F}-\text{NF}_2, \text{F}-\text{F}, \text{F}-\text{N}$. Из резюме

(419)

см. на обороте

X. 1982, 19, N3.



ClF_3O

1981

Christe K.O., et al

Inorg. Chem., 1981, 20,
N1, 296-297

exam.
vol.

● (see IF_5) III

ClF_3O

молекула.
не измерена

1981
Christo K.O. et al.

Inorg. Chem., 1981,
20, N1, 296-297.

● (ср. SF_4 ; III).

FClO_3

Вм. 12225

1981

2 Д630. Обобщенное валентное силовое поле перхлорилфторида. The general valence force field of perchloryl fluoride. Christie K. O. L., Curtis E. C., Sawodny W., Härtner H., Fogarasi G. «Spectrochim. acta», 1981, A37, № 7, 549—556 (англ.)

Получены ИК-спектры ($1300\text{--}400\text{ см}^{-1}$) газообразных молекул FClO_3 (I) и молекул I, изолированных в матрицах Ne, N_2 и Ar при $t \approx 6\text{ K}$. С учетом изотопич. смещения частот колебаний I ($^{35}\text{Cl}\text{--}^{37}\text{Cl}$) проведен колебательный анализ спектров I. Вычислены значения констант кориолисова взаимодействия ряда колебаний I. Методом *ab initio* выполнен расчет констант вал. силового поля I. Показано, что колебания ν_2 и ν_3 I. могут быть представлены в виде асим. и сим. комбинаций вал. кол. связи Cl—F и деф. кол. группы ClO_3 соот-

Di, M. A.,
Сен. Лосм;

Ф. 1982, 18, № 2.

ветственно. Обсуждены параметры 13 моделей силового поля I. Отмечено эффективное взаимодействие колебаний в I. Значения силовых постоянных ковалентных связей $\text{Cl}-\text{F}$ и $\text{Cl}=\text{O}$ в I составляют 9,76 и 3,49 мдин/Å соответственно. Библ. 47.

И. В. А.

Ommuck 13268

1981

FClO_3^-

Masegawa A., Williams F.

соедин,
сильные-
ра

J. Amer. Chem. Soc., 1981,
103, 7051-7054.

FClO_3

1981

μ ,
по дипольно-
моментам

/ 94: 214896m Polarity and polarizability of some perchloryl compounds. Vereshchagin, A. N.; Vigalok, I. V.; Aleksandrova, L. K.; Petrova, G. G. (Inst. Org. Fiz. Khim. im. Arbuzova, Kazan, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* 1981, (2), 257-61 (Russ). Dipole moments, μ , and polarizabilities of FClO_3 , perchlorylbenzene, *m*-nitroperchlorylbenzene, and *m*-aminoperchlorylbenzene were detd. The μ value of FClO_3 in CCl_4 soln. differs from that in gas phase. The polarizability ellipsoids of FClO_3 , perchlorylbenzene, and C-ClO_3 group were also detd.

C.A. 1981, 94 N26

ClO_4F

1982

Appelman Evan M.,
Basile, Louis J., et al.

Vi

Inorg. Chem. 1982, 21 (7),
2801 - 2804.

( cen. SO_4F^- ; III)

ClO_3OF

от. 14984

1982

5 Б237. Перхлорат фтора. Колебательные спектры, силовое поле и термодинамические свойства. Fluorine perchlorate. Vibrational spectra, force field, and thermodynamic properties. Christie Karl O., Curtis E. C. «Inorg. Chem.», 1982, 21, № 8, 2938—2945 (англ.)

ν_i , см. пост.

Измерены ИК-спектры поглощения ($200\text{--}4000\text{ см}^{-1}$) ClO_3OF в газообразном и тв. состояниях и изолированного в Ne и N_2 матрицах, а также спектры КР жидк. ClO_3OF и р-ра его в HF (Ar⁺ лазер, 4880 Å). Определены все 12 фундаментальных частот колебаний молекулы (симметрия C_s). Значения частот (в см^{-1}): колебания симметрии A' — ν_1 (асим. ClO_3 , r) = 1302, ν_2 (сим. ClO_3 , r) = 1049, ν_3 (O—F, D) = 885, ν_4 (Cl—O, R) = 677, ν_5 (ClO_3 деф. зонт.) = 599, ν_6 (δ асим. ClO_3 , α) = 529, ν_7 (δ в плоск. ClO_3 , β) = 379, ν_8 (δ в плоск. ClOF , γ) = 230; колебания симметрии A'' — ν_9 (асим. ClO_3 , r) = 1295, ν_{10} (δ асим. ClO_3 , α) = 563, ν_{11} (δ внепл. ClO_3 , β) = 385, ν_{12} (τ , Cl—OX) = 127. В спектрах наблюдался

48

X. 1983, 19, N 5

целый ряд обертонов и составных полос, у многих по-
 лос обнаружено изотопное расщепление по хлору (до
 $14,5 \text{ см}^{-1}$). Полученные результаты сопоставляются с
 частотами колебаний молекул FCIO_3 , HClO_4 , DCIO_4 ,
 ClO_3OCl , Cl_2O_7 , ClO_3OBr , CF_3OF . Рассчитаны и даны
 приведенные по симметрии силовые постоянные и рас-
 пределение потенциальной энергии по нормальным ко-
 ординатам. Значения внутренних силовых постоянных:
 $f_r=9,52$, $f_{rr}=-0,01$, $f_R=2,38$, $f_D=3,51$, $f_{rR}=0,09$ (в
 мдн/А); $f_\alpha - ff_{\alpha\alpha}=1,62$ (A') и $1,55$ (A''), $f_f - f_{\beta'f}=1,54$
 (A') и $1,21$ (A''), $f_\gamma=0,99$, $f_{\alpha\beta} - f_{\alpha\beta'}=0,2$ (в мдн А/рад²)
 $f_{r\alpha} - f_{r\alpha'}=0,27$, $f_{r\beta} - f_{r\beta'}=0,35$, $f_{R\alpha}=0,218$ (в мдн/рад).
 Измерены ^{19}F ЯМР спектры ClO_3OF . Вычислены термо-
 динамич. функция ClO_3F (газ) и C_p^0 , $-(F_T^0 - H_O^0)/T$,
 S_T^0 , $H_T^0 - H_O^0$ для $T=0-2000 \text{ К}$. В. М. Ковба

ClO_3OF

(Ommuck 14984) 1982

' 97: 63311a Fluorine perchlorate. Vibrational spectra, force field, and thermodynamic properties. Christe, Karl O.; Curtis, E. C. (Rockwell Int. Corp., Canoga Park, CA 91304 USA). *Inorg. Chem.* 1982, 21(8), 2938-45 (Eng). IR spectra of gaseous, solid, and matrix-isolated ClO_3OF and Raman spectra of liq. ClO_3OF are reported. All 12 fundamental vibrations expected for the covalent perchlorate structure of symmetry C_s were obsd. and assigned. A modified valence force field was computed for ClO_3OF by using the obsd. ^{35}Cl - ^{37}Cl isotopic shifts, symmetry relations between the A' and the A'' block, and the off-diagonal symmetry force consts. of the closely related FClO_3 mol. as constraints. Previous assignments for ClO_3OCl , ClO_3OBr , ClO_3OCF_3 , Cl_2O_7 , and Cl_2O_8 are revised. The ^{19}F NMR spectrum of ClO_3OF was recorded, and thermodyn. properties were computed in the range 0-2000 K.

UK crkmp
b

deampuse,
CKP, Vi.

(+2) ☒

C.A. 1982, 97, N8.

$\text{ClO}_3\text{OF}(\text{r})$ (термоз. ф-ии)

II карт.

$\text{ClO}_3\text{OF}(\text{к})$ термоз. ф-ии

I карт.

ClF_3O

1982

Оттиск 18439

12 Б118. Строение в газовой фазе хлортрифтороксида ClF_3O . Oberhammer H., Christie K. O. Gas-phase structure of chlorine trifluoride oxide, ClF_3O . «Inorg. Chem.», 1982, 21, № 1, 273—275 (англ.)

геометр.,
структура

Электроннографическим методом в газ. фазе изучено строение ClF_3O , имеющего строение искаженной тригон. бипирамиды со след. геометрич. параметрами: длины связей (А) $\text{Cl}=\text{O}$ 1,405, $\text{Cl}-\text{F}_{\text{экв}}$ 1,603, $\text{Cl}-\text{F}_{\text{акс}}$ 1,713; углы $\text{OClF}_{\text{экв}}$ 108,9°, $\text{F}_{\text{экв}}\text{ClF}_{\text{акс}}$ 87,9°, $\text{F}_{\text{акс}}\text{ClO}$ 94,7°. Обсуждены стерич. эффекты отталкивания в экв. и акс. направлениях между двойной связью и неподеленной электронной парой хлора. С. С. Букалов

Х. 1982, 19, № 12.

ClF_3O

OMMUCK 13439

1982

структурн.
параметр

96:41330h Gas-phase structure of chlorine trifluoride oxide, ClF_3O . Oberhammer, Heinz; Christe, Karl O. (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Tuebingen, 7400 Tuebingen, Fed. Rep. Ger.). *Inorg. Chem.* 1982, 21(1), 273-5 (Eng). The mol. structure of ClF_3O was studied by gas electron diffraction. The mol. is trigonal bipyramid with the following geometric parameters; bond lengths Cl-O 1.405(3), Cl-F. 1.603(4), Cl-F. 1.713(3) Å; bond angles F.ClO 108.9(0.9), F.ClF. 87.9(1.2), F.ClO 94.7(2.0)°.

Steric repulsion effects in equatorial and axial directions for the double bond and the lone electron pair of chlorine are discussed. The position of the lone pair was derived from the ab initio calcs.

C.A. 1982, 96, N6.

ClOF

1983

Алексеев В. И., Фёдорова
Л. И. и др.

Дo Изв. АН СССР. Сер. хим.,
1983, N 5, 1084-1090.

(сер. ClD₃F; III)

OCLF

1983

Dekock R.L., Jasperse

G.P., et al.

геометр,
снпыктн.

J. Fluor. Chem., 1983,
22, N 6, 575-584.

($\text{Cu} \cdot (\overset{\bullet}{\text{Cl}} \text{ClF})^+; \text{III}$)

ClO_2F

1983

DONOVAN R. J., Fotakis C.,
et al.

He,
γ

Can. J. Chem., 1983, 61,
N5, 1023-1026.

● (env. CS; III)

FCD

[Om. 20765]

1984

Burdett J. K., Lawrence N. F.,
et al.,

Inorg. Chem., 1984, 23,
N16, 2419-2428.

электро-
отрицат.,
структура
и
связь в
молекулах.

$\text{ClOF} \rightarrow \text{FClO}$

1985

7 Б1096. Ab initio расчет силовых полей и частот гармонических колебаний изомеров ClOF и FClO . Першин В. Л., Чаркин О. П., Сергиенко В. И., Коцарь Е. В. «Применение колебат. спектров к исслед. неорган. и координац. соедин. 10 Всес. науч. совещ. Тез. докл.» Б. м., 1985, 25

потенц. крив.
(ClO , Cl^-)

Неэмпирическим методом ССП в двухэкспонентном базисе гауссовских функций с включением поляризац. функции на атоме Cl исследована потенциальная Пв перегруппировки $\text{ClOF} \rightarrow \text{FClO}$. Основным является изомер ClOF . На ~ 27 ккал/моль выше лежит конфигурация FClO . Для основного и возбужденного изомеров рассчитаны колебат. спектры. Изомеры разделены высоким потенциальным барьером, вершине к-рого отвечает циклич. структура ($\text{FClO} \sim 70^\circ$). Из резюме

X. 1986, 19, N 7.

ClF₃O

(Om. 31150)

1988

copyrpa,
neopem-
pacem

Bader R.F., Bellespie R.F.
et al.,

J. Amer. Chem. Soc. 1988.

110, 7329 - 7336.

A Physical ● Basis for the

VSEPR Model of Molecular
Geometry.

O₂ FCl

1988

108; 176165v Laser excited Raman spectrum and vibrational analysis of sulfuryl chloride fluoride. Mohan, S.; Payami, Feridoun; Kuttiappan, P. (Coll. Eng., Anna Univ., Madras, 600 025 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1988, 26(2-3), 81-2 (Eng). O₂FCl was prepd. and its laser Raman spectrum was recorded on a Cary model 82 grating spectrophotometer with an Ar⁺ laser source. The obsd. frequencies were assigned to the various modes of vibrations in terms of fundamentals and combinations assuming C_s point group symmetry. A vibrational anal. was carried out using general quadratic valance force field. The results are discussed.

(layer top. CIP)

C.A. 1988, 108, v20

FCO
COF

[OM. 31583]

1989

Зюбина Т.С.,

отобран.
и
струк-
тура

Ж. Меорган. Живые,
1989, 34, N5, 1340-1342.

FCIO
FOCl

1990

114: 171709q Ab initio study of the isomerization in the system fluorine chlorine oxide (FCIO)-fluorine oxychloride (FOCl). Pershin, V. L.; Boldyrev, A. I.; Charkin, O. P. (Inst. Khim., Vladivostok, USSR). *Zh. Strukt. Khim.* 1990, 31(4), 8-11 (Russ). The isomer configurations, and the transition-state cyclic configuration for intramol. transformation of FCIO are calcd. using the nonempirical Hartree-Fock-Roothaan method. The isomers force fields are obtained. The electron correlation effects are studied in the framework of the MP2 method.

pershin

C: A. 1991, 114, N18

FCIO

1990

23 Б1134. Неэмпирическое исследование изомеризации в системе $\text{FCIO} - \text{FOCI}$ / Першин В. Л., Болдырев А. И., Чаркин О. П. // Ж. структур. химии.— 1990.— 31, № 4.— С. 9—11.— Рус.

В рамках неэмпирич. метода Хартри—Фока—Рутана (ХФР) с двухэкспонентным базисом Хузинаги—Даннинага проведены расчеты (с полной оптимизацией геометрии) конфигураций альтернативных изомеров и циклич. конфигурации, отвечающей вершине барьера на пути внутримолек. перегруппировки молекулы FCIO . Барьер перегруппировки для основного и возбужденного изомеров высок и внутримолек. перегруппировка типа изомерии запрещена. По данным метода ХФР рассчитаны силовые поля обоих изомеров. В рамках теории возмущений Меллера—Плессета 2-го порядка (МП2) исследовано влияние корреляции электронов на энергию изомеризации, геометрию и силовые поля молекулы FCIO . Резюме

М.П.

Х. 1990, N 23.

FOCl

1994

6 Б1045. Расчет структуры и теплот образования FOCl и Cl₂O. A computational evaluation of the structure and heat of formation for FOCl and Cl₂O /Francisco Joseph S., Sander Stanley P. //Chem. Phys. Lett. .—1994 .—223 ,№ 5—6 .—С. 439—444 .—Англ.

Неэмпирически с учетом электронной корреляции (на уровне МП2, методов КВ и связанных кластеров с учетом одно- и двукратных возбуждений, а также квадратичного метода КВ с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений) исследованы FOCl и Cl₂O. Определены равновесные структуры; теплоты образования получены равными $19,3 \pm 2$ и $13,4 \pm 2$ ккал/моль при 298 К для Cl₂O и FOCl соотв. Рассчитанное значение теплоты образования близко к эксперим. величине для Cl₂O, для FOCl — значительно отличается от измеренного методом масс-спектрометрии.

Н. С.

М.П., Д.Н.

Х. 1995, № 6

Foll

1994

121: 92405d A computational evaluation of the structure and heat of formation for FOCl and Cl₂O. Francisco, Joseph S.; Sander, Stanley P. (Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91109 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 223(5-6), 439-44 (Eng). The structure of FOCl and Cl₂O have been investigated using state-of-the-art ab initio methods. Electron correlation methods that have been used are second-order Moller-Plesset perturbation theory (MP2), CI with single and double excitations (CISD), singles and doubles coupled-cluster theory (CCSD), and quadratic CI with single and double excitation along with perturbative corrections for triple excitation (QCISD(T)). The equil. structure has been detd. for FOCl and Cl₂O. The heat of formation for Cl₂O is estd. as 19.3±2 kcal mol⁻¹ and compares well with the exptl. detns.; for FOCl it is 13.4±2 kcal mol⁻¹ at 298 K. There is a major discrepancy between the theor. est. of the heat of formation of FOCl and that detd. exptl. from electron-impact/mass spectrometry.

Δ_fH, neopen
pacem

Ⓜ Cl₂O

C.A. 1994, 121, N 8.

FDCI

(OM 37546)

1994

FCD

Lee T. F.,

структура, J. Phys. Chem., 1994,
конформ. 98, 3697-3700
расчет, A Comparative Coupled-
н.н. Cluster Study of the XCl
and XClO (X=H, F, Cl)

Isomers: A Investigation of
Hypervalent Chlorine Compounds.

FClO_3

1994

(Di)

lek clem

/ 120: 283325s High-resolution infrared study of $\text{FCl}^{18}\text{O}_3$: rovib=
rational analysis of the ν_1 and ν_2 bands and ground state
constants. Meguellati, F.; Graner, G.; Burger, H.; Burczyk, K.;
Mueller, H. S. P.; Willner, H. (Lab. Phys. Mol. Appl., CNRS,
F-91405 Campus d'Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 164(2),
368-78 (Eng). The IR spectrum of $\text{FCl}^{18}\text{O}_3$ was recorded at
610-1170 cm^{-1} , using an FTIR spectrometer with a resolu. of 0.0024
 cm^{-1} . The ν_1 and ν_2 parallel bands (with band centers at 1011.107
and 708.235 cm^{-1} for the $\text{F}^{35}\text{Cl}^{18}\text{O}_3$ isotopomer and 1007.483 and
399.330 cm^{-1} for the $\text{F}^{37}\text{Cl}^{18}\text{O}_3$ isotopomer) were studied and their
resolved J and K structures were analyzed. A set of accurate mol.
consts. was detd. for the ground and $\nu_1 = 1$ and $\nu_2 = 1$ excited states
of both isotopic species which reproduce ca. 9700 obsd. lines with a
std. deviation of $\sim 1 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$. No perturbation was found at the
present level of accuracy.

C.A. 1994, 120, N 22

FOClO_3

(DM-38016)

1995

Bernd Casper, Hans-Georg

защиты-
спецквот Mack et al.,

J. Fluorine Chem., 1995,

71, 215

FOCl
FCIO

1995

123: 123718f A computational study of dissociation pathways in the FOCl-FCIO system. Francisco, J. S.; Sander, S. P. (Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91109 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 241(1,2), 33-8 (Eng). Ab initio MO calcns. have been carried out to det. the relative stabilities and decompn. pathways of FOCl and FCIO. Second-order Moeller-Plesset perturbation theory along with quadratic CI and Brueckner doubles including perturbational corrections of connected triple excitation (BD(T)) methods are used. It is found that FCIO is more stable than FOCl. An examn. of the potential energy surface for the reaction of oxygen atoms with FCl shows that only FCIO should be produced. This is consistent with the exptl. observation from matrix studies.

meop. paper
DMA. cmadun

C.A. 1995, 123, N10

FOOL

[Om. 38384]

1996

Francisco J. S.,

J. Phys. Chem., 1996,
100, N 25, 10826

Additions and Corrections.

cinamua J. S.
Theoretical

Francisco :
Characterization

FOOC: Implications for
the Atmospheric Chemistry bet-
ween FOOx and ClOx species.

(page 5651) $\rightarrow$ J. Phys. Chem., 1994,
98, 5687.

$^{19}\text{F}^{35/37}\text{Cl}^{16}\text{O}_2^{18}\text{O}$

1996

$^{19}\text{F}^{35/37}\text{Cl}^{16}\text{O}_3$

124: 214795r Microwave Fourier transform spectroscopy of perchloryl fluoride: $^{19}\text{F}^{35/37}\text{Cl}^{16}\text{O}_3$ and $^{19}\text{F}^{35/37}\text{Cl}^{16}\text{O}_2^{18}\text{O}$. Muller, Holger S. P.; Gerry, Michael C. L. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Z1). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 175(1), 120-32 (Eng). ^{18}O -enriched, monolabeled perchloryl fluoride, $^{19}\text{F}^{35/37}\text{Cl}^{16}\text{O}_2^{18}\text{O}$, has been synthesized. Its rotational spectrum has been studied in the 4-22 GHz region. In addn., the spectra of the sym. isotopomers $^{19}\text{F}^{35/37}\text{Cl}^{16}\text{O}_3$ have been reinvestigated. Rotational and centrifugal distortion consts., as well as chlorine nuclear quadrupole and chlorine and fluorine spin-rotation and spin-spin coupling consts., have been detd. for the ground vibrational state. The ground state rotational data have been used to evaluate geometrical parameters. The harmonic force field has been refined. The results are compared with data of related mols.

(y8 creep)

C.A. 1996, 124, 116

FOCl⁺
FCIO⁺

(meop.
pacem, $\Delta_f H$)

128: 184869f Post-Hartree-Fock study on FOCl⁺ and FCIO⁺.
1998

✓ Francisco, Joseph S. (Department of Chemistry and Development of Earth and Atmospheric Sciences, Purdue University, West Lafayette, IN 47907-1393 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(2), 659-663 (Eng), American Institute of Physics. Equil. geometries have been optimized and harmonic vibrational frequencies obtained for each of the cationic structures of FOCl⁺ and FCIO⁺ at various levels of theory, employing second-order Moeller-Plesset perturbation interaction theory (MP2), singles and doubles excitation CI theory (CISD), and coupled-cluster theory with perturbative triple excitations [CCSD(T)]. Of the ions, FCIO⁺ has the lowest energy structure, with an energy sepn. of 25.7 kcal mol⁻¹. The adiabatic ionization potential for HOCl is used to calibrate the values for FOCl and FCIO₂. From the calibration the probable uncertainty in the adiabatic potentials for the formation of FCIO⁺ and FOCl⁺ is estd. The adiabatic ionization potentials for the formation of FCIO⁺ and FOCl⁺ are estd. as 246.9 ± 3 kcal mol⁻¹ and 267.7 ± 3 kcal mol⁻¹, resp.

C.A. 1998, 128, N15

ClOF_2^+

1998

129: 10084b Raman spectra and structural features of ClOF_2^+ cation in a solution of anhydrous HF. Nabiev, Sh. Sh.; Ostroukhova, I. I.; Revina, N. V.; Sukhanov, L. P. (Russian Scientific Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia 123182). *Russ. Chem. Bull.* 1998, 47(3), 417-422 (Eng), Consultants Bureau. The Raman spectra of ClOF_2^+ cation in solns. of anhyd. HF were studied. In the $\text{ClOF}_2^+\text{HF}_2^-$ and $\text{ClOF}_2^+\text{BF}_4^-$ -HF systems, this cation exists as a pyramidal structure (C_s symmetry), while in the $\text{ClOF}_2^+\text{AuF}_6^-$ -HF system, it exists as a planar structure (C_{2v} symmetry). Based on nonempirical calcns. by the Hartree-Fock-Roothaan method, an explanation for the dependence of the structure of the ClOF_2^+ cation on the nature of the anion was proposed. For the Cl-O bond vibrations, the correlation functions of vibrational and rotational relaxations were calcd., and the characteristic times of these processes were detd. The main contribution to the formation of the band contours corresponding to the above-mentioned modes is made by the vibrational dephasing.

(CSP, CNYK)

C. A. 1998, 129, N 1

FCIO
FOCl

01.39975

1999

Мульт. А.
СООМОСН,
НОМЕРЫ. Ф-III,
МОПЕМ. ПАУС

130: 187437r A CASSCF-MRCI study of the electronic excited states of FCIO and FOCl. Li, Yumin; Francisco, Joseph S. (Department of Chemistry and Department of Earth and Atmospheric Sciences, Purdue University, West Lafayette, IN 47907-1393 USA). *J. Chem. Phys.* 1999, 110(5), 2404-2409 (Eng), -American Institute of Physics. The potential energy curves for the low-lying excited states of FCIO and FOCl have been computed using the complete active space SCF (CASSCF) with cc-pVTZ basis sets. The vertical excitation energies for the excited states were calcd. using the multireference CI (MRCI) method with cc-pVTZ and cc-pVTZ+sp basis sets. The vertical excitation energies were also obtained using the EOM-CCSD (equation of motion-coupled-cluster single double) method with cc-pVTZ basis sets. Results show that Rydberg character is not present in the excited states studied here for both FCIO and FOCl. For FCIO, all the excited states studied are repulsive along the F-Cl coordinate, but some of the excited states are bound along the Cl-O coordinate. For FOCl, all the excited states studied are dissociative along both the F-O and O-Cl coordinates.

C.A. 1999, 130, N14

F: FC10

P: 3

132:83969 Infrared spectroscopy and molecular properties of chlorosyl fluoride, FC10. Muller, H. S. P. Zulpicher Strasse 77, I. Physikalisches Institut, Universitat zu Koln Koln 50937, Germany Chem. Phys. Lett., 314(5,6), 396-402 (English) 1999 The structure of the very reactive, yet fairly long-lived, FC10 mol. has been detd. exptl. for the first time. Anal. of the high-resoln. IR spect its .nu.1 band provided the spectroscopic const. needed. FC10 was obtai the main product of the reaction between ClF3 and H2O under slow-flow conditions. A preliminary anal. of the .nu.2 band and a comparison of th structural properties with those of related mols. are also presented.

of. 40006

1999

C.A. 2000, 132

2001

F: ClF3O

P: 3

134:331903 Spin-coupled description of the chemical bonding to hypercoordinate chlorine. Cooper, David L. Department of Chemistry, University of Liverpool, Liverpool, UK. Theor. Chem. Acc. (2001), 105(4-5), 323-327. in English

Modern valence bond theory, in its spin-coupled form, is used to investigate the nature of the bonding in hypercoordinate chlorine fluorides. In each of ClF_2^+ , ClF_3 , ClF_4^+ , ClF_5 and ClF_3O the description that emerges is of very polar two-center two-electron bonds. The orbital picture is fairly transferable from one system to another: the differences between "normal octet" and hypercoordinate species, or between cations and neutrals, are relatively small.

FCIO3

2001

135:263800z The $\nu_6 = 2$ states of the four C_{3v} -symmetry isotopomers of FCIO3. Graner, G.; Burczyk, K. (Laboratoire de Photophysique Moléculaire du CNRS, UPR 3361, Université Paris-Sud, F-91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 2001, 208(1), 51-63 (Eng), Academic Press. High-resoln. IR spectra of the four isotopomers of FCIO3 of C_{3v} symmetry have been analyzed in order to obtain data on overtones of the ν_6 vibrational mode. For $\nu_6 = 2$, two different approaches have been used. The component with $l_6 = 0$ has been studied by the anal. of the $2\nu_6^0$ parallel band at 809 cm^{-1} and 779 cm^{-1} for the species with ^{16}O and ^{18}O resp. But since the $2\nu_6^2$ perpendicular band is too weak to be obsd., the component with $l_6 = \pm 2$ was reached through the hot band $2\nu_6^{\pm 2} - \nu_6^{\pm 1}$. Thereafter, the energies of the $\nu_6 = 2$, $l_6 = 0, \pm 2$ states were fitted to three slightly different models. The mol. parameters obtained are highly consistent, not only between the two components, but also with $\nu_6 = 1$ and moreover from one isotopomer to the other. This work is supplemented by a short vibrational anal. of the parallel hot bands $3\nu_6 - 2\nu_6$, $4\nu_6 - 3\nu_6$, $5\nu_6 - 4\nu_6$, and $6\nu_6 - 5\nu_6$ which form a regular sequence. (c) 2001 Academic Press.

(UK chemist)

C.A. 2001, 135, 118

FCD

[DM 41603]

2002

Holger S.P. Müller
et al.,

J. Chem. Phys., 2002,
116, N6, 2407-2416.

The molecule $\bullet^2$ properties
chlorosyl fluoride,

FCD, as determined from
the ground-state rotational
spectrum.