

24-CL.

1987

$\text{RuCl}_3 \cdot aq$
 $\times 3\text{H}_2\text{O}$
 ИК-спектр

$\text{Ru}(\text{H}_2\text{O})_3\text{Cl}_3$

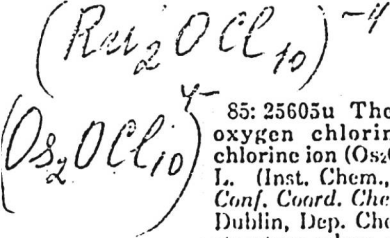
24 Б105. Об инфракрасных спектрах изомеров трехвалентного трихлоротриакворутения. Durig J. R., McAllister W. A., Mercer E. E. On the I. R. spectra of the isomers of trichlorotriaquoruthenium (III). «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1967, 29, № 6, 1441—1447 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000—250 \text{ см}^{-1}$) кристаллических *транс*- и *цис*-трихлоротриакворутения (I) при -78° . Отнесение спектров основано на том, что *транс*-I имеет симметрию C_{2v} и в его ИК-спектре должны быть активны 6 колебаний скелета ($4A_1 + B_1 + B_2$), в то время, как в спектре *цис*-I, имеющего симметрию C_{3v} , активны 4 колебания скелета ($2A_1 + 2E$). Приведено следующее отнесение полос (см^{-1}): *транс*-I — вал. кол. $\text{Ru}-\text{OH}_2$

х. 1967. 24

470 и 439 см^{-1} , вал. кол. $\text{Ru}-\text{Cl}$ 314 и 291 см^{-1} ; *цис-I*—вал. кол $\text{Ru}-\text{OH}_2$ 432 см^{-1} и, по-видимому, плечо при 440 см^{-1} , вал. кол. RuCl 315 см^{-1} и плечо при 311 или 302 см^{-1} . Большая ширина контуров наблюдаемых полос вероятно связана со случайным наложением полос скелетных колебаний. Колебаний H_2O : вал. кол.—широкая полоса в области 3000 см^{-1} , деф. кол.—1600 (*транс-I*) и 1610 (*цис-I*) см^{-1} , маятн. кол.—780 (*транс-I*) и 870 (*цис-I*) см^{-1} , всерные кол.—545 (*транс-I*) и 578 (*цис-I*) см^{-1} .

Ю. В. Киссин



1974

85: 25605u The electronic structure of the ruthenium oxygen chlorine ion $(Ru_2OCl_{10})^{-4}$ and osmium oxygen chlorine ion $(Os_2OCl_{10})^{-4}$; Jezowska-Trzebiatowska, B.; Sztternberg, L. (Inst. Chem., Univ. Wroclaw, Wroclaw, Pol.). *Proc. Int. Conf. Coord. Chem.*, 16th, 1974, R16, 3 pp. (Eng). Univ. Coll., Dublin, Dep. Chem.; Dublin, Ire. The results of the electronic structure calens. of the $[Ru_2OCl_{10}]^{-4}$ and $[Os_2OCl_{10}]^{-4}$ ions carried out by the self consistent charge and configuration methods are reported.

Кб. уеа.
раетем



C.A. 1976. 85 N4

RuCl₄

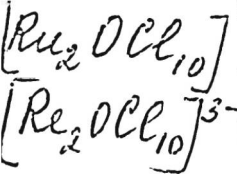
XIV-7439

1976

Müller A., Königer F.,

et. n. J. Mol. Struct., 1976,

30, N 1, 195-199.



9, Б181. Изучение с помощью электронных и инфракрасных спектров поглощения, и резонансных спектров комбинационного рассеяния, μ -оксо-декахлордиметаллатов $[Ru_2OCl_{10}]^{4-}$, $[Re_2OCl_{10}]^{3-}$ и родственных ионов. Campbell J. R., Clark R. J. H. Resonance Raman, infra-red, and electronic spectral studies of the μ -oxo-decachlorodimetallate species, $[Ru_2OCl_{10}]^{4-}$ and $[Re_2OCl_{10}]^{3-}$, and related ions. «Mol. Phys.», 1978, 36, № 4, 1133—1148 (англ.)

Измерены электронные и ИК- (до 60 см^{-1}) спектры поглощения, а также резонансные спектры КР комплексов $K_4[Ru_2OCl_{10}]$ и $Cs_3[Re_2OCl_{10}]$, проведено разделение контуров перекрывающихся линий КР, рассчитаны частоты нормальных колебаний анионов. Предложено новое отнесение нек-рых частот колебаний. В обоих случаях найдены 6 прогрессий при комн. т-ре и 8 — при 80 К, причем все прогрессии образуются с участием симм. вал. колебания $\nu(MOM)$ (ν_1, a_{1g}). Самой длин-

и. к. спектр

и. и. сел. и др.

(+1) 8

1978

15434

Отмисл

2.1979, №9

ной прогрессией в каждом случае является $\nu_1\nu_1$, к-рая достигает $\nu_1=12$ (Ru) и 14 (Re). Определены спектроскопич. константы ω_1 , ω_g , x_{12} , x_{13} , x_{14} , x_{19} и x_{99} . Силовой коэф. F_{12} , связанный с колебанием ν_{Mo} (8,60 и $6,84 \times 10^2$ см $^{-2}$ для Ru и Re соотв.), довольно высок; наблюдается сильное смещение аксиальных координат a_{1g} . Совокупность полученных данных позволяет заключить, что резонансный электронный переход является аксиально поляризованным $\pi^* \leftarrow \pi$ переходом π -связанной системы M—O—M.

Т. Б. Ченская



1980

Campbell J. R., et al.

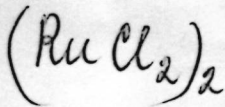
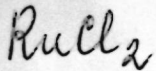
J. Chem. Soc., Faraday

Trans. 2 1980, 76(9), 1103-18

Di



1980



Электр.
строение

10 Д103. Электронное строение димеров рутения(II) с двойными хлоридными мостиками. Electronic structure of dichloro-bridged ruthenium. II. Dimers. Vela Alberto, Garritz Andoni. — Proceedings of the International Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, Collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 10—20, 1980. — «Int. J. Quantum Chem.», 1980, Quantum Chem. Symp. № 14, 191—200 (англ.)

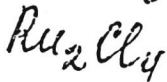
В рамках спин-поляризованного Хаффа метода рассеянных волн исследовано электронное строение линейного RuCl_2 (I) и его димера с двумя мостиковыми атомами Cl симметрии D_{2h} (II). Приведены распределения электронной плотности и энергии спин-орбиталей. В обоих случаях основными найдены высокоспиновые состояния — $^5\Delta_g$ для I и $^9B_{1g}$ для II — как и для двухатомных молекул переходных металлов. II является слабосвязанным. Отмечено, что все известные димеры Ru с хлоридными мостиками являются диамагнитны-

Ф. 10. 1981

ми, что объяснено тем, что сами хлоридные мостики являются высокоспиновыми и не очень сильно связывающими и присутствие других лигандов, вызывающих сильное расщепление d -орбиталей металла понижает полный спин системы. Сделан вывод, что стабильные димеры с галогидными мостиками могут быть получены только в том случае, когда к металлу присоединены мягкие π -электронодонорные и/или π -акцепторные лиганды.

В. Л. Лебедев

1980

Электрон.
Строение

У. 1981, N 19

19 Б39. Электронное строение димеров дихлоррутения (2+) с мостиковыми связями. Vela Alberto, Garritz Andoni. Electronic structure of dichloro-bridged ruthenium (II) dimers. Proceedings of the international Symposium on Atomic, Molecular, and Solid-State Theory, collision Phenomena, Quantum Statistics, and Computational Methods, Flagler Beach, Fla, March 10—20, 1980. «Int. J. Quantum Chem.», 1980, Quantum Chem. Symp. № 14, 191—200 (англ.)

Спин-неограниченным методом ССП рассеянных волн (РВ) рассчитано электронное строение мономера RuCl_2 ($D_{\infty h}$) и димера Ru_2Cl_4 (D_{2h}), в котором атомы Ru

полагались связанными посредством образования мостиковых связей с атомами Cl. Расчеты проводились в приближении усеченных атомных сфер метода РВ с использованием $X_{\alpha\beta}$ приближения для обменного потенциала. Основными состояниями мономера и димера являются высокоспиновые состояния $^5\Delta_g$ и $^9B_{1g}$ соотв. В мономере наблюдаются большие значения спинового расщепления d -МО металла и малые расщепления МО лигандов, что указывает на локализацию спина на атоме Ru. Как в мономере, так и в димере установлено

полное заполнение МО с проекцией спина α и неполное заполнение МО с проекцией спина β , имеющих разрыхляющий характер и образованных d -АО металла. Для димера рассчитано также электронное строение состояния 1A_g . Энергия состояния 1A_g превышает энергию состояния $^9B_{1g}$ менее, чем на 1 эВ. Оба состояния являются связанными относительно диссоциации на 2 мономера с энергиями связи 56,8 и 37,3 ккал/моль для состояний $^9B_{1g}$ и 1A_g соотв. При образовании 2 связей $Ru-Cl$ значения энергий связи 28,4 и 187 ккал/моль для состояний $^9B_{1g}$ и 1A_g являются малыми для простых связей, так что мостиковая структура димера является слабосвязанной. Анализ полученных результатов, а также тот факт, что известные димеры $Ru(2+)$ являются диамагнитными, указывает на то, что стабильные димеры галогенидов Ru с мостиковыми связями могут быть образованы только если σ -донорные мягкие лиганды и/или хорошие π -акцепторы непосредственно связываются с атомами металлов.

И. А. Тополь

$[RuCl_6]^{2-}$

1984

1 Б1135. Спектроскопия резонансного комбинационного рассеяния $[RuCl_6]^{2-}$ и $[RuBr_6]^{2-}$. Исследование колебательного и электронного комбинационного рассеяния. Resonance Raman spectroscopy of $[RuCl_6]^{2-}$ and $[RuBr_6]^{2-}$. Studies of the vibrational and electronic Raman effect. Clark R. J. H., Dines T. J. «Mol. Phys.», 1984, 52, № 4, 859—870 (англ.)

ν_i

Изучены резонансные спектры КР $[Ph_4P]_2[RuCl_6]$ (I), $[Ph_4As]_2[RuCl_6]$ (II), $K_2[RuCl_6]$ (III), $Cs_2[RuBr_6]$ (IV) и $[Bu_4N]_2[RuBr_6]$ (V) в тв. состоянии и в р-рах. В спектрах проявлялись прогрессии обертонов и составных тонов с участием колебаний $\nu_1(a_{1g})$, $\nu_2(t_g)$ и $\nu_5(t_g)$ ионов $[RuCl_6]^{2-}$ и $[RuBr_6]^{2-}$. Кроме того, в спектрах наблюдали линии (902, 1529, 1850 cm^{-1} для $[RuCl_6]^{2-}$ и 750, 950 и 1850 cm^{-1} для $[RuBr_6]^{2-}$), относящиеся к электронным переходам. Вид контуров возбуждения этих линий хорошо согласуется с электронными спектрами поглощения ионов. Поляризац. соотношения в спектрах КР указывают на то, что для обоих ионов в р-рах симметрия основного состояния $\Pi_1/{}^3T_{1g}$. А. В. Бобров

(4) 

Х. 1985, 19, N 1.

$[RuCl_6]^{2-}$ [O.M. 22322] 1985

Ковидан.
спектр

Campbell N.J., Davis V. A.,
Griffith W.P., et al.,
J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1985, N8, 1673-
-1675.

(DM. 31268)

1988

Miskowski V. M.,
Loehr T. M. et al.,

Di(Ru-Cl)
(в крист.)

Inorg. Chem., 1988, 27,
N 26, 4708-4712.

$RuCl_3$

1994

Pollini I.

Phys. Rev. B. 1994.

Электрон.
структ.

50, N 4. C. 2095-2103.

(сеч.  $CrCl_3$; III)

1994

F: RuHCl

P: 3

6B146. Смешанные трехатомные молекулы гидрид-галогенидов переходных металлов второго переходного ряда. 2nd Row transition metal mixed hydride halide triatomic molecules / Siegbahn P. E. M. // Theor. chim. acta. - 1994. - 88, N 6. - С. 413-424. - Англ.

PMX 1997

$RuCl_2$

1994

Siegbahn Per E. M.

свободн.
и структ.,
теор. расчёт

Theor. Chim. Acta

1994, 87 (6), 441-52

● (сч. YH_2 ; III)

1285

F: RuCl₃

P: 3

5Б2240. Исследование фотоэмиссии с угловым разрешением из валентных зон RuCl₃. Angle-resolved photoemission investigation of the valence bands of RuCl₃ / Carricaburu B., Mamy R., Pollini I. // Phys. status solidi. B. - 1995. - 187, 1. - С. 141-148. - Англ.; рез. фр. Методом рентгеновской и УФ фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением исследована электронная структура слоистого соединения RuCl₃. Измерены кривые распределения энергии вдоль различных направлений в зоне Бриллюэна. Обсуждена природа валентных зон RuCl₃ с привлечением данных по электронной структуре RuO₂.