

In F6

IrF₆ (V_i)

BP-VI-814

1955

Mattraw H.C., Hawkins N.J.,
Carpenter D.R., Sabol W.W.

J.Chem.Phys.1955, 23, N5,985-986.

Infrared spectrum of iridium
hexatluoride.

RX.,1955, 51252

J

F.

1956

VI-812

SF_6 , SeF_6 , MoF_6 , TeF_6 , WF_6 , ReF_6 , IrF_6 ,

UF_6 , NpF_6 , PuF_6 ($\checkmark$ и, силовые постоянные)

Venkateswarlu K., Sundaram S.,

Z.phys.Chem(BRD), 1956, 9, N 3-4, 174-179.

Вычисление силовых постоянных молекул
типа XY_6

RX., 1957, N10, ~~ВНИИ~~
33557. J.

Est/F.

Есть ф. к.

XF СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ)

VILYB 1958

X=S, Se, Te, Mo, W, U, Re, Ir, Hf, Pu.

Califano S.

Atti. Accad. naz. Lincei. Rend. Cl. sci. fis.,
mat. e natur., 1958, 25, II 5, 284-291.

СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ ГЕКСАФТОРИДОВ.
Р.Х., 1959, № 21,

73864

1958

ВР VI-813.

SF_6 , SeF_6 , TeF_6 , ReF_6 , IrF_6 , MoF_6 ,
 WF_6 , UF_6 , NpF_6 , PuF_6 , TiCl_6^{2-} , SbCl_6^{2-} ,
 SnCl_6^{2-} , SbBr_6^{2-} , SnBr_6^{2-} , (СИЛОВЫЕ ПОСТОЯНН.

Pistorius C.W.Föt.

J.Chem.Phys., 1958, 29, N6, 1328-1332.

Потенциальное поле и силовые постоянные октаэдрических молекул.

RX., 1959, N13, 44807

Ж.

Est/F.

ЕСТЬ Ф. И.

VI-46

1959

μ_6 (СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ)

M=Mo, W, Re, Os, Jr, Pt, U, Np, Pu
Claassen H.H.

J. Chem. Phys., 1959, 30, N 4, 968-972.

СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ ГЕКСАФТОРИДОВ
МЕТАЛЛОВ.

RX, 1960, N5, 16586.

ЕСТЬ Ф. И.

Be

F6

1960

IrF₆

5B178. Поиски эффекта Яна — Теллера в IrF₆. Claassen Howard H., Weinstock Bernard. Search for a Jahn-Teller effect in IrF₆. «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 2, 436—437 (англ.).—Исследование колебательного спектра IrF₆ указывает на отсутствие аномалий в поведении полосы σ_2 , наблюдаемых ранее в спектрах OsF₆ и ReF₆ и интерпретированных как следствие эффекта Яна — Теллера. Дано следующее отнесение частот (в см^{-1}) полос, полученных в ИК-спектре паров IrF₆ в области до 15 μ : 720 (σ_3), 852 ($\sigma_2 + \sigma_6$), 921 ($\sigma_2 + \sigma_4$), 1364 ($\sigma_2 + \sigma_3$) и 1425 ($\sigma_1 + \sigma_3$). Полученные значения частот основных колебаний хорошо согласуются с имеющимися в литературе. В спектре комб. рас. раствора IrF₆ в $n\text{-C-F}_{36}$ отчетливо наблюдается полоса при 651 см^{-1} , отнесенная к полосе σ_2 .

К. Василевский

ф. 1961.5

2017-VI .

1962

WF₆, ReF₆, OsF₆

IrF₆, PtF₆

(kol. post.ctruktura)

Goodman G.L., Weinstock B., Fred M.

Infernát. Sympos. Molec. Struct. and spec-
trosc. Tokyo, 1962, SI, B102/1-B102/2

Vibronic interactions in metal hexafluoride
molecules.

PJX, 1964, 135133

J.

747
(XF₆, *vgl*

X= S, Se, Te, Mo, W, 1963
Re, Os, Ir, ⁶Pt, U, Np, Pu)

Di(unobere norm.)

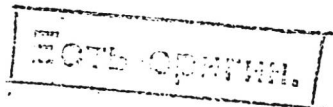
Kimura M., Kimura K.

J.Molec.Spectrosc., 1963, 11, N 5,
368-377 ()

The mean - square amplitudes of ...

P., 1964, 8D62

10



3487-VI

2090-VI
1963

SF₆, SeF₆, TeF₆, MoF₆, WF₆, UF₆,

NpF₆, PuF₆, ReF₆, OsF₆, IrF₆, PtF₆

(complete ion., 9i)

Nagarajan G.

Bull. Soc. chim. belg., 1963,
72, N 3-4, 276-285 (англ.)

Potential field and force constants of some octahedral XY₆ type molecules

PX., 1964, 4 B32

10

Есть оригинал.

VI-2091 1963

W₆ (SF₆, SeF₆, TeF₆, MoF₆,
WF₆, UF₆, NpF₆, PuF₆, ReF₆, OsF₆,
IrF₆, PtF₆)

Nagarajan G.

Bull. Soc. chim. belg., 1963, 72, N 7-8,
537-59.

Mean amplitudes of vibration of some
octahedral XY₆ type molecules.

RX., 1964, 7534

J

Est/orig.

XY, Z_6 (mol.post.)

A-893

1964

SF_6 , SeF_6 , TeF_6 , MoF_6 ,

FcF_6 , RuF_2 , RhF_6 , WF_6 , ReF_6 , OsF_6 , IrF_6 ,

PtF_6 , UF_6 , NpF_6 , RuF_6 (V, sil.post.)

Meisingseth E., Brunvoll J., Cyvin, S.I.

Kgl.norske vid.selskabs skr, 1964, N7, 49.

Normal-coordinate analysis of rotation-vibration of octahedral XY_6 and Z_6 molecular models with application to $15XY_6$ molecules.

RX., 1966, 13/153 J

9-547

VI-2171-1965

SF_6 , SeF_6 , FeF_6 , PoF_6 , CrF_6 , MoF_6 ,
 WF_6 , UF_6 , TeF_6 , FeT_6 , N_pF_6 , RuF_6 , XeF_6 , OsF_6 ,
 PuF_6 , RhF_6 , IrF_6 , PtF_6 (Vi)

Weinstock B., Goodman G.L.
Advan.Chem.Phys, 1965, 9, 169-316.
Vibrational properties of hexafluoride
molecules.

CA, 1966, 64, N6, 7388g

10

1966.

VI-4038

Ae (WF₆, FeF₆, OsF₆, IrF₆, PtF₆,
AuF₆)

Bartlett N., Beaton S.P., Iha N.K.

Chem. Commun., 1966, N6, 168-69.

Oxidizing trends in the third-transition-
series hexafluorides.

RX. 1966, 18B209.

J

11966

Vi, curable ones (VF_6 , S_2F_6 , TeF_6 , MoF_6 ,
VII 71 | WF_6 , TaF_6 , ReF_6 , RuF_6 ,
 OsF_6 , RhF_6 , IrF_6 , PtF_6 , UF_6 ,
 NpF_6 , PuF_6)

Nagaranjan G.

Indian J. Pure and Appl. Phys., 1966, 4, no.
237-243 (review)

Mean amplitudes of thermal motions
and shrinkages of chemical bonds;
rotational transfer modes.

Proc. Amer. Phys. Soc., 1967, 85, 38

W

16

И. М. Thakur S. N., D. Rai D. K. 1966

J. Molec. Spectrosc., 19, 14, 341.

Синтетическое
генераторное вещество

(И. М. = S).

1968

IrF₆

12 Б158. Колебательно индуцированные прогрессии в электронном спектре гексафторида иридия. Brand J. C. D., Goodman G. L. Vibronically induced Jahn — Teller progressions in the electronic spectrum of iridium hexafluoride. «Canad. J. Phys.», 1968, 46, № 15, 1721—1724 (англ.)

спектр

Спектр поглощения паров IrF₆ между 0,7 и 1,3 м состоит из трех электронных переходов из основного состояния Γ_{3g} в состояния Γ_{6g} , Γ_{8g} и Γ_{7g} конфигурации $(5d_{t_{2g}})^3$. В первом приближении эффект Яна — Теллера приводит к расщеплению состояния Γ_{8g} , тогда как для состояний Γ_{6g} и Γ_{7g} , включающих магнитное

X. 1969. 12

крамерово вырождение, не может быть расщепления за счет электростатич. сил. В соответствии с этим в спектрах не наблюдается расщепления для состояний ν_{2e_g} и $\nu_{5f_{2g}}$, но для ν_5 наблюдается короткая прогрессия за счет дипольноразрешенной колебательной части этих переходов. Эти прогрессии рассмотрены с точки зрения ангармоничности Яна—Теллера, к-рая может быть обусловлена примесью нечетных, орбитально вырожденных электронных состояний. Резюме

Ir Fe - рецепторуга [BФ 6289-VI] 1968

Cyvin S.J., Bruuvoll J., Müller A.

(м. 17.
ссыл. 1205)

Acta Chem. Scand. 1968, 22
2739 - 2741

молек. вес, сум. вес (GeCl₄, OsO₄, 1968)

BP - VI 5384

RuO₄, GeF₄, BF₃,

SO₃, RuF₆, WF₆,

IrF₆, PtF₆, SeF₆, ReF₆,

Kabaciglu R., Müller A.

Z. Naturforsch., 1968, 23a, 1310 - 1312/ka

Einfache Formeln zur Abschätzung
von Coriolis-Kopplungskonstanten G
zur Massenabhängigkeit von J -Werten.

Ruqy, 1969, 30172

10

(9)

15

Bp-VI 4265

12 ~~10000000~~

1968

Cur. nos (SF₆, SeF₆, TeF₆, MoF₆, TcF₆,
RuF₆, RhF₆, WF₆, ReF₆, OsF₆,
IrF₆, PtF₆, UF₆, NpF₆, PuF₆)

Kim H., Souder P.A., Claassen H.H.

J. molec. Spectrosc., 1968, 26, n1, 46-66 (encl)

Molecular force fields of octahedral
XF₆ molecules.

RuX₄, 1969, 2553

10

9

compounds ($W F_6$, $Os F_6$, $I_2 F_6$, 1968
 $U F_6$, $Np F_6$, $Pu F_6$) 5380

Kimura M., Schomaker V., Smith D. W.,
Weinstock B.

J. Chem. Phys., 1968, 48, 49, 4001 - 4012

Electron-diffraction investigation (a.u.)
of the hexafluorides of tungsten,
osmium, iridium, uranium, neptunium
and plutonium.

Pu X-ray, 1968, 55100

W 9

SF_6 , SeF_6 , TeF_6 , WF_6 , ReF_6 , OsF_6 , IrF_6 , PtF_6 , 1968.

UF_6 , NpF_6 , PuF_6 , PtCl_6 , PdCl_6 (any. way.)

Venugopalwarlu K., Devi V.M., VI 4853 ~~12~~ $\frac{2}{2}$
6

Cur. Sci., 1968, 37 (13), 370-1

Urey-Bradley force field of some
15

XY_6 systems



C.A. 1968, 69, 14, 54442p.

Vi, (W F₆, Re F₆, Os F₆, Ir F₆, Pt F₆) ¹⁹⁶⁹

Claassen H. H., Selig H. ^{7 6}
VI 6935

Israel. J. Chem, 1969, 7, N 4, 499-504
(over)

Raman spectra of 5d transition
metal hexafluorides in the
vapor state.

Proc. X-ray, 1970, 115358

W

5
(6)

IrF_6

1969

Murrell y.N.

curr. noem.

J. Chem. Soc., 1969,

A, v 2, 297

[Cur. MoF_6] III

SeF_6

Kaiser E. W. at all 1970

J. Chem. Phys. 1970,
58(4), 1411-12

exp-pa

● (cur. SF_6) III

Te F₆

Thakur S.N., Miss, u gp. | 1970

cur. uoef.

Indian J. Pure and
Appl. Phys.,

8, N4, 196

(Cell. SF₆) III

~~MoF₆, WF₆, ReF₆, OsF₆, PtF₆, UF₆,
PuF₆, (ZrF₆, Cs₂(ZrCl₆), K₂(OsCl₆),
K₂(PtCl₆); E. TcF₆, RuF₆, IrF₆,
Cs(NbCl₆); Cs(TaCl₆); K₂(ReCl₆): VII 6297
Cs₂(ReCl₆); Cs₂(OsCl₆); K₂(IrCl₆);
K₂(PdCl₆); Cs₂(PdCl₆); Cs₂(PtCl₆);
Cs(NbBr₆); Cs₂(ReBr₆); Cs(TaBr₆)
Cs₂(PdBr₆); K₂(PtBr₆) (di, am. nos.)
phan dinh Quyen, Kовруков А.Б.,
Дипл. учени. Жет-сана сакто -
сакан. 1971, 15, N 1, 81-85
10 (92) CA 71~~

TrF_6^-

Criste, Karl O.

1973.

curr.
no cur.

"Inorg Chem."

1973, 12 (7), 1580-7.

• (curr. ClF_6^+ ; III)

40402.9018

TE, Ch

IrF₆

46505 02

1973

1961

Nagarajan G., Adams^m T.S. (see SF₆; III)
Shrinkages of the internuclear distances in some hexafluorides of octahedral symmetry. "Monatsh. Chem.",
1973, 104, N 6, 1607-1622

(англ.)

0075 1111

056 058

0008

ВИНИТИ

RuF_6^{n-}

1973

Sawodny W., Bitar M.,
7th Int. Symp. Fluorine Chem.,
Santa Cruz, 1973, P-38.

Chenier,

Cis. No. 1

● (see RuF_6^{n-} ; III)

40529.6692

Ch, Ph, TC

IrF₆ 46505 GR 03назвем
кодебамми

1974

*45029

Baran E.J. Berechnung von mittleren Schwingungsamplituden einiger oktaedrischer Hexafluoride nach der Methode der charakteristischen Schwingungen. "Monatsh. Chem.", 1974, 105, N 2, 362-365 (нем., рез. англ.)

099 101

U 118 423

ВИНИТИ

TrF₆

ommene 3191

1974

XII-1417

Nagarajan G.

Adams T. S.

Cur. no. 1.

vi

Z. Phys. Chem.,

2 J₂-F
F-F

1974, 255, N5, 869-88

(cur. SF₆; III)

JzF₆

XII-1512

1975

Ramaswamy K., et al.

Acta chim. Acad. Sci. hung.
1975, 87, N1, 7-13.

(chem. uoer.)
vi

(all SF₆) III

Ir F₆

1975

Rytter &

расчет
пиковой
потенциальн.
и кинетич.
энергии.

Acta chim Acad sci hung"
1975, 85, №2, 147-151 (англ.
рус. рус.)

(см. Si A 4; III)

Tr FG-

1976

Pandey A.N., et al.

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

(суд. коэф.
сп. в. амм.
коэф.)

(all PFG-) III

70317.1538

Ph, TC

34469

In F₆

1976

* 15-17394

Pandey A.N., Sharma D.K., Verma U.P.,
Arora L.D., Gupta S.L., Singh B.P.
Study of molecular force fields by a new
approximation method. "Indian J. Pure
and Appl. Phys.", 1976, 14, N 10, 815-818
(англ.)

0832 пнк

793 793

823

ВИНИТИ

JvF₆

number 5595

1977

Ellis D. E., Rosen A.

Z. Physik, 1977,

y; comp

A 283, 3-10



(see. W F₆; III)

YrF_6

ammek 5792

1974

таблицы

и

Shimanouchi T.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 993-1102.

IrF₆
(kp)

(vi)

1978

89: 120134f Raman scattering of neat and mixed crystals of iridium fluoride (IrF₆): the Jahn-Teller interaction in the ground state. Bernstein, E. R.; Webb, J. D. (Dep. Chem., Colorado State Univ., Fort Collins, Colo.). U. S. NTIS, AD Rep. 1978, AD-A052754, 31 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1978, 78(14), 137. Raman scattering data for neat and mixed crystal IrF₆ samples at 77 K are reported. $\nu_2(\text{eg})$ And $\nu_5(\text{t}_{2g})$ both evidence nonvanishing Jahn-Teller interactions for the ground state. The linear Jahn-Teller parameters for these modes are $D_2 \leq 0.001$ and $D_5 = 0.02$. The ν_5 Jahn-Teller interaction is large enough to quench an expected exciton splitting of $\sim 1/20$ cm almost completely. The ν_2 Jahn-Teller interaction is small enough so that exciton interactions predominate; however, normal $\nu_2 k = 0$ sharp line exciton structure is not obsd. Anomalous phonon behavior is obsd. and discussed with respect to other hexafluoride phonon data. The non-Jahn-Teller active modes $\nu_1, \nu_3, \nu_4, \nu_6$ behave in a fashion consistent with other members of this series.



C.A. 1978, 29, 114

$J_n F_6$

ammuch 6478 1978

Bernstein E.R; et al.

E_i, J_i
сверх
нормал.

Mol. Phys., 1978,
35 (6), 1585-1607

IrF_6

[XII-1832a]

1978

Compton R.N., Reinhardt
P.W., et al.

Ae^- ;

J. Chem. Phys., 1978, 68,
N5, 2023-2036.

РЖХим., 1978, 18577.

Yr F6

Ommuck 15749,
ommuck 9988

1980

(Ae, Y)

Bloor F.E., Sherrod R.E.

J. Amer. Chem. Soc.,
1980, 102, N13, 4333 -
-4340.

meopem.
racem

IrF_6

1981

Manivannan G.,
et al.

сим. осей,
осей. цен-
тробежн.
растяж.

Indian J. Phys.,
[Part] B 1981, 55B (2),
171-174.

●
(см. SF_6 ; III)

GrF6

Ommuck 14444

1982

сильн. поем.
среднее
амплитуды
колеба-
ний

Chinnappan V.A.; Nata-
rajan A.,

Pramana J. Phys., 1982,
18, N6, 501-509.

Ir F₆ [Dm. 17963] / 1983

Ir F₆ - Gutsev G.L., Boldyrev A.I.

Ac, meopem. Chem. Phys. Lett.,
pacem. 1983, 101 (4-5), 441-445.

(cur. H_f F₆; III)

УрF₆ -

(ом. 20078)

1984

Гуцев Т. Л., Богдучрев
А. У.,

Электрон.
структура

Кoordинац. хим.,
1984, 10, вып. 11,
1455 - 1459.

SF6

com. 221251

1984

св. пост.,
средние
амплитуды
колебан.,
наблюдаем
частоты и
длины связей.
V_i, см. пос.

Sabapathy K.,
Ramamath R.,

Indian J. Phys., 1984,
B58, N 4-5, 464-472.

(см. SF6; III)

IrF₆

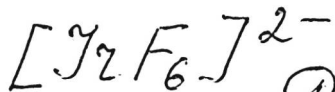
1985

Ogurtsov I. Ya., Ostrovski
V. L.

Mol. Phys., 1985, 54,
N1, 119-127.

●
(cer. VCl₄; III)

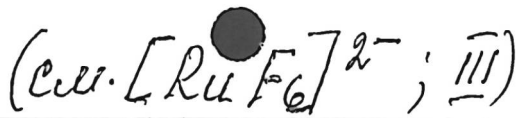
с. 17.



1985

Розаевич Н. Л.,
Тобкова Е. Ю., и др.

Докл. АН БССР, 1985,
сер. н. 29, N 10, 906-909.



YrF₆

DM. 29935

1988

УФ вакуум.
спектр
в
матриц.

Molloway G.H., Stan-
ger G., et al.,
J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1988, N5,

● 1341-1345.

GrF₆

от. 30899, а"

1988

Сугоров Л.Н., Коробов Л.В. и др.,

(Ае)

ж. Структур. химия,
1988, 29, № 51-57.

GrF₆

(OM 31483)

1989

Korobov M.V., Kuznetsov S.V.
et al.,

Ae

Int. J. Mass Spectrom. and
Ion Process. 1989, 87, n1;
13-27.

ИрФ

1990

Ежов Ю. С.,

Структура и энергетика
молекулы. Труды I Всесоюзного
совещания по изучению
структуры молекулы в газо-
вой фазе, ● Иваново, 1990.

и. п.

Y_2F_6

1991

Brisdon A. K.,
Molliman P. J. et al.

et al. J. Fluor. Chem. 1991.
54, N 1-3. C. 142.

(Cor. ● MoF_6 ; III)

ЛФ

1991

Ежов Ю. С.,

Л. П.

Тезисы докладов X Все-
союзного совещания по
квантовой химии,
Казань, 1991, 239.

IrF₆

1994

121: 216068t Spectroscopy of hexafluorides with an odd number of electrons: operators of interest for electronic spectroscopy and for the Jahn-Teller effect. Boudon, V.; Michelot, F.; Moret-Bailly, J. (Laboratoire Physique, Université Bourgogne, 21000 Dijon, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 166(2), 449-70 (Eng). A simplified model describing the electronic levels of a $(f_{2g})^n$ configuration is proposed. A new tensorial formulation for Jahn-Teller (linear, quadratic, ...) operators is developed. Particular attention is given to the case of electronic states with G' symmetry and to their vibronic structures. Calcns. and predictions are made for the a and e electronic states of IrF₆.

(cnekmp)

C.A. 1994, 121, N 18

IrF_6 .

1996

✓ 21Б1275. Спектроскопия гексафторидов с нечетным числом электронов. Вибронные полосы IrF_6 . Spectroscopy of hexafluorides with an odd number of electrons: The vibronic bands of IrF_6 / Boudon V., Rotger M., Avignant D. // J. Mol. Spectrosc.— 1996.— 175, № 2.— С. 327–339.— Англ.

Исследованы ИК-спектры поглощения в ближней ИК-области газообразного IrF_6 , предложено уточненное отнесение электронно-колебат. переходов для первых пяти электронных состояний IrF_6 . Для описания эксперим. данных развита модель, включающая упрощенный тензорный формализм описания линейных членов Яна—Теллера в четырехкратно вырожденном электронном состоянии молекул типа XY_6 . Г. М. Курамшина

М.П.

Х. 1997, № 2

IrF₆

1996

125:259972h Ultraviolet absorption spectrum of gaseous IrF₆ in the 200–500 nm region. Boudon, V.; Rotger M.; Avignant, D. (Lab. de Physique de l'Univ. Bourgogne (Unite associee au C.N.R.S.), Universite de Bourgogne, 21004 Dijon, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1996, 52A(10), 1175–1182 (Eng). The theory of the electronic transitions of iridium hexafluoride is briefly reviewed. The authors present the UV absorption spectrum of this mol. in the gas phase over the 20000–50000 cm⁻¹ region. Some new electronic transitions are obsd. Their phys. origin is discussed and some values of the $\nu_1(A_{1g})$ totally sym. stretching mode frequency in these highly excited electronic states are given.

УФ спектр
не использован

C.A. 1996, 128, N 20

IrF_6

1996

124: 214879w Spectroscopy of hexafluorides with an odd number of electrons: the vibronic bands of IrF_6 . Boudon, V.; Rotger, M.; Avignant, D. (Lab. Phys., Univ. Bourgogne, 21004 Dijon, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 175(2), 327-39 (Eng). The low resolu. absorption spectroscopy of the first five excited electronic states of IrF_6 has made possible some new assignments for the vibronic transitions of this mol., and the detn. of new vibronic parameter values. They are more accurate than those found in the literature. In this aim, we introduce a simplified tensorial formulation for the linear Jahn-Teller terms in a fourfold degenerate electronic state of an XY_6 -type mol., which allows easier computation of matrix elements and avoids the use of perturbation theory. Methods for IrF_6 synthesis (using a dynamical flow system) and purifn. are also presented.

(UK)

C.A. 1996, 124, N 16

IrF_6

1996

124: 214827c Spontaneous Raman scattering spectrum of gaseous IrF_6 in the ground electronic state. Rotger, M.; Boudon, V.; Nguyen, A. T.; Avignant, D. (Lab. Phys., Univ. Bourgogne, 21004 Dijon, Fr.). *J. Raman Spectrosc.* 1996, 27(2), 145-8 (Eng). The Raman spectrum of IrF_6 in the $100\text{--}730\text{ cm}^{-1}$ region was obsd. in the gas phase using argon laser excitation. New values for the $\nu_1(\text{A}_{1g})$, $\nu_2(\text{E}_g)$, $\nu_3(\text{F}_{2g})$ and probably $2\nu_4(\text{F}_{1u})$ band centers are given. The O, Q and S branch contours of the $\nu_2(\text{E}_g)$ band are described for the first time. The ground vibrational state population anal. allowed confirmation of the Ir-F bond length found in the literature. No evidence for a Jahn-Teller effect in the $\text{X}(\text{G}_g')$ electronic state was obsd.

(CKP, Vi)

C. A. 1996, 124, N 16

Ir F₆

1997

Richardson A. D.

Газ. Электро-
нография
ее структуры.
From. Diss. Abstr.
Int., B 1997, 58(2),
724.

( cell. WF₆; II)

F: IrF₆

P: 3

2000

133:50237 Gas-Phase Molecular Structures of
Third Row Transition-Metal Hexafluorides WF₆, ReF₆,
OsF₆, IrF₆, and PtF₆. An Electron-Diffraction an
Initio Study. Richardson, Alan D.; Hedberg,
Kenneth; Lucier, George M. Department of
Chemistry, Oregon State University Corvallis, OR
97331, USA Inorg. Chem., 39(13), 2787-2793
(English) 2000 • The mol. structures of WF₆,
ReF₆, OsF₆, IrF₆, and PtF₆ were measured by
electron diffraction from the gases, the last from
both PtF₆ itself and f a vapor assumed to consist
of a mixt. of O₂ and PtF₆ obtained by heating salt
O₂PtF₆. For models of Oh symmetry the bond lengths
in the 1st three members of the series are
essentially identical, but the Ir-F and Pt-F bo are
resp. ~0.01 and 0.02 A longer. Models of D_{4h}

C.A. 2000, 133

symmetry were also test for ReF₆, OsF₆, and IrF₆ in which operation of the Jahn-Teller effect is thought possible. For these models the same trend was seen in the av. bo length values. The effect of three-atom multiple scattering was also studied, and exptl. ests. of the effects of vibrational averaging (shrink on the distances were obtained. Normal-coordinate analyses based on the obsd. wavenumbers yielded stretching force consts. consistent with the us inverse bond-length/force-const. relation. Ab initio MO optimizations of mols. constrained to Oh symmetry were carried out at several levels of th and basis-set size. Less extensive optimizations of ReF₆, OsF₆, and IrF₆ with D_{4h} symmetry were also carried out. The best overall agreement with both the exptl. values and the distance trend for Oh symmetry was obtaine with the Hay-Wadt (n+1)VDZ basis on the metals and the aug-cc-pVTZ on the fluorines at the MP2 level, but these bases with B3P86 and B3PW91 d. functional theory were nearly as good and with B3LYP only slightly worse. The D_{4h} structures for ReF₆, OsF₆, and IrF₆ with the cited bases at the B level were slightly more stable (resp. 0.8, 2.6, and 1.4 kcal/mol) with t axial bonds shorter by ~0.04 Å in ReF₆ and 0.07 Å in OsF₆, but ~0.05 Å lo in IrF₆. The significance of these values is uncertain. The exptl. bond lengths (rg/Å) with estd. 2.sigma. uncertainties for the models of Oh symmetry are W-F = 1.829(2), Re-F = 1.829(2), Os-F = 1.828(2), Ir-F = 1.839(2), and Pt-F = 1.852(2); the Pt-F value from the O2PtF₆ sample was 1.851(2) Å. Although the exptl. data neither confirm nor refute the existence of the Jahn-Teller effect in ReF₆, OsF₆, and IrF₆, they ensure if present the distortion from Oh symmetry must be small.