

Ca Cl₂

CaCl₂

nummer 2480

1931.

Hedfeld K.

chemp

Z. Physik 1931, 68,
610-631.

Die Bandenspektren...



Immich 2477

1954.

Call₂

M. Schütte.

Chenip

Z. Naturforsch., 1954,
9a, 891-96.

1956

~~Cl₂ Ca~~
 Ca Cl₂
 Sr Cl₂

A. Weil-Marchand

Compt. rend 242 N°4, 179, 1956.

Смесь Раствора кристалл.
 изоморфной воды:

 $\text{CaCl}_2 \cdot \text{Ca} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и

 $\text{Cl}_2 \text{Sr} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

на основани еснаре дача
множеда откосятелно организаци
молетуйте вода.

CaCl₂

1957

182

Акимов Т. А.

Смирнов В. П.

структура

Кристаллография,
2, № 4, 475.

Гексамограф. послед
ствования молекул
намо- текидов Эл-Тов
II гр.



IX-1761

1957

MgF_2
 CaF_2
 MgBr_2

$\neq \angle x-y, \angle x-y-z$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{CaF}_2 \\ \text{CaBr}_2 \\ \text{CaCl}_2 \\ \text{CaI}_2 \end{array} \right.$

Акимов Т.А., Смирнов В.В.

Содомов Т.А., ~~Исмаилов В.В.~~

Р.с. физ. химии, 1957, 31-648-52

ЕСТЬ В.Н.

Р.Н., 1958, № 6900

10

A 671

1959

XY_2 ($X = \text{Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Zn, Cd, Hg,}$
 $Y = \text{F, Cl, Br, I}$) (Z , sil. post.)

Berry R.S.

J. Chem. Phys., 1959, 30, N 1, 286-90

Деформационные колебания в гало-
идамидах металлов II группы.

PJX., 1959, N 15, 52380
J.

Est.f.k.

IX 1895

1962

BeCl_2 ; MgCl_2 ; CaCl_2 ; SrCl_2 ;
 BaCl_2 (π)

Bracelet J.E., Barkerett C.B.,

J. Phys. Chem., 1962, 66, 1542

10 ЕСТЬ Ф. К.

P.X., 1962, 14393

CaCl_2

расчет
сум. пост.

1962
152

$(\text{Cu. ZnCl}_2)_{\text{III}}$

CaCl₂

ВФ-2630-IX 1962

Краснов К. С.

Максимов А. И.

См. пост.

М. Структ. химии

V_i

1962, 3 №6, 703-6

Call₂ (2)

Summick 1721.

1963

M.H.

L. Brewer, G. R. Somayajulu et al.
J. Chem. Rev. 1963, 63, III
THERMODYNAMIC PROPERTIES.....

1563

CaCl₂(aq) Bautista R.G., Margrave J.L.,J. Ph. Ch., 1963, 67, 2411Тензорезистивный CaCl₂Рассе-
яние света $ΔH_f = 75,3 \text{ ккал/моль}$ Средняя Эдгелл $\text{CaCl}_2 \sim 107 \text{ мк/моль}$ 200 микронизированное $\Delta^\circ(\text{CaCl}) = 63,36$ Пробитие $\Delta^\circ(\text{CaCl}) \approx 80 \pm 10$ Сили. (CaCl₂,
термостат)

Calc
stf

Ehrlich P., Peix R., Koch E. 1963
Z. Anorg. allgem. Chem., 324,
(3-4), 113

Thermochemical measurements
on the hydride halides of the
alkaline earth metals.

CA, 1964, 60, 6,
6273 sh

CaCl_2
 $\Delta H_{298}, P,$
 $\Delta H_f(\text{CaCl}_2)_{\text{cr}}$

Hildenbrand D L. 1963
Potter N D

J. phys. Chem., 1963, 67, 110,
2231-2232 (corr.).

The vapor pressure and thermodynamic
parameters of vaporization of calcium
chloride.

X, 1964, 18 5 393

$\Delta H_{298} = 73.3 \text{ u } 73.7$
 $(\text{III}) \quad (\text{V})$
 $\Delta H_f(\text{CaCl}_2)_{\text{cr}} = -116.7$
unpublished

IX-2749

Call, Call, Sell, Se Cl₂, BaCl₂,
(Do).

1963

Редова В. Г., Гурлов Н. В.,

Термодинамика высоких температур,
АН СССР, 1965, 3(4), 652-4

FD

Р.Физ., 1966, 30410

Call₂

Wharton L., Berg R.A.,
Klemperer W. O.

1963

Sympos. Molec. Struct. and
Spectrosc., Columbus 1963,
Columbus, Ohio, S.A., 76.

коллегиум записки
из. 22 - 22-706

(see. BaF₂) III

CaCl_2

Wharton L., Berg R.A.,
Klemperer W.

1963
203

-31

У.chem. Phys., 1963, 39, 2023 (N8)

Концентрация гидроксидов
и -земельных элементов.

(сое. BaF_2) III

8042-11-68

CaCl_2

BP-3044 - VI

1964

Heldenbrand D.L.

name

J. Chem Phys 1964, 40(11)
3438

(see ZnCl_2 ; II)

IX 1479

1965

M_{x2} (vi, vol M = Be, Ca, Sr, Ba, Mg)

x = ^avalence (F, Cl, Br, I)

Nagtrajan G.

Indian. J. Phys., 1965, 39, 19, 405-20

10

P.X., 1966, 22B153

Са А-А (автореферат) 1965

В. Т. Рябова

До

определения энергии диссоциации галогенидов и гидроокисей щелочноземельных металлов на основании спектроскопического исследования равновесия реакции в плазменных

КХН

Ca Cl₂ Работова В. П., Бурков А. В.

1965

Металлография. Высоких температур,
3, № 4, 652-654.

Изучением термической диссоци-
ции галогенидов металлов на
основании построения равнове-
сия реакции Виноникова. 3.

Термическая диссоциация Ca Cl₂, Ca Cl₂,
Sr Cl₂, Sr Cl₂, Ba Cl₂.

(см. Ca Cl₂).

авт. 17484

IX - 1191

1966

BeCl_2 , BeF_2 , BeBr_2 , BeI_2 , MgCl_2 , MgF_2 ,
 MgBr_2 , MgI_2 , CaF_2 , CaCl_2 , CaBr_2 , CaI_2 , SrF_2 ,
 SrCl_2 , SrBr_2 , SrI_2 , BaF_2 , BaCl_2 , BaBr_2 , BaI_2
(реометр. скуп-ра)

Hayes E.

J. Phys. Chem., 1966, 70, 3740-3742

РЖХ, 1967, 14559 10 ссылка опущ.

Vi (CaF_2 , CaCl_2 , SiF_2 , S_2Cl_2 , BaCl_2 ,
 BaF_2 , MgF_2 , CaBr_2 , CaI_2) 9
Байков В.И. IX 919

Оптика и спектроскопия, 1969, 27, №6, 923-929

Задачи волновых колебаний свобод-
ных молекул гетерогенных металлов
группы II A.

Рыков, 1970, 105252



14

10



CaCl_2

ommuu 7552

1969
no. 11

Hildenbrand D. L.

A.P., J
Do
In Press.
Int. J. Mass Spectrometry
and Ion Phys.
Electron Impact Studies of the
II A Metal ● chlorides.

CaCl_2

number 7551

Nov. 1969

Hildenbrand D. L.

In Press.

(20) Dissociation energies
and chemical Bonding in
the Alkaline - Earth Chlorides
for Mass Spectrometric Studies.

1970.

J, (MgCl, MgCl₂, CaCl, CaCl₂,
usu. cr. BaCl, BaCl₂) 9 IX 1088

Hildenbrand D. L.,

Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys,
1970, 4, 11, 25-33 (cont).

Electron impact studies of the
IIa metal chlorides.

EBD. P. M.

Purex, 1970, 19564

10

⊕

MgCl, CaCl, SrCl, BaCl (Do), *omn.* 557 1970
MgCl₂, CaCl₂, SrCl₂, BaCl₂ (D(ceM-cl), DM-cl)

Hildenbrand D. H., 87-1x1089

J. Chem. Phys., 1970, 52, N=11, 5751-2 (ans.)

Dissociation energies and chemical bonding in the alkaline-earth chlorides from mass spectrometric studies

10, 14 (D)

CM1970773, N6, 295546

CaCl, SrCl, BaCl, MgCl(2., 2H) | 1970
Ca⁺, CaCl⁺, CaCl₂⁺, Sr⁺, SrCl⁺, SrCl₂⁺,
Ba⁺, BaCl⁺, BaCl₂⁺, Mg⁺, MgCl⁺, MgCl₂⁺ (A.)

Hildenbrand D.L. IX 2287-9
J. Chem. Phys., 1970, 52, 111, 5573-5773 (and
Dissociation energies and chemical bonding
in the alkaline-earth chlorides from mass
spectrometric studies.

PJH Lucan, 1970
246643



M, 10



CaCl₂

спектр

в
матрице

стр - ра

РЖХ, 1972, 09

9 B247. Инфракрасные спектры и геометрия дихлоридов Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe и Ni. Hastie J. W., Hauge R. H., Margrave J. L. Infrared spectra and geometries for the dichlorides of Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, and Ni. «High Temp. Sci.», 1971, 3, № 3, 257—274 (англ.)

Измерены в области $33\text{--}1100\text{ см}^{-1}$ ИК-спектры поглощения дихлоридов Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe и Ni, ScCl_3 , TiCl_3 и TiCl_4 , изолированных в матрицах Ar и Ne при 15°K . Изотопич. смещение и правила отбора согласуются с линейной структурой $D_{\infty h}$ для всех дихлоридов (в пределах точности $\pm 10^\circ$ эксперим. определения валентных углов). При переходе от Ar матриц к Ne частоты полос в спектрах дихлоридов смещаются в среднем на 10 см^{-1} по сравнению со смещениями порядка 25 см^{-1} для соотв-щих дифторидов, что может быть связано с различиями в электронных конфигурациях хлоридов и фторидов. Для нек-рых хлоридов отмечены заметные эффекты ангармоничности. Б. В. Рассадин

(19) M

1971

29/10 - 01/02
39-11-198

CaCl₂

1971

4 Д430. ИК-спектры и геометрия дихлоридов Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe и Ni. Hastie J. W., Hauge R. H., Margrave J. L. Infrared spectra and geometries for the dichlorides of Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, and Ni. «High Temp. Sci.», 1971, 3, № 3, 257—274 (англ.)

(и к спектр)

В области 33—1000 см⁻¹ получены спектры молекул дихлоридов Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe и Ni, изолированных в матрицах инертных газов. Измерения сдвигов полос, вызванных изотопным замещением, и анализ правил отбора позволили сделать вывод о линейном строении ($D_{\infty h}$) исследованных молекул. Неопределенность величины угла между связями при этом составляет ~10°. В ряде случаев отмечено существенное влияние ангармоничности на величины изотопных сдвигов. Обнаружены различия строения и частот колебаний дихлоридов и дифторидов одних и тех же металлов. Зарегистрированы также спектры ScCl₃, TiCl₃, TiCl₄. Библ. 36. В. М. Шрайбер

В99-111-6162

ф. 1972. 42.

(+10)

☒

CaCl_2

Вар-3142-1X

1971

Do
энергия
атомов.

23 Б910. Взаимодействие галогенов и щелочноземельных элементов в пламенах смесей $\text{H}_2-\text{O}_2-\text{N}_2$. Schofield K., Sugden T. M. Interaction of halogens and alkaline-earth elements in $\text{H}_2+\text{O}_2+\text{N}_2$ flames. «Trans. Faraday Soc.», 1971, 67, № 4, 1054—1068 (англ.)
Измерены интенсивности излучения (I) резонансных линий ($^1P_1 \rightarrow ^1S_0$) щел.-зем. элементов (ЩЗЭ) в пламени богатых смесей $\text{H}_2-\text{O}_2-\text{N}_2$ при атмосферном давл. в зависимости от конц-ии добавленных в пламя галондов. ЩЗЭ вводились в пламя распылением соотв-щих р-ров. Конц-ия ЩЗЭ не превышала 1 частицы на 10^8 . Парц.



(+3)
(+1) IV, абу

X. 1971.23



давл. галоидосодержащих соединений в смеси (Cl_2 , хлороформ, Br_2 , бромистого этана) изменялось от 0,01 до 0,005 атм. В исследованных системах в основном образуются моногалогениды металлов при малой конц-ии галогенов; с понижением т-ры и повышением конц-ии галогена происходит заметное увеличение выхода нормальных дигалогенидов. Ввод галоидов в пламя сопровождается резким уменьшением интенсивности излучения ЩЗЭ. Определены термодинамич. параметры галогенидов ЩЗЭ, к-рые хорошо согласуются с результатами масс-спектроскопич. измерений. Г. И. Скачков

Call

BQP - 3142 - IX

1971

D₀

(w)

(132703u) Interaction of halogens and alkaline-earth elements in molecular hydrogen + molecular oxygen + molecular nitrogen flames. Schofield, K.; Sugden, T. M. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1971, 67(4), 1054-68 (Eng). By observing the effect of halogens on the resonance emission lines of the alk. earth elements in H + O + N flames, it was established that the great bulk of such elements becomes combined as gaseous mono- and dihalides. It was not possible to identify the nature of the monohalide formed, but it was established that no single monohalide is predominant and that the diat. halides, MX, apparent in the flame emission, are of minor importance. The latter finding explains satisfactorily the previous discrepancy between flame and mass-spectrometric detns. minations of $D_0(MX)$. It was verified that the predominant dihalide formed in these flames is the normal MX_2 . Values for $D_0(MX_2)$, the heat of atomization, were 211.1 kcal/mole for $CaCl_2$; 209.1, $SrCl_2$; 217.9, $BaCl_2$; and 190.1, $CaBr_2$, all ± 5 kcal/mole. The dichloride values are in excellent agreement with a recent mass-spectrometric investigation and with recalcd. thermochem. cycle values. RCTD

C.A. 1971. 74. 24

(+3) III
(+4) I (+1) III, copy



Ca Cl₂

B P - 4236 - IF

1972

Elizer I, Regur A.

empty

Coord Chem Res

1972, 9, N 1-2, 189-200
(anal.)

Di

CaCl_2

BP-4030-IX 1972

Eliezer J; Regel A.

Ann. Noct.
Socrem.

Theor. Chim. Acta,
1972, 26 N3, 283-88

Ca F_2 , Ca Cl_2 , Ca Br_2 , Sr F_2 , Sr Cl_2 , 56 / 14 | 1972
 Sr Br_2 , Ba Cl_2 , Ba F_2 , Ba Br_2 , Hg Cl_2 , Hg F_2 , Ei,
 Hg Br_2 , Pb F_2 , Pb Cl_2 , Pb Br_2 , Sn F_2 , Kopas
 Sn Cl_2 , Sn Br_2

1X ~~2000~~
 3930

Hamill W. H.,
 J. Chem. Phys., 1972, 56, N8, 4191-4194
 (ann.)

Single ion transitions in ionic
 diatomic molecules.

Bib. Phys. 1979, 9D152

10

CaCl , CaOH , CaCl_2 , CaOHCl , IX 4037 1972
 BaCl , BaOH , BaCl_2 , BaOHCl (D.)

Рядова В.Т., Хитров Л.Н., Турбин Л.В.
Теплофиз. высоких температур, 1972,
10, №4, 744-749

Спектрофотометрическое определение
Эксергии диссоциации оксидов. III. CaCl ,
 CaOH , CaOHCl , BaCl , BaCl_2 , BaOH , BaOHCl

Р.И. Хитров, 1973

15790

10, №4 (10)

ВФ-IX-4904

1973

Диалогичны Ca, Sr, Ba (структура,
кв. их расчёт)

Colson C. A.

Isr. J. Chem., 1973, 11(5), 683-90

CaCl_2

номер 1580 1973

Halkarni I. S. Serna S. E.

Semiempirical methods in molecules

"J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.",

1973, 6, III, 2377-2381.

мерка
када

CaCl_2

Nakatsugi Hiroshi

1973

"J. Amer. Chem. Soc."

1973, 95, N2, 354-61.

геом.
структ.

"форма молекулы в основном
и возб. состоянии."

● (см. BeH_2 ; III)

CaCl₂ (структ. парам., V_i , S_T^0) IX 4609 ¹⁹⁷³

White D., Calder G. V., Hemple
S., U. S. Nat. Tech. Inform. Serv., AD.,
Rep. 1973, N 765734/9, 30 pp.

10

Есть оригинал.

40301.7249

Ph, Ch, TE

Call₂ Vi, and. used.
40892
M. 9

1973

1829

White David, Calder G.V., Hemple S.,
Mann D.E.

Geometry and vibrational spectra of
the alkaline earth dihalides. III. MgCl_2 ,
 CaCl_2 , SrCl_2 , and BaCl_2 .

(см MgCl_2 III)

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 12, 6645-6651

(англ.)

0056-5858

ВИНИТИ

038 042

(см. MgCl_2 III)

CaCl_2

Автореферат

1974.
(к ф.-м. н.)

Байков В. И.

I_3, I_2

И. к. спектры поглощ.

паров гетероидов целоч.
и целочкозлы. металлов.

IX-4710

1974

CaCl₂ и гр. (D., реон сире)

Kim Y.S., Gardon R.G.

J. Chem. Phys., 1974, 60, VII, 4332-4344

• 10

серб опш

1974

Ca Cl₂

Ca Br₂

Риштров А. Н.

Авторизован к.х.и.

МДВ, 1974

и.и.

40402.3625

TE, Ch

Call

50701 02

1974

* 25-4339

Martinez de Pinillos J.V., Weltner W., Jr.
Molecular beam transition-state complexes investigated by ESR at 4°K. "Ber. Bunsenges. phys. Chem.", 1974, 78, N 2, 196-197
(англ.)

0076 мм

061 062

ВИНИТИ

CaCl₂

(по метрике
выбор м.п.)

1975
Встрет по научно-исслед.
работе.

"Электронограф. исследований
галогенидов щелочно-
земельн. металлов"

Руковод. Курьин А. В.

Енов Ю. С.
отв. исполн. Касаров В. В.

CaCl₂

1976

отв. ИВТАМ

отв. № 8. 1976 г.

отв. исл. Берман Г. А.
Ежов Ю. С.

(и. и.
Г. , Vi)

IX - 5386

1976

Review of, react. comp (BeF_2 , BeCl_2 , BeBr_2 ,
 BeI_2 , MgF_2 , MgCl_2 , MgBr_2 , MgI_2 , CaF_2 ,
 CaCl_2 , CaBr_2 , CaI_2 , SrF_2 , SrCl_2 , SrBr_2 , SrI_2 ,
 BaF_2 , BaCl_2 , BaBr_2 , BaI_2)

Guido M, Giger G,

J. Chem. Phys. 1976, 65, N4, 1397-1402/ann,

Ion model and equilibrium
configuration of the gaseous alkaline-
earth dihalides.

Proc. R.S.S., 1977, 351)

10 (9)

CaCl_2

1978

Hammer, C.A., et al.

J. Electron Spectrosc.

Relat. Phenom. 1978, 13(2),

149-51.

grosses.
energie.

ca. MgCl_2 - III

CaCl_2

common F278 1978
Kießling, Pohl & et al.

(7)

Z. Chem., 1978, 18 (9)
350 - 351.

Call₂ Madhus & Zyrka 1979

De Maria G., Spoliti M.
Centro di Studio per la
M.M. Termodinamica chimica
alle alte temperature.
(CNR)-CNR, Italy Univ. Roma
1979.

Tables: Spectroscopic properties
of inorganic molecules.

Call₂

оттиски 8664

1979

Drake M.C., et al.

сирок.

молени

√₂

J. Electrochem. Soc.
1979, 126(8) 1387-96

CaCl_2

ommureu 8683

1979

Hildenbrand D.L.

(Do)

J. Electrochem. Soc.,

1979, 126 (8), 1396 - 1400

CaCl₂

1979

структур-
ные па-
раметры,
М.П.

Отчет „Комплексное исследо-
вание термодинамических свойств
и молекулярных постоянных“,
МГУ, Химфак, 1981
(годовой отчет за 1979 год).

1979

CaCl₂

195: 141258p A laser-induced fluorescence study of the reaction calcium + carbon tetrachloride $\rightarrow$ calcium monochloride + carbon trichloride. Schultz, Arnulf; Schmidt, Walter (Fak. Phys., Univ. Freiburg, D-7800 Freiburg, Fed. Rep. Ger.). *Springer Ser. Chem. Phys.* 1979, 6 (Laser-Induced Processes Mol.), 236-8 (Eng). A laser-induced fluorescence study of the reaction $\text{Ca} + \text{CCl}_4 \rightarrow \text{CaCl} + \text{CCl}_3$ gives support to the previously reported results for the corresponding Ba reactions as being representative for other alk. earth reactions. The $A^2\Pi_{1/2,3/2}X^2\Sigma^+$ excitation spectrum is presented for the $\text{CaCl}_2 X^2\Sigma^+$ product mols. as obtained by the pulsed dye laser. Only very weak contributions from the $B^2\Pi-X^2\Sigma^+$ transition are also present, indicating that the electronic B-X transition moment must be much smaller than that of the A-X transition.

Laser-boj

Chem. sp

grajecy

C.A. 1981, 95, N16.

CaCl₂

Lammuca 8837

1979

Tossell J.A.

packet
for. cbrzy

Chem. Phys. Lett;

1979, 67 (2,3), 359-64



CaCl_2

1980

' 96: 75004v Electron-diffraction study of structure of molecules of alkaline earth metal chlorides and bromides. Al'tman, A. B.; Romanov, G. V.; Spiridonov, V. P. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Deposited Doc.* 1980, VINITI 4304-80, 11 pp. (Russ). Avail. VINITI. Because of wide discrepancies in literature data on mol. structure of alk. earth halides, the mol. structure of MX_2 ($\text{M} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) was redetd. by the electron diffraction method. Present results indicate that the electron diffraction method cannot unequivocally det. the geometry of mols. characterized by large vibrational amplitudes. Most probably, CaCl_2 , CaBr_2 , and SrBr_2 are linear, whereas SrCl_2 , BaCl_2 , and BaBr_2 are bent. This agrees with results of W. Klemperer, et al. (1964) and of M.E. Dyatkina and O.P. Charkin (1964).

структурн.
параметры
электроно
профили

(15)

~~CaBr₂~~, SrCl_2 , SrBr_2 , BaCl_2 ,
 BaBr_2

C. A. 1982, 96, N 10.

CaCl_2

Каенаров В.В.

1980

М. М.

Воскрес

Август. гуссы
на соежные поля
мечены кхит.

М., МТУ, 1980

Callz

1981

Алтынан А.Б.,

Равновесная химия и
внутриокислительные процессы
некоторых дигалогенидов
изменчивых металлов.
Автор реферат диссертации
на соискание ученой степени
к.х.н., Москва, 1981.

Call₂(2) [Dm. 24989]

1981

Margittai M.,

2M-cl

Inorg. Chim. Acta,
1981, 53, L 111 - L 112.

CaCl₂

1982

Mase Y., Takahata Y.

открытия, An. Acad. Bras. Cienc.
мелом.
рацем 1982, 54 (3), 501-6.

(сер. CaF₂; III)

CaCl_2

1984

10 Л1039. Определение дипольного момента основного состояния CaCl_2 из измерений лазерного микроволнового двойного резонанса в молекулярном пучке. Determination of the ground-state dipole moment of CaCl from molecular-beam laser-microwave double-resonance measurements. Ernst W. E., Kindt S., Nair K. P. R., Törring T. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1984, 29, № 3, 1158—1163 (англ.)

Впервые проведены прецизионные измерения дипольного момента основного состояния CaCl_2 методом лазерного микроволнового двойного резонанса в молекулярном пучке. Из исследования двух колебательных состояний найдена зависимость: $\mu = \mu_0 + \mu_1(v + 1/2)$. Получены значения $\mu_0 = 4,257(3)$ ед. Дебая и $\mu_1 = 0,016(3)$ ед. Дебая. Показано, что для определения дипольного момента из данных по измерению сдвига положения отдельных уровней сверхтонкой структуры в электрич. поле требуется диагонализация полной энергетич. матрицы. Обсуждена проблема применимости ионной модели Риттера к щелочноземельным моногалоидам. Библ. 29.

А. М. Ткачук

Дипольный
момент

ср. 1984, 18, N10

CaCl_2

1984

Galli G., Tosi M. P.

Int. Cent. Theor. Phys.

Int. Atom. Energy Agency

[Prepr.], 1984, n. 51, 23 pp.,
ill.

Резюме
и. н.,
реферат;
смысл.

(с. н. MgF_2 ; III)



[Om. 20 062]

1984



Meyer H.-Z., Schultze Th.
et al.,

интеракт.
поперечн.
сечения

Chem. Phys., 1984, 90,
N1-2, 185-194.

CaCl₂

[Om. 35600]

1984

Pogrebnoi A.M., Kudin L.S.
et al.,

Translated from Fizicheskoi.
(Kp,SH) Khimii, 58, 2129-2143 (1984)

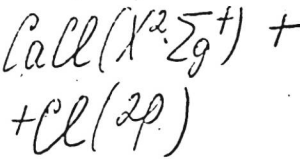
CaCl₂

(om. 22494)

1985

Томков И.С., Беляев В.Н.,
Васильков И.Г. и др.

(3) Ж. структура. химии,
1985, 26, № 24-34.



сечения
потенциальной
поверхности

X. 1985, 19, № 23

1985

|| 23 Б1079. О реакции $\text{Ca}(^1S) + \text{Cl}_2(^1\Sigma_g^+) \rightarrow \text{CaCl}(X^2\Sigma_g^+) + \text{Cl}(^2P)$. On the Reaction $\text{Ca}(^1S) + \text{Cl}_2(^1\Sigma_g^+) \rightarrow \text{CaCl}(X^2\Sigma_g^+) + \text{Cl}(^2P)$. Honjou N., Yarkony D. R. «J. Phys. Chem.», 1985, 89, № 13, 2919—2923 (англ.)

Рассчитаны сечения потенциальной поверхности р-ции $\text{Ca}(^1S) + \text{Cl}_2(^1\Sigma_g^+) \rightarrow \text{CaCl}(^2\Sigma_g^+) + \text{Cl}(^2P)$, отвечающие конфигурациям ядер симметрии $C_{\infty v}$ и C_{2v} . Расчет проведен методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к одной главной конфигурации. Использовано приближение эффективного остоного потенциала (для K и L оболочек Cl). Базис сгруппированных гауссовых ф-ций включал наборы $(14s12p5d)/[8s7p3d]$ для Ca и $(4s4p1d)/[3s4p1d]$ для валентных электронов Cl. МО получены многоконфигурац. методом ССП с усреднением по трем нижшим состояниям (с весами 0,9; 0,05 и 0,05). В рамках симметрии $C_{\infty v}$ при сближении Ca и Cl₂ энергия понижается;

перенос заряда происходит безбарьерно в узкой области межъядерных расстояний вблизи $R(\text{CaCl})=7,0$ и $R(\text{Cl}-\text{Cl})=4,25$ ат. ед. В рамках симметрии C_{2v} при сближении Ca и Cl_2 энергия увеличивается до точки пересечения потенциальных Пв состояний 1A_1 и 1B_2 , соответствующих структурам $\text{Ca}^0-\text{Cl}_2^0$ и $\text{Ca}^+-\text{Cl}_2^-$ [при $R(\text{Ca}-\text{Cl})=7,5$ и $R(\text{Cl}-\text{Cl})=4,00$ ат. ед.]. Дальнейшее сближение Ca и Cl_2 приводит к глобальному минимуму энергии, соответствующему линейной структуре $\text{Cl}^--\text{Ca}^{2+}=\text{Cl}^-$ (симметрия $D_{\infty h}$). А. А. Сафонов

CaCl₂

1985

103: 27556t On the reaction calcium(¹S) + molecular chlorine (¹Σ_g⁺) → calcium chloride (CaCl)(X²Σ⁺) + atomic chlorine(²P), Honjou, Nobumitsu; Yarkony, David R. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA), *J. Phys. Chem.* 1985, 89(13), 2919-23 (Eng). The C_{∞v} and C_{2v} sections of the ¹A' surface for the reaction Ca(¹S) + Cl₂(¹Σ_g⁺) → CaCl(²Σ⁺) + Cl(²P_o) are reported on the basis of SCF/SA-MCSCF/CI wave functions. C_{∞v} Approach is downhill, reflecting the favorable interaction between the HOMO, the Ca(4s) orbital, and the LUMO, the Cl₂[σ*(3p)] orbital. Charge transfer occurs without a barrier over a comparatively narrow range of geometries. C_{2v} Approach is uphill until the ¹A₁ section corresponding to Ca⁰-Cl₂⁰ crosses the ¹B₂ section corresponding to Ca⁺-Cl₂⁻. The energetics of this approach are consistent with an unfavorable interaction of the HOMO and the LUMO. Following this crossing an exoergic path lead to the global min., the double charge-transfer structure, Cl-Ca²⁺-Cl⁻, which lies on the D_{∞h} section of the ¹A' surface.

homers
notexh,
neorem-
pacem

C.A. 1985, 103, NY.

$\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ [Dm: 24653] 1985
($n=0, 2, 4, 6$) Jenkins H.D.B., Mirst D.M.
et al.,

recomp.,
 $\mu, \Delta_f H;$ J. Chem. Soc., Faraday
Trans. 2, 1985, 81, N11,
1607-1626.

CaCl_2

1986

Бажаков В.И.,

инженер.,

сепаратор., М. Структур.

Л.П.,

Жизнь, 1986, 27, N2,

ссыл.

39-42.

нось.

(ссыл. $\bullet$ SrCl_2 ; III)

CaCl₂

DM-23578

1986

105:69146f Determination of force constants of AB₂-type molecules by means of simultaneous analysis of spectroscopic and electron diffraction data. Bazanov, V. I. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1986, 27(2), 39-42 (Russ). An anal. was made of methods to det. force const. from exptl. data. On the basis of the conducted anal. a method is offered for the detn. of force const. of AB₂ mols during the joint anal. of spectroscopic and electron diffraction data considering the effects of nonlinearity and kinematic anharmonicity. As an example the force const. were detd. for SrCl₂, Srl₂, CaCl₂, CaI₂.

Сил. по см.,
структ. парам.

из электроно-
скаппинга

(+3) 17

с. А. 1986, 105, N 8

CaCl₂

[от. 28370]

1987

Алтамаш А.Б., Веняминамова Т.И.
и др.

структура
колебат.
частоты

Таблица рекомендуемых
справочных данных
Депомирован. во ВНИИКИ
Госстандарта СССР 17.02.87.
N 295.

CaCl₂

1987

Монаенкова А.С., Алек-
сеев Г.И. и др.,

ΔH_{aq}

Дурн. флу. химии, 1987,
61, вып. 4, 1113 - 1116.

CaCl₂

от 26316, 272057987

18 Б1108. Повторное электронографическое исследование молекулярной структуры дигалогенидов кальция. Electron diffraction reinvestigation of the molecular structure of calcium dihalides. Vajda Erzsébet, Hargittai M., Hargittai I., Tremmel J., Brunvoll J. «Inorg. Chem.», 1987, 26, № 7, 1171—1174 (англ.)

Методом газовой электронографии выполнено повторное исследование структуры молекул CaCl₂ (I), CaBr₂ (II) и CaJ₂ (III) при т-ре сопла испарителя 1433, 1383 и 1182 К, соотв. Одновременный анализ состава пара квадрупольным масс-спектрометром показал наличие в парах изученных дигалогенидов димерных форм, учитываемых в структурном анализе. Для всех молекул предполагалась линейная структура. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_g , Å) амплитуд колебаний (l , Å) констант асимметрии (χ , Å и величин сокращения (δ_g , Å): 1, r_g (Ca—Cl) 2,483(7), l (Ca—Cl) 0,113(3), χ (Ca—Cl) $11,6 \cdot 10^{-5}$ ($1,5 \cdot 10^{-5}$), r_g (Cl...Cl) 4,746(23), l (Cl...Cl) 0,238, δ_g 0,220(37). относит. содер-

М.П.

(72)

18

X. 1987, 19, N 18

жание мономера 98,1(8)%; II, $r_g(\text{Ca}-\text{Br})$ 2,616(16),
 $l(\text{Ca}-\text{Br})$ 0,110(4), $\kappa(\text{Ca}-\text{Br})$ $9,6 \cdot 10^{-5}$ ($3,1 \cdot 10^{-5}$),
 $r_g(\text{Br} \cdots \text{Br})$ 5,082 (60), $l(\text{Br} \cdots \text{Br})$ 0,241(17), δ_z 0,151, от-
 носительное содержание мономера 94,7 (0,15%); III,
 $r_g(\text{Ca}-\text{J})$ 2,840(10), $l(\text{Ca}-\text{J})$ 0,129(4), $\kappa(\text{Ca}-\text{J})$ $9,7 \cdot 10^{-5}$
 ($4,0 \cdot 10^{-5}$), $r_g(\text{J} \cdots \text{J})$ 5,458(21), $l(\text{J} \cdots \text{J})$ 0,262(13),
 δ_g 0,221(41), относит. содержание мономера 97,6(7)%.
 Из величин сокращения оценены частоты деф. кол. ν_2
 (см^{-1}): 69 (I), 72 (II) и 50(III). Отмечено рассогла-
 сование эксперим. и рассчитанных амплитуд колебаний.
 Согласно улучшается при учете в анализе димерных
 форм, а также при использовании в расчете криволиней-
 ного приближения.

В. Спиридонов

CaCl₂

Om. 26316, 27205 1987

106: 126218c Electron diffraction reinvestigation of the molecular structure of calcium dihalides. Vajda, Erzsebet; Hargittai, M.; Hargittai, I.; Tremmel, J.; Brunvoll, J. (Struct. Chem. Res. Group, Hung. Acad. Sci., H-1431 Budapest, Hung.). *Inorg. Chem.* 1987, 26(7), 1171-4 (Eng). The mol. structure were detd. of CaCl₂, CaBr₂, and CaI₂ 1433, 1383, and 1182 K, resp., by gas-phase electron diffraction. The anal. was paralleled by spectroscopic calcns. When consequences of perpendicular vibrations are accounted for, all mols. display linear configuration with the following bond lengths (r_e): Ca-Cl 2.483 ± 0.006 , Ca-Br 2.616 ± 0.007 , and Ca-I 2.840 ± 0.007 Å.

M. Guss.

См. Гусс.

(42) ☒

C.A. 1987, 106, N 16.

CaCl_2

[Om. 28542]

1988

Баманов В.И.,

теорет. и структур. химии,
расчет 1988, 29, N 1, 38-42.

расчет определений электронной
структуры молекулы
физическим способом
параметры в системе
естественных координат

Лалла

130353

1988

Краснов К. С.,
Филиппенко Н. В.

М. П.

ОМНИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

CaCl₂

(OM-31746)

1989

Ramondo F. Bencivenni L.
et al.,

UK &
Mampuse,
M.N-

J. Mol. Struct. 1989,
192, N1-2, 83-94.

CaCl₂

1990

Salzner Ulrike,
Schleyer Paul von Ragué.

u.n.

Chem. Phys. Lett. 1990.
172, N6.C. 461-470.

(see  CaF₂; iii)

CaCl₂

1991

114: 195176h The interaction of some metal (M) dichlorides (M = calcium, chromium, manganese, iron, cobalt, nickel, zinc) with dinitrogen. Beattie, Ian R.; Jones, Peter J.; Young, Nigel A. (Chem. Dep., Southampton Univ., Southampton, UK SO9 5NH). Chem. Phys. Lett. 1991, 177(6), 579-84 (Enr). MCl₂ (M = Ca, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn) were isolated in Ar and N₂ matrixes and examd. by IR spectroscopy at 200-4000 cm⁻¹. The results obtained are discussed in relation to the behavior of MF₂ and MO. Both CoCl₂ and NiCl₂ show anomalous shifts in the frequency of ν_3 between Ar and N₂ matrixes. Isotopic substitution shows that these molcs. are strongly bent in N₂ matrixes, in contrast to their behavior in Ar matrixes. It is likely that the primary interaction between the host N₂ matrix and the guest MCl₂ is ion-induced-dipole rather than the formation of a discrete MCl₂.N₂ species.

1. sample

Mn

(46)  CrCl₂,

MnCl₂, FeCl₂,
CoCl₂, NiCl₂, ZnCl₂

C.A. 1991, 114, n20.

1991



Kaupp Martin, Schleyer

Paul v. R., et al.

суперкритич,
раствор

J. Am. Chem. Soc. 1991,
113(16), 6012-20.

(ср. ● BaCl_2 ; III)

1991
Call₂ Seijo Luis, Barandiaran
Zoila, et al.

u.n. J. Chem. Phys. 1991. 94,
N5. C. 3762-3773.

(cur. ● MgF_2 ; III)

CaCl₂

1994

121: 264175x On the variation of bond length during large-amplitude bending from electron diffraction: the case of CaCl₂. Hargittai, Magdolna; Veszpremi, Tamas; Pasinszki, Tibor (Structural Chemistry Research Group of the Hungarian Academy of Sciences and Eotvoes University, H-1431 Budapest, Pf., 117 Hung.). *J. Mol. Struct.* 1994, 326(1-3), 213-19 (Eng). All geometrical parameters, including bond lengths, are influenced by large-amplitude vibrations. The magnitude of this effect was examd. for metal dihalides performing large-amplitude bending vibrations, using CaCl₂ as an example. By using quantum-chem. calcns., it was shown that the effect of bending on the bond length is very sensitive to the choice of basis set. A dynamic electron-diffraction anal., augmented with quantum-chem. calcns., revealed that the effect of bending on the bond length is of moderate magnitude within exptl. error. This fact contrasts with the consequences of other motions, in particular stretching, that must always be accounted for in any meaningful comparison of exptl. and computed structures.

Электронно-
диффракц.
исследов.
структурн.
параметров

С.А. 1994, 121, № 22

1996

F: CaCl₂

P: 3

16A42. Изогнутые молекулы дигалогенидов щелочно-земельных металлов.
Bent alkaline-earth dihalides / Tudela David, Seijo Luis [Education in Chemistry]
// Educ. Chem. - 1996. - 33, N 4. - С. 95. - Англ.

Авторы продолжают дискуссию о пространственном строении галогенидов II группы. В рамках теории молек. орбиталей рассмотрена возможность образования тех или иных конформаций (линейные или деформир. структуры) и делается вывод о том, что способность образовывать нелинейные структуры предпочтительна для атомов тяжелых металлов и легких галогенидов, что согласуется с квантовомех. состоянием вакантных орбиталей рассматриваемых атомов и их электроотрицательностью.

Ржсх 1997

CaCl₂

1999

130: 243838m Energetics, molecular electronic structure, and spectroscopy of forming Group IIA dihalide complexes. Devore T. C.; Gole, J. L. (School of Physics, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332-0430 USA). *Chem. Phys.* 1999, 241(2), 221-238 (Eng), Elsevier Science B.V.. Multiple-collision relaxed (helium) chemiluminescence and laser-induced fluorescent spectroscopy were used to demonstrate the highly efficient collisional stabilization of electronically excited Group IIA dihalide collision complexes formed in $M (Ca, Sr) + X_2 (XY) (Cl_2, Br_2, ICl, IBr, I_2)$ reactive encounters. The first discrete emission spectra for the CaCl₂, CaBr₂, SrCl₂, SrBr₂, and SrICl dihalides are obsd. and evaluated; however, the low-pressure 'continuous' chemiluminescent emission obsd. for forming barium dihalide (BaX_2) complexes is quenched under these exptl. conditions. The reactions of the Group IIA metals with mol. fluorine do not readily produce the corresponding dihalide. While the lowest-lying obsd. dihalide visible transition is, as predicted, found to result in an extended progression in a dihalide complex bending mode ($SrCl_2$), the obsd. progression suggests a residual halogen (Cl-Cl) bond. Two higher-lying transitions are dominated by

снелмр
использованы,
данные
представлены.

□ (4) △

C.A. 1999, 130, N18

a vibrational mode structure corresponding to progressions in the sym. stretching mode or, for nominally forbidden electronic transitions, odd quanta of the asym. stretching mode. Some evidence for sequence structure assocd. with the dihalide bending mode is also obtained. These observations are consistent with complex formation as it is coupled with a modified valence electron structure (correlation diagram) assocd. with the highly ionic nature of the dihalides. The bonding in the Group IIA dihalides (and their complexes), whose atomization energies are more than twice the metal monohalide bond energy, strongly influences the evaluation of energetics and the detn. of monohalide bond energies from chemiluminescent processes. Discrepancies between those bond strengths detd. by mass spectrometry and chemiluminescence are discussed with a focus on energy partitioning in dihalide complex formation and its influence on CVD.