

XeFy

1962

 XeF_4

9 Д41. Обычное описание соединений ксенона методом электронных пар. Allen Leland C., Horrocks William DeW., Jr. Conventional electron pair description of xenon compounds. «J. Amer. Chem. Soc.», 1962, 84, № 22, 4344—4345 (англ.)

Делается попытка качеств. предсказания электронной структуры связей в соединениях ксенона. XeF_4 описывается с помощью 6 электронных пар, составленных из 8 электронов Xe и 6 электронов по одному — от каждого атома F. Эти электронные пары направлены к вершинам правильного октаэдра. Атомы F локализованы в вершинах квадрата с атомом Xe в центре. Две неподеленные пары направлены перпендикулярно плоскости молекулы. Такая структура приводит к длине связи Xe—F, равной 1,97 Å. Предсказанная плоская структура молекулы XeF_4 подтверждается тем, что изоэлектронный молекулярный ион ICl_4^- имеет плоское строение. Спектр комб. рас. также указывает на плоскую геометрию XeF_4 .

р. 1963-9

Предсказывается также существование молекул XeF_4O и XeF_4O_2 в форме тетраг. пирамиды и бипирамиды соответственно. В случае XeF_2 в молекулярной связи участвует 10 электронов, образующих 5 электронных пар (XeF_2 — линейная симметричная молекула). Три неподеленных пары расположены в одной плоскости. Связи $\text{Xe}-\text{F}$ направлены перпендикулярно к плоскости неподеленных пар. Предсказывается также существование соединений XeF_2 с кислородом.

Е. Пшеничнов

I-4093

1962

RnF (T_m), XeF₄ (P)

Chernick C.L., Claassen H.H., Fields P.R.,
Hyman H.H., Malm J.C., Manning W.M.,
Matheson H.S., Quarterman L.A.,
Schreiner F., Selig H.H., Sheft J.,
S. Siegel, Sloth E.N., Stein L.,
Studier M.H., Weeks J.L., Zirin M.H.,
Science, 1962, 138, 13537, 136-138

Fluorine compounds of xenon and
radon

БН

Есть оп. к.

XeF_4

Српски

Fluorine magnetic resonance in xenon tetrafluoride. S. Maricic and Z. Veksli (Inst. Ruder Boskovic, Zagreb, Yugoslavia). *Croat. Chem. Acta* 34, 189-90(1962)(in English). Below 237°K. the spectra became asymmetric, with a shape characteristic of substances with paramagnetic properties. Above this temp. the line shapes are symmetric, with a 2nd moment between 3.5 (at 237°K.) and 2.7 gauss² (at 293°K.). The latter values are discussed in relation to the mol. structure of XeF_4 .

S. Maricic (C.C.A.)

C.A. 1963. 58.6

5745c

1963

5335

AN ELECTRON-DIFFRACTION STUDY OF THE
STRUCTURE OF GASEOUS XENON TETRAFLUORIDE.

R. K. Bohn, K. Katada, J. V. Martinez, and S. H. Bauer
(Cornell Univ., Ithaca, N. Y.). p.238-42 of "Noble-Gas
Compounds." Chicago, Univ. of Chicago Press, 1963.

The structure of gaseous XeF₄ was determined by electron diffraction. The radial-distribution curve shows a principal peak at 1.94 Å corresponding to the Xe-F distance. The peak yields a root-mean-square amplitude of vibration of approximately 0.05 Å. In addition, the radial-distribution curve shows two other maxima at 2.77 and 3.88 Å. The peak at 3.88 Å is approximately $\frac{1}{3}$ that of the one at 2.77 Å. Approximating the peak at 2.77 Å with a gaussian curve yields a root-mean-square amplitude of vibration of 0.10 Å. The results show that gaseous xenon tetrafluoride is square planar to within experimental error. (P.C.H.)

E7A51 IX

NSA.1964.18.4

1963

XeF₄

Bersohn R.

Хим. зап.

J. Chem. Phys., 1963, 38, 2913 (N: 12)

Свойства молекулы XeF₄ в газовой фазе
в присутствии ксенона(а) III XeF₂

XeF₄ (γ_{Xe-F}) XI 2091

1963

Blinc R., Zupancić I., Marčić S.,
Veksel'.

J. Chem. Phys., 1963, 39, 48, 2109-2110/2013

Anisotropy of the fluorine chemical
shift tensor in xenon tetrafluoride.

Proc Xuv, 1964, 105/171 10

1963

XeF₄ядерный
магнитный
резонанс
структура

23 Б161. Тетрафторид ксенона. Спектр магнитного резонанса F¹⁹ с высоким разрешением. Brown Thomas H., Whipple E. B., Verdier Peter H. Xenon tetrafluoride: fluorine-19 high-resolution magnetic resonance spectrum. «Science», 1963, 140, № 3563, 178 (англ.)

Исследован спектр ЯМР F¹⁹ в XeF₄, растворенном в безв. HF. Наблюдалась сильная центральная линия, смещенная на $(157,0 \pm 1,5) \cdot 10^{-6}$ в сторону низких полей по сравнению с р-рителем, и две более слабые линии по обе стороны от главной с расщеплением 3860 ± 20 гц. Дополнительные линии отнесены к взаимодействию F¹⁹ с ядром Xe¹²⁹. Относительные интенсивности позволяют оценить долю Xe¹²⁹ в 26%. Взаимодействие с Xe¹³¹ (спин 3/2) не проявляется в спектре из-за большого квадрупольного момента и усреднения состояний ядерного спина за счет квадрупольной релаксации. Это указывает на более низкую симметрию, чем тетраэдрическая, так что XeF₄ сохраняет в р-ре плоское строение. Наблюдался также спектр ЯМР Xe¹²⁹ с хим. сдвигом $-5800 \cdot 10^{-6}$ по сравнению с атомарным. Хим. сдвиг F сходен с наблюдаемым в BrF₃, JF₅ и TeF₆ и т. д.

М. Дяткина

X. 1963.23

1963

XeF₄

нейтронная

2 = 1.953

XeF

 $\angle FXeF = 90^\circ$

16023

XENON TETRAFLUORIDE MOLECULE AND
ITS THERMAL MOTION: A NEUTRON DIFFRACTIONSTUDY. John H. Burns, P. A. Agron, and Henri A. Levy
(Oak Ridge National Lab., Tenn.). Science, 139: 1208-9
(Mar. 22, 1963).

A neutron-diffraction analysis of the xenon tetrafluoride crystal structure confirmed the square-planar symmetry of the molecule. From the data, the average Xe to F bond length is 1.953 Å ($\sigma = 0.002$) and the F to Xe to F angle is 90.0° ($\sigma = 0.1$). A description of the thermal displacements in the crystal is given. (auth)

NSA-1963-17-10

1963

The crystal and molecular structure of xenon tetrafluoride by neutron diffraction. John H. Burns, Paul A. Agron, and Henri A. Levy (Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Noble-Gas Compds.* 1963, 211-20(Eng). The crystal structure, mol. geometry, and thermal motion of XeF_4 were detd. by 3-dimensional neutron-diffraction analysis. The symmetry of the XeF_4 mol. was found to be D_{4h} to high precision. The space group is $P2_1/n$. The av. Xe-F bond length, cor. for thermal motion, is 1.95 Å. ($\sigma = 0.01$) and the F(1)-Xe-F(2) angle is 90.0° ($\sigma = 0.1$). Thermal motion in the crystal is described as a translation of the rigid mol. plus a libration of $\sim 5^\circ$ about the 3 mol. axes. Each F atom makes 8 intermol. contacts with other F atoms and one close approach to another Xe atom. The sq.-planar symmetry, predicted for the free mol. by the mol.-orbital calcs. of Lohr and Lipscomb (CA 58, 9696b) was found to exist to high precision in solid XeF_4 . Ernest R. Kurginski

C.A. 1966. 65. 8

11455.cd

1963

XI 995

XeF₄XeOF₄(Vib. Spectra
Thy)

Vibrational spectra and structures of xenon tetrafluoride and xenon oxytetrafluoride: H. H. Claassen, Cedric L. Chernick, and John G. Malm (Argonne Natl. Lab., Lemont, Ill.). *Noble-Gas Compds.* 1963, 287-94(Eng). The ir spectrum of XeF₄(g) has strong bands at 123, 291, and 586 cm.⁻¹ The Raman spectrum of the solid has very intense peaks at 502 and 543 and a weaker one at 235 cm.⁻¹ These data show that the mol. is planar and of symmetry D_{4h}. The 7 fundamental frequencies have been assigned as 543 (a_{1g}), 291 (a_{2u}), 235 (b_{1g}), 221 (b_{1u}), 502 (b_{2g}), 586 (e_u), and 123 (e_u), the assignment of 221 cm.⁻¹ to b_{1u} being uncertain. The ir spectrum of XeOF₄(g) has intense peaks at 288, 362, 578, 690, and 928.2 cm.⁻¹ and the Raman spectrum of the liquid has bands at 231, 286, 364, 530, 566, and

C.A. 1966. 65.5
6515gh

918 cm.^{-1} The spectra fit a C_{4v} model very well. The fundamentals detd. are 928.2 (a_1), 578 (a_1), 288 (a_1), 231 (b_1), 530 (b_2), 609 (e), and 362 (e). This leaves 1 (b_2) and 1 (e) fundamental undetd. Very close correspondence between vibrations in the 2 mols. indicates that the O-Xe-F angle in XeOF_4 must be rather close to 90° . Force consts. for stretching, interaction of bonds at right angles, and opposite are 3.00, 0.12, and ~ 0.06 mdyne/A.

A. L. McClellan

XeF₄

XI 994
Claassen H. H.

1963

Cheng

"Noble-Gas Compounds", p. 304-5,
Chicago, Univ. of Chicago Press,
1963.

Résumé on vibrational spectra
of xenon compounds.

(en III, XeF₂)

NSA. 1964. 18.4

XeOF₄

V_i

1963

33865 (CONF-126-9) VIBRATIONAL SPECTRA AND STRUCTURES OF XeF₄ AND XeOF₄. Howard H. Claassen, Cedric L. Chernick, and John G. Malm (Argonne National Lab., Ill.). [1963]. Contract W-31-109-eng-38. 22p.

From Conference on Noble Gas Compounds, Argonne, Ill., Apr. 1963.

The infrared spectrum of XeF₄ vapor has strong bands at 123, 291, and 586 cm⁻¹. The Raman spectrum of the solid has very intense peaks at 502 and 543 cm⁻¹ and a weaker one at 235 cm⁻¹. These data show that the molecule is planar and of symmetry D_{4h}. The seven fundamental frequencies were assigned as 543 (a_{1g}), 291 (a_{2u}), 235 (b_{1g}), 221 (b_{1u}), 502 (b_{2g}), 586 (e_u), and 123 (e_u), the assignment of 221 cm⁻¹ to b_{1u} being uncertain. The infrared spectrum of XeOF₄ vapor has intense peaks at 288, 362, 578, 609, and 928.2 cm⁻¹ and the Raman spectrum of the liquid has bands

NSA · 1963 · 17 · 20

at 231, 286, 364, 530, 566, and 918 cm^{-1} . The spectra fit a C_{4v} model very well. The fundamentals determined are: 928.2 (a_1), 578 (a_1), 288 (a_1), 231 (b_1), 530 (b_2), 609 (e), and 362 (e). This leaves one (b_2) and one (e) fundamental undetermined. Very close correspondence between vibrations in the two molecules indicates that the O-Xe-F angle in XeOF_4 must be rather close to 90° . (auth)

XeF₄

chem

X7 2112

1963

Vibrational spectra and structure of xenon tetrafluoride. Howard H. Claassen, Cedric L. Chernick, and John G. Malm (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Am. Chem. Soc.* 85(13), 1927-8(1963). The infrared spectrum of XeF₄ vapor has strong bands at 123, 291, and 586 cm.⁻¹ The Raman spectrum of the solid has very intense peaks at 502 and 543 cm.⁻¹ and weaker ones at 235 and 442 cm.⁻¹ These data show that the mol. is planar and of symmetry D_{4h}. The 7 fundamental frequencies were assigned as 543 (a_{1g}), 291 (a_{2u}), 235 (b_{1g}), 221 (b_{1u}), 502 (b_{2g}), 586 (e_u), and 123 (e_u). The (b_{1u}) frequency value is uncertain. RCJC

C.A. 1963.59.3

2306.d

1963

Xe F₄

1 Д176. Колебательные спектры и структура тетрафторида ксенона. Claassen Howard H., Chernick Cedric L., Malm John G. Vibrational spectra and structure of xenon tetrafluoride. «J. Amer. Chem. Soc.», 1963, 85, № 13, 1927—1928 (англ.)

Найдено, что ИК-спектр газообразного XeF₄ имеет сильные полосы: 123, 291 и 586 см⁻¹. Спектр комб. рас. твердого XeF₄ имеет интенсивные максимумы 502 и 543 см⁻¹ и более слабые при 235 и 442 см⁻¹. Это позволяет сделать вывод, что молекула — плоская, симметрии D_{4h}. Проведено отнесение 7 частот: 543 (a_{1g}), 291 (a_{2u}), 235 (b_{1g}), 221 (b_{1u}), 502 (b_{2g}), 586 (e_u), 123 (e_u). Частота (b_{1u}) осталась неопределенной.

Р. Костиков

ф. 1964. 1А

1963

ХеF₄
И.К.
Спектр

3 Б114. Колебательный спектр и структура четырехфтористого ксенона. Claassen Howard H., Cherrick Cedric L., Malm John G. Vibrational spectra and structure of xenon tetrafluoride. «J. Amer. Chem. Soc.», 1963, 85, № 13, 1927—1928 (англ.)

Исследован ИК-спектр поглощения паров ХеF₄ (I) и спектр комб. расс. I в твердом состоянии. На основании полученных данных и исходя из предположения, что молекула I имеет симметрию D_{4h} , сделано отнесение основных частот (в см^{-1}): 543 (a_{1g}), 291 (a_{2u}), 235 (b_{1g}), 221 (b_{1u}), 502 (b_{2g}), 586 (e_u) и 123 (e_u). Отнесение частоты 221 см^{-1} является сомнительным.

Резюме авторов

X.1964.3

1963

28846

VIBRATIONAL SPECTRA AND STRUCTURE
OF XENON TETRAFLUORIDE. Howard H. Claassen,
Cedric L. Chernick, and John G. Malm (Argonne National
Lab., Ill). J. Am. Chem. Soc., 85: 1927-8 (July 5, 1963).

The infrared spectrum of XeF_4 vapor has strong bands at 123, 291, and 586 cm^{-1} . The Raman spectrum of the solid has very intense peaks at 502 and 543 cm^{-1} and weaker ones at 235 and 442 cm^{-1} . These data show that the molecule is planar and of symmetry D_{4h} . The seven fundamental frequencies were assigned as 543 (a_{1g}), 291 (a_{2u}), 235 (b_{1g}), 221 (b_{1u}), 502 (b_{2g}), 586 (e_u), and 123 (e_u). The (b_{1u}) frequency value is quite uncertain. (auth)

NSA-1963-17-17

супергруппа (XeF₄) XI 1783 1968

Hemmerich P.,
Chimia, 1963, 17, N 9,

289-92

(9)

40

Есть ф. н.

XeF₄

Eugene S. Rysh

1963

Joshua Fortner

Stuart A. Rice

From American Chemical Society
145-th National Meeting, New York
Sept, 1963

Forbidden electronic transitions

in XeF₂ & XeF₄

(^{cur} XeF₂)

ХеF₄

12 Б38. Проблема химической связи в тетрафториде ксенона. Israël Yigal Julius. Le problème des liaisons chimiques dans le tétrafluorure de xénon. «Bull. Soc. chim. France», 1963, № 6, 1336 (франц.)

Автор предполагает, что при образовании ХеF₄ две пары электронов Хе (напр., $5p_x^2$ и $5p_y^2$) переходят к 4F. Катион Хе⁴⁺ оказывается при этом в кристаллич. поле четырех анионов F⁻ с симметрией D_{4h} , которое частично снимает вырождение 4p-АО Хе. Возникают следующие орбиты: E_u (из $5p_x$ и $5p_y$), несвязывающие A_{2u} (из $5p_z$), A_{1g} (из $5s$), B_{1g} (из $4d_{x^2-y^2}^2$), несвязывающие A_{1g} (из $4d_z^2$) и T_{2g} (из остальных 4d-орбит). Из

орбит Хе типов A_{1g} , B_{1g} и E_u и соответствующих линейных комбинаций 2p-АО F конструируются МО всей молекулы. Схема возникающих уровней приведена на рис. При заполнении связывающих МО A_{1g} , E_u и B_{1g} восемью электронами, несвязывающих орбит T_{2g} , A_{1g} ($4d_z^2$) и A_{2u} —десятью электронами и разрыхляющих МО B_{1g}^+ и A_{1g}^+ —четырьмя электронами, появляются две пары электронов на МО, ориентированных по оси z, которые могут участвовать в координации с молекула-

1963

1961

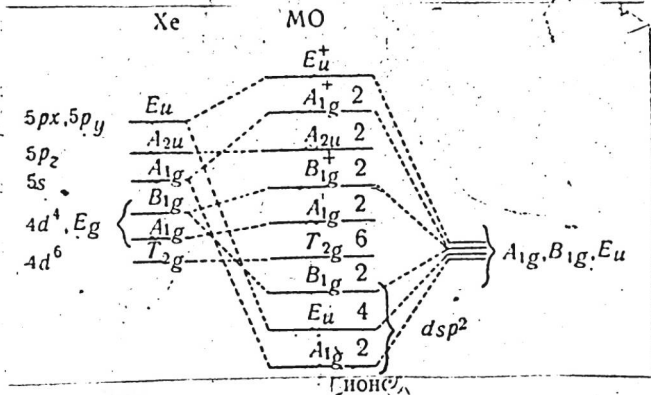
171

Х. 1964.12

Сил. М. Ф. Об.

ми с пустыми орбитами. На этом основании автор пред-
сказывает существование XeF_4O_2 , $\text{XeF}_4 \cdot \text{BF}_3$ и $\text{XeF}_4 \cdot (\text{BF}_3)_2$.

М. Дяткина



1963

XeF₄

4pp. comp

A far ultraviolet spectroscopic study of xenon tetrafluoride. Joshua Jortner, E. Guy Wilson, and Stuart A. Rice (Univ. of Chicago). *J. Am. Chem. Soc.* 85, 815-16(1963). The ultraviolet absorption spectrum of XeF₄ in the gas phase was studied down to 1100 Å. The spectrum consists of a weak band at 2265 Å. ($f = 0.008$) and 2 strong bands at 1840 and 1325 Å. ($f = 0.22$ and 0.80, resp.). No vibrational structure is noticed. The 2265-Å. band is assigned to a forbidden $a_{2u} \rightarrow c_u^+$ transition, vibronically induced by coupling with the E_u -type vibration of the planar sq. mol. The 1840- and 1325-Å. bands are assigned to allowed x,y polarized $b_{1g} \rightarrow c_u^+$ and $a_{1g} \rightarrow c_u^+$ transitions, resp. The spectral data are consistent with the banding scheme proposed by these authors.

C. N. R. Rao

C.A. 1963. 58. 13

132959

Хе F₄

УФ-
спектр

1963

20 Б52. Спектроскопическое исследование тетрафторида ксенона в дальней ультрафиолетовой области. Jortner J., Wilson E. G., Rice S. A. A far-ultra-violet spectroscopic study of xenon tetrafluoride. «J. Amer. Chem. Soc.», 1963, 85, № 6, 815—816 (англ.)

Спектр поглощения ХеF₄ (I) в газовой фазе в УФ-области до 1100 Å содержит слабую полосу 2265 Å ($f = 0,008$) и две сильные полосы 1840 ($f = 0,22$) и 1325 Å ($f = 0,80$), колебательная структура которых не разрушена. Полоса 2265 Å слишком интенсивна, чтобы ее можно было отнести к переходу синглет — триплет, и она интерпретирована как соответствующая запрещенному переходу $a_{2u} \rightarrow e_u^+$, проявляющемуся благодаря связи с колебанием типа E_u (ν_{5a} и ν_{5b}) плоской квадратной молекулы (симметрия D_{4h}). Наличие двух других переходов I рассматривается как результат расщепления уровней вследствие взаимодействия между соседними атомами F. Это расщепление должно быть порядка $4\nu_{F-F}$. Вычислен резонансный

см. нрбб.

х. 1963-20

интеграл $\beta_{F-F} = 0,7$ эв для двух атомов F; находящихся на расстоянии 2,82 А. В соответствии с этим предположением полосы 1850 А ($h\nu = 6,8$ эв) и 1325 А ($h\nu = 9,4$ эв) интерпретированы как x и y -компоненты поляризованных переходов $b_{1g} \rightarrow e_u^+$ ($h\nu(\text{выч.}) = 7,0$ эв) и $a_{1g} \rightarrow e_u^+$ ($h\nu(\text{выч.}) = 9,8$ эв), что хорошо согласуется с предложенной ранее интерпретацией спектра, проведенной на основе метода МО.

Э. Тетерия

1963

18039

A FAR-ULTRAVIOLET, SPECTROSCOPIC
STUDY OF XENON TETRAFLUORIDE. J. Jortner, E. G.
Wilson, and S. A. Rice (Univ. of Chicago). J. Am. Chem.
Soc., 85: 815-16 (Mar. 20, 1963).

The absorption spectrum of gaseous XeF_4 was studied
in the uv region to 1100 Å. A weak band appeared at 2265
Å, followed by two strong bands at 1840 and 1325 Å. M. O.
orbitals relevant to the interpretation of the spectrum are
given. The weak 2265 Å band is assigned to the forbidden
 $a_{2u} \rightarrow e_u^+$ transition. The strong 1850 and 1325 Å bands are
assigned to the allowed x, y polarized $b_{1g} \rightarrow e_u^+$ and $a_{1g} \rightarrow$
 e_u^+ transitions, respectively. (D.L.C.)

NSA-1963-14-11

XeF, XeF₂ (Do, E, симметрия) 1963

Fortner J., Rice S.A., ^{XI 1884} Wilson E.G.,
J. Chem. Phys., 1963, 38, 2302-03

10

Барет

если оригинал

XeF_4 ($\angle \text{F Xe F}$) Xr 1857 1963

Ibers J.A., Hamilton W.C.,

Science, 1963, 139, 106-107

● Xenon tetrafluoride: crystal structure.

Е. С. Л. Ф. Н.
10

Ca 63

Xe F₄ Joshua Wotner, E. Guy 1963
Wilson, and Stuart A. Rice.

Noble - Gas Compdr., 1963, 358-88.

Theoretical and experimental
studies of the electronic
structure of the xenon
fluorides.

(un^{III} Xe F₄)

XeF_4

L.L. Lohr, Jr. XI 1950 1963

William N. Lipscomb

J. Am. Chem. Soc. 85, ^{v2} 240-1 (1963)

Синтез и свойства XeF_2

4 XeF_4

(un III, XeF_2)

Xe F₄ (электрон. стр-ра, геометрия молекул)
XI 1951 1963

Lohr L. L., Lipscomb W. N.,
Noble-Gas Compds, 1963, 347-53

Ес . . . ф. н.

[Bep - I 3856]

1963

$\left. \begin{array}{l} \text{Xe F}_2 \\ \text{Xe F}_4 \end{array} \right\} (\text{J., A.})$

Nesbet R. K.

J. Chem. Phys., 1963, 38, n7, 1783-1784 (cont.)

Theory of inert-gas fluorides.

10

1-2 0811

Pure gas, 1963, 11073

(9)

ХеF₄
фторид
ксенона

XI 2283

X. 1964. 3

8 Б28. Ковалентный радиус ксенона. Sanderson R. T. The covalent radius of xenon. «Inorgan. Chem.», 1963, 2, № 3, 660—661 (англ.)

Оцененный ранее путем экстраполяции по кристаллическим радиусам «ковалентный радиус» инертного атома ксенона 2,09А (РЖХим, 1959, № 12, 41306) использован для сопоставления с найденным из опыта расстоянием Хе—F. При оценке электроотрицательности ХеF₄ в 4,05 радиус Хе в этой молекуле равен $\sqrt[3]{2,09^3/4,05}=1,31\text{А}$, так что сумма радиусов Хе и F составляет 2,12А, а расстояние Хе—F должно составлять 0,92 от этой суммы (Sanderson R. T., «Science», 1951, 114, 670), т. е. 1,95А в удовлетворительном согласии с опытным значением $1,92\pm 0,03\text{А}$. Уменьшение радиуса Хе по сравнению с инертным атомом соответствует заряду на Хе +1,36, так что заряд на каждом атоме F равен -0,34. Легкая летучесть ХеF₄, несмотря на значительную полярность связей объясняется тем, что в других полярных фторидах (MgF₂, AlF₃) конденсация в полимерный кристалл происходит за счет свободных орбит катиона, тогда как у Хе таких орбит нет. На основании оцененных описанным образом радиусов предсказаны длины связей в ХеF₂ (2,11А) и в KrF₄ (1,84А).

М. Дяткина

1963

1963

X 2283

XeF₄
Сир. в-ва

Орнана ч. (в-ва)

3 Д18. Ковалентный радиус ксенона. Sander-
son R. T. The covalent radius of xenon. «Inorgan. Chem.»,
1963, 2, № 3, 660—661 (англ.)

Из данных по электроотрицательности XeF₄ определе-
на длина связи $d(\text{XeF})$. Вычисленное значение $d(\text{XeF}) =$
 $= 1,95 \text{ \AA}$ находится в разумном согласии с известным
($1,92 \pm 0,03 \text{ \AA}$).

ф. 1964. з. 15

1963

XI 2283

Covalent radius of xenon. R. T. Sanderson (Univ. of Iowa, Iowa City). *Inorg. Chem.* 2, 660-1 (1963). On the basis of a correlation of electronegativity with covalent bond length (*Chemical Periodicity*, 1960 (CA 54, 11686g)) a bond length of 1.95 Å. was calcd. for XeF_4 . Similarly, bond lengths of 2.11 and 1.84 Å. were predicted for XeF_2 and KrF_4 , resp. In the calcs. 2-electron bonds were assumed. Thomas B. Hoover

 XeF_4 XeF_2 KrF_4

(Xe).

(3)

C.A. 1963 59:5

4555ab

X12283

Теория

строения

 XeF_2 KrF_4

2.11

X. 1964.8

✓ 8 Б28. Ковалентный радиус ксенона. Sanderson R. T. The covalent radius of xenon. «Inorgan. Chem.», 1963, 2, № 3, 660—661 (англ.)

Оцененный ранее путем экстраполяции по кристаллическим радиусам «ковалентный радиус» инертного атома ксенона 2,09А (РЖХим, 1959, № 12, 41306) использован для сопоставления с найденным из опыта расстоянием $\text{Xe} - \text{F}$. При оценке электроотрицательности XeF_4 в 4,05 радиус Xe в этой молекуле равен $\sqrt[3]{2,09^3/4,05} = 1,31\text{А}$, так что сумма радиусов Xe и F составляет 2,12А, а расстояние $\text{Xe} - \text{F}$ должно составлять 0,92 от этой суммы (Sanderson R. T., «Science», 1951, 114, 670), т. е. 1,95А в удовлетворительном согласии с опытным значением $1,92 \pm 0,03\text{А}$. Уменьшение радиуса Xe по сравнению с инертным атомом соответствует заряду на $\text{Xe} +1,36$, так что заряд на каждом атоме F равен $-0,34$. Легкая летучесть XeF_4 , несмотря на значительную полярность связей объясняется тем, что в других полярных фторидах (MgF_2 , AlF_3) конденсация в полимерный кристалл происходит за счет свободных орбит катиона, тогда как у Xe таких орбит нет. На основании оцененных описанным образом радиусов предсказаны длины связей в XeF_2 (2,11А) и в KrF_4 (1,84А).

М. Дяткина

1963

Ne F₄

Shoichiro Yamada

cf. ~~pyrrolyl~~

Rev. Phys. Chem. Japan, 33 (1),
39-40.

The molecular structures of
compounds of rare-gas ele-
ments.

(see. XeO₃)

C. A. 1964. 60.3

1963

XeF₄I-3700
12250

epyrrope

CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF XENON TETRAFLUORIDE. David H. Templeton, Allan Zalkin, J. D. Forrester, and Stanley M. Williamson (Univ. of California, Berkeley). J. Am. Chem. Soc., 85: 242(Jan. 20, 1963).

The crystal structure of XeF₄ was determined by x-ray diffraction at room temperature. The structure consists of a molecular packing of square-planar molecules of XeF₄. The monoclinic unit cell has dimensions $a = 5.050$, $b = 5.922$, $c = 5.771\text{\AA}$ (each $\pm 0.003\text{\AA}$), and $\beta = 99.6^\circ \pm 0.1^\circ$. With 2 molecules per cell the density is 4.04 g/ml. Intensities were measured for the 329 independent reflections of the primitive cell with θ less than 25° . Of these, 36 were absent because of the space group symmetry. Calculations gave Xe-F bond distances of 1.92 and 1.90 $\text{\AA}$. (M.C.G.)

I-8145-1
Bop - 5418 - 1

NSA-1963-17-8

XeF₄

I-3700

1963

B99-5418-I

$z = 1,93 \text{ \AA}$
Xe-F

Crystal and molecular structure of xenon tetrafluoride. David H. Templeton, Allan Zalkin, J. D. Forrester, and Stanley M. Williamson (Univ. of California, Berkeley). *J. Am. Chem. Soc.* 85, 242(1963). X-ray diffraction studies show the monoclinic unit cell has a 5.050, b 5.992, c 5.771 (each ± 0.003 A.), β $99.6^\circ \pm 0.1^\circ$. With $Z = 2$ the d . is 4.04. Space group is $P2_1/n$ and Xe atoms are at 0,0,0 and $1/2, 1/2, 1/2$. Least-squares analysis of the data leads to Xe-F bond distances of 1.92 and 1.90 A. ($\sigma = 0.02$ A.). The F-Xe-F bond angles are 89.7° and 90.3° ($\sigma = 0.9^\circ$). The mol. has planar symmetry and is sq. within exptl. accuracy. Correction for thermal motion gives an av. Xe-F distance of 1.93 A. F-F distances within the mol. are 2.69 and 2.71 A. ($\sigma = 0.03$ A.). The shortest F-F contact between mols. is 3.33 A.
D. A. House

C.A. 1963.58.10

9696d

XeF₄

Conference

35709 (UCRL-10804) A DETERMINATION OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF XENON TETRAFLUORIDE. David H. Templeton, Allan Zalkin, J. D. Forrester, and Stanley M. Williamson (California. Univ., Berkeley. Dept. of Chemistry and California. Univ., Berkeley. Lawrence Radiation Lab.). Apr. 1963. Contract W-7405-eng-48. 15p. (CONF-126-16)

From Conference on Noble Gas Compounds, Argonne, Ill., Apr. 1963.

The crystal and molecular structure of XeF₄ was determined by single-crystal x-ray-diffraction techniques. The intensities of MoK α x rays diffracted by the crystal were measured with a scintillation counter. The monoclinic unit cell dimensions are $a = 5.050 \text{ \AA}$, $b = 5.922 \text{ \AA}$, $c = 5.771 \text{ \AA}$ (each $\pm 0.003 \text{ \AA}$), and $\beta = 99.6^\circ \pm 0.1^\circ$. The space group is $P2_1/n$ with two molecules per unit cell. The xenon atoms occupy the corners and body centers so that the molecular packing is pseudo body-centered cubic. The molecule has a square planar configuration. The Xe-F bond distance is $1.93 \pm 0.02 \text{ \AA}$, after a correction of $+0.02 \text{ \AA}$ for thermal vibration effects; the F-Xe-F bond angle is a right angle ($90.4 \pm 0.9^\circ$) within the accuracy of the determination. (auth)

NSA-1963-17-21

1963

Bsp - 5718-1

Do. (XeF_4 , ArF_4 , KrF_4 , NeF_4 , XeCl_4 ,
и др. KrCl_4 , XeF_2 , KrF_2 , XeCl_2).

Waters J. H., Gray H. B. XI 2429

J. Amer. Chem. Soc., 1963, 85, No. 6,
825-826

Bond energies and ionic character
of inert gas halides

px 63

10

Cap. 17

XI 2434

1963

XeF₄

Weinstock B., Weaver R.B.,
Knop Ch. P.

"Noble-Gas Compounds". Chicago,
Univ. of Chicago Press, 1963,
50-60.

The Xenon-fluorine system.

(see XeF₂)

NSA.1964.18.4

соединения (XeO_3 , XeF_2 , XeF_4 , XeF_5^+ ,
 XeF_6) XI 2456. 1963

Yamada Shoichiro

Rev. Phys. Chem. Japan, 1963, 33,
N1, 39-40

The molecular structures of
compounds of rare-gas elements

px 64 . no . to aspects

XeF₄

XI 1861

1963

run x-ray
charge

The problem of chemical bonds in xenon tetrafluoride. Yigal Julius Israeli (Univ. Hebraique, Jerusalem). *Bull. Soc. Chim. France* 1963, 1336; cf. Rundle, *CA* 58, 8416a. In the D_{4h} crystal field of Xe the 4 bonding at. orbitals $E_u(5p_x, 5p_y)$, $A_{1g}(5s)$, and $B_{1g}(4d^2_{(x^2-y^2)})$ are combined with the 2p orbitals of the F atoms having the same symmetry, viz. $E_u(p_1 - p_3; p_2 - p_4)$, $B_{1g}(p_1 - p_2 + p_3 - p_4)$, and $A_{1g}(p_1 + p_2 + p_3 + p_4)$. The bonding mol. orbitals so obtained are B_{1g} , A_{1g} , and E_u , corresponding to dsp^2 hybridization of 4 planar bonds. The nonbonding mol. orbitals are $E_{2u}(5p_z)$, $A_{1g}(4d^2_{(z^2)})$, and $T_{2g}(4d^6)$. Thus there are 2 free electron pairs along the z-axis, and XeF₄ should be capable of coordination with electron-acceptor mols. D. A. House

C.A. 1963.59.7
4007 c

XeF₄

espionage

X7 1861

1963

28839 THE PROBLEM OF CHEMICAL BONDS IN
XENON TETRAFLUORIDE. Yigal Julius Israël (Uni-
versité Hébraïque, Jerusalem). Bull. Soc. Chim. France,
No. 6, 1336 (June 1963). (In French)

An electron energy-level scheme is proposed to explain
the chemical properties of XeF₄, which has the planar
crystal structure D_{4h}. (T.F.H.)

NSA-1963-17-17

XeF₄

Bohn R.K.

1964

(7, 4)

Dissert. Astr., 1964, 25, № 6,
3282.

Исследование строения мо-
лекулы методом электрон-
ной дифракции: чис- и
транс-диф-  фтордизиты,
дифтора.  мильный ради-

кам, тейра фий ормидра -
зун, тейра фий ормид и
пексафий ормид ксемена.

(сее. III $N_2 F_2$)

Ref 4

Bohn R. K.

1964

Thesis, Ithaca, N. Y., Cornell
Univ., 118 p.

Исследование строения молекул
методом элементарной
дифракции: цис- и транс-
дифтордизамин, NF_2 ,

$N_2 F_4$, ReF_4 и ReF_6

(срв. $N_2 F_2$)

XeF₄

спектр и
структура

У 9 Д60. Электронная структура и спектр XeF₄. Рассмотрение с помощью полуэмпирического метода МО. Boudreaux Edward A. Electronic structure and spectrum of XeF₄. A semiempirical MO treatment. «J. Chem. Phys.», 1964, 40, № 1, 246—247 (англ.)

В рамках полуэмпирич. метода МО ЛКАО рассчитаны энергии и коэф. МО XeF₄(D_{4h}). При диагонализации секулярной матрицы недиагональные матричные элементы H_{ij} рассчитывались по ф-ле

$$H_{ij} = -F(H_{ii}H_{jj})^{1/2}G_{ij},$$

где $F_{\sigma}=1,7$ и $F_{\pi}=1,9$ и G_{ij} — интегралы перекрывания между группами атомов. В качестве диагональных матричных элементов использовались потенциалы ионизации из соответствующего валентного состояния. Рассчитанные энергии разрешенных синглет-синглетных переходов таковы: $1b_{2u} \rightarrow 2b_{1g}$ (9,88), $1b_{2g} \rightarrow 3e_u$ (6,99), $1a_{2g} \rightarrow 3e_u$ (6,95) и $1e_g \rightarrow 3e_u$ (7,00 эв). Оцененный эффективный заряд на Xe равен 0,412 эв, что находится в хорошем согласии с данными ЯМР и данными более

XI 20.93

1964. 98

ранних вычислений. Рассчитанный потенциал ионизации равен 13,2 эв (экспериментально известен лишь потенциал ионизации XeF_2 — $11,5 \pm 0,2$ эв). Отмечается, что проведенный учет высших состояний на атоме Xe (учитывались кроме 5 *p* также 5 *d*, 6 *s* и 6 *p* АО) заметно влияет на теоретически рассчитанные характеристики XeF_4 .

В. Быховский

1964

Xe F₄

Cynthia Juan Jamerson,
Gutowsky H.S.

cb.ez

J. Chem. Phys., 40(8), 2285-93.

Calculation of chemical
shifts. II. The xenon fluori-
des.

(cur. XeF₂)

1964

XeF₄

B. max. packet

D₀

Electronic structure and spectrum of XeF₄. A semiempirical M.O. treatment. Edward A. Boudreaux (Louisiana State Univ., New Orleans). *J. Chem. Phys.* 40(1), 246-7(1964). Mol. bonding orbitals which involve the 5p, 5d, 6s, and 6p orbitals of Xe are calcd. for XeF₄. The effective charge on Xe is computed to be 0.412, which is in good agreement with nuclear magnetic resonance data. The av. bond energy is calcd. to be 1.8 e.v., compared with the observed value of 1.4 e.v. The spectral characteristics are evaluated in terms of the symmetry-allowed singlet-singlet transitions.

Dorothy M. Goode

C.A. 1964. 60. 6

6327f

XeF₄

I.

8358

ELECTRONIC STRUCTURE AND SPECTRUM
OF XeF₄. A SEMIEMPIRICAL MO TREATMENT. Ed-
ward A. Boudreaux (Louisiana State Univ., New Orleans).
J. Chem. Phys., 40: 246-7(Jan. 1, 1964).

Standard group theoretical methods were used in deriving various molecular-orbital combinations for XeF₄. Spectral characteristics ascribed to symmetry-allowed singlet-singlet transitions are given. The effective charge on Xe in XeF₄ was computed to be 0.412, and is in good agreement with that inferred from NMR data. The ionization potential (13.2 ev) estimated from the data also seems reasonable. (P.C.H.)

1964

NSA-1964-18-6

HeF₂ (ze); XeF₄ (ze) XI 1708

1964

Gellings P. J.,

J. phys. Chem. (BRD), 1964, 43,
N1-2, 123-125

Bond lengths in xenon(II)
fluoride

PIX-6576 Φ. H.



10

XeF_4 Hyman Herbert H. 1964
J. Chem. Educ.
1964, 41, N4, 174-182.

Химия инертных газов

(см. ^{III} XeF_2)

ВЗ-Х-1862

1964

Xe F₄

У.ф. спектр

4 Д69. Количественная интерпретация ультрафиолетового спектра поглощения тетрафторида ксенона. Israeli Yigal Julius. Tentative d'interprétation du spectre ultraviolet du difluorure de xénon. «Bull. Soc. chim. France», 1964, № 3, 649—650 (франц.)

С целью интерпретации УФ-спектра XeF₄ (I) в рамках метода МОЛКАО исследована электронная структура молекулы I. По сравнению с предыдущей работой автора (Israeli Y. I. «Bull. Soc. Chim.», 1963, 1336) дополнительно учтены π -МО. Установлена симметрия всех МО, возникающих из 9 s, p и d АО атома Xe, а также всех σ и π АО валентной оболочки четырех атомов F. Наблюдаемые на опыте три полосы поглоще-

см. нрб.

ф. 1965. 4Д

ния молекулы I при 1325(0,80), 1850(0,22) и 2265(0,008) Å
 (в скобках указаны силы осцилляторов соответствующих
 полос) отнесены соответственно переходам
 $b_{2g}(\pi) \rightarrow e_u^+(\sigma^+, \pi^+) ({}^1A_{1g} \rightarrow {}^1E_u)$, $e_g(\pi) \rightarrow e_u^+(\sigma^+, \pi^+) \times$
 $\times ({}^1A_{1g} \rightarrow {}^1A_{2u})$ и $a_{2u}(\pi) \rightarrow e_u^+(\sigma^+, \pi^+)$ (этот переход,
 характеризующийся малой силой осциллятора, является
 электронно-колебательным и может приводить к возбуж-
 дению колебаний). Подчеркивается, что первые два
 перехода характеризуются переносом заряда от лиган-
 дов (атомов F) на центральный атом Xe. Для третьего
 перехода характерно перераспределение электронной
 плотности в направлениях, перпендикулярных σ -связям.

В. Быховский

XeF₂

XI 1862

1964

y.f. ever

/ Tentative interpretation of the ultraviolet spectra of xenon tetrafluoride. Yigal Julius Israeli (Hebrew Univ., Jerusalem). *Bull. Soc. Chim. France* 1964(3), 649-50. In XeF₄, the hybrid orbitals arise from a combination of orbitals of 4F⁻ with orbitals of Xe⁴⁺ having the same symmetry, and details are given of the σ and π M.O.'s. The orbital transitions are detd. for the bands with max. at 1325, 1850, and 2265 Å. The Jahn-Teller effect serves to explain the large width of the 1850-Å. band. The 1325- and 1850-Å. transitions involve the transfer of electronic charge from the F⁻ ligand to the central Xe⁴⁺ ion. The weak oscillator strength of the 2265-Å. band shows that this is a vibronic transition.

M. M. de Maine

C.A. 1964 C1 NR 1960 L

1964

XeF_4

Kaufman F. F.

ch236

J. Chem. Educ. 41(4), 183-4.

Bonding in xenon hexafluoride.

(see XeF_2)



XeF₄
Chem. Abstr.

g. g.

0
2

XI 2141

1964

Mean amplitudes of vibration and thermodynamic functions of xenon tetrafluoride. G. Nagarajan (Oklahoma State Univ., Stillwater). *Acta Phys. Austriaca* 18(1), 11-19(1964)(in English). Force consts. of XeF₄ (possessing a sq. planar configuration with the symmetry point group D_{4h}) were evaluated by Wilson's method. Valence force const. of Xe-F stretching mode is 2.8586 millidynes/A., and force const. due to the out-of-plane bending is roughly 3 times greater than that due to the in-plane bending. The mean amplitudes of vibration were studied at $T = 0$ and $T = 298^\circ\text{K}$. The values for the bonded atom pair Xe-F are 0.0429 A. at $T = 0$ and 0.0475 A. at $T = 298^\circ\text{K}$, and those for the nonbonded atom pair F-F are 0.0940 A. and 0.1337 A. The molar thermodynamic functions (heat content, free energy, entropy, and heat capacity) of XeF₄ were calcd. by assuming a rigid rotator, harmonic oscillator model at 50-2000°K.

H. Schindlbauer

C.A. 1964. 61. 10

11351d

14

X₂ F₄

6 Д102. Средние амплитуды колебаний и термодинамические функции тетрафторида ксенона. Nagaoka G., Mean amplitudes of Vibration and thermodynamic functions of xenon tetrafluoride. «Acta phys. austriaca», 1964, 18, № 1, 11—19 (англ.)

Решена задача о норм. колебаниях молекулы тетрафторида ксенона. Молекула имеет плоскую квадратную конфигурацию и принадлежит к группе симметрии D_{4h}. Вычислены 10 силовых постоянных в естественных колебательных координатах и дано отнесение частот к типам симметрии. Вычислены элементы матрицы средних квадратичных амплитуд колебаний в координатах симметрии и средние квадратичные амплитуды колебаний в естественных колебательных координатах при t-ре 0 и 298° K. Средние амплитуды колебаний связан-

1984

Т. ф.

структура
сим. пост.
сп. элемент.

XI 2141

ф. 1965. 68



ной пары атомов Хе—F равны 0,0429 Å при $T=0^\circ$ и 0,0475 Å при $T=298^\circ$ К. Для несвязанной пары атомов F...F соответственно получены величины 0,0940 Å и 0,1337 Å. В приближении гармонич. осциллятора и жесткого ротатора вычислены термодинамич. ф-ции при 24 значениях t -ры в интервале $50\text{—}2000^\circ$ К. Используемые в расчете главные значения моментов инерции равны $I_{xx}=I_{yy}=240,7635$; $I_{zz}=481,5270 \cdot 10^{-40}$ гсм².

В. Березин

XeF_y

XI 2141

1964

43452 MEAN AMPLITUDES OF VIBRATION AND THERMODYNAMIC FUNCTIONS OF XENON TETRAFLUORIDE. G. Nagarajan (Oaklahoma State Univ., Stillwater). Acta Phys. Austriaca, 18: 11-19(1964).

The vibrational and molecular structural analyses for xenon tetrafluoride molecule possessing a square planar configuration with the symmetry point group D_{4h} are comprehensively reported. The mean amplitudes of vibration at the temperatures T = 0 and T = 298°K were studied after evaluating the force constants. The molar thermodynamic functions were also calculated on the basis of a rigid rotator, harmonic oscillator approximation for the temperature range from 50 to 2000°K. (auth)

NSA-1964-18-24



XeF₄

Pysk E.S. Yortner J.
Rice S.A.

1964

J. Chem. Phys., 1964, 40, 2018

Запрещенные электронные
переходы в XeF₂, XeF₄

(см. III XeF₂)

Xe F₂ ; Xe F₄ ; Xe F₆ (Z_{Xe} - F) 1965

Ch'ing Yun Lui , XI 990

Hua Hsueh Tung Pao, 1965,
(6), 375-376

New estimation of covalent
radii of the inert element.
W Ca 1966

1965

6 Д79. Об энергиях валентных состояний в соединениях инертных газов и некоторых других галогенидах. Дяткина М. Е., Чаркин О. П. «Ж. структурн. химии», 1965, 6, № 1, 174—176

Обсуждаются данные об энергиях возбуждения атомов инертных газов. Показано, что энергии их валентных состояний значительно выше, чем энергии возбуждения. Поэтому возбуждение с возникновением даже двух неспаренных электронов представляется маловероятным, т. к. необходимая энергия едва ли может окупиться образованием двух связей (в галогенидах инертных газов.) В связи с этим авторы делают вывод, что объяснение образования связей в соединениях инертных газов за счет взаимодействия неспаренных электронов несостоятельно. Авторы считают, что в соединениях инертных газов более вероятно возникновение трехцентровых МО за счет пар электронов нейтрального атома и неспаренных электронов лигандов. Оценки энергии диссоциации отдельных связей в XeF_4 и XeF_2 подтверждают это предположение.

X1 2506

ф. 1965. 6 Д

 Xe F_4 Xe F_2

vi (XeF₂, KrF₂) . XI-1272 1965
Krishnamachari S. S. N. Y.,
Narasimham N. S., Singh M.,
Current Sci (India), 1965,
34 , N 3, 75-77

10

pp 64

Xe F₄

Melton Ch. 8.,
Joy H. W.

1985

(7)

J. Chem. Phys., 42(8), 2982

Calculated ionization po-
tential of CCl₂H₂, CCl₄,
CF₂H₂, CF₄, CCl₂F₂, XeF₄,
XeCl₄ (cur III CCl₂H₂)

BP-M 335-11
566M-619

Хе-Р-у

1965

4 Д222. Анализ нормальных координат XeF_4 в поле Юри — Брэдли. Yeranov Walter A. Normal coordinate analysis of XeF_4 in the Urey-Bradley field. «Molec. Phys.», 1965, 9, № 5, 449—454 (англ.)

Приводятся ф-лы для координат симметрии молекулы и для элементов матрицы кинематич. коэф. и силовых постоянных в этих координатах. Расчет выполнен с потенц. ф-цией Юри — Брэдли, содержащей 4 силовые постоянные. Вычисление частот колебаний выполнено путем диагонализации матриц кинематич. коэф. и силовых постоянных в отдельности. Вычислены элементы матрицы форм колебаний и распределения потенц. энергии по частотам и силовым постоянным. Молекула принадлежит к группе симметрии D_{4h} ; электронный переход $a_{2u} \rightarrow e_u$ запрещен. Показано, что наблюдаемая при 44 150 см^{-1} полоса может быть отнесена к вибронному переходу, разрешенному вследствие взаимодействия с колебаниями типов симметрии a_{2u} и e_u с частотами 291, 586 и 182 см^{-1} .

М. Ковнер

Хе-Р-у
24/62
X

ф. 1966.

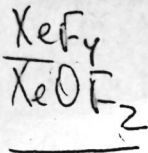
1/2

XeF₄ XI 2462 1965

Normal coordinate analysis of XeF₄ in the Urey-Bradley (U.B.) field. Walter A. Yeranov (Northern Illinois Univ., DeKalb). *Mol. Phys.* 9(5), 449-54(1965)(Eng). This analysis was carried out, within the formalism of Wilson's *G-F* matrix method, by using a IBM 1620 computer. The U.-B. potential consts. and normal coordinates of XeF₄ are given. 17 references.

BGJN

CA 1966, 64, 2
1372 B



XI 1320

1906

7999v Hydrolysis of xenon tetrafluoride at -80° . J. S. Ogden and J. I. Turner (Univ. Chem. Lab., Cambridge, Engl.). *Chem. Commun.* 1966(19), 693-4(Eng). XeF_4 and H_2O vapor were sprayed from 2 sep. vacuum systems onto a CsI window cooled to -80° in an all-metal Dewar vessel. The solid deposit was bright yellow. Three ir absorption bands were observed, at 747, 520, and $490 \pm 5 \text{ cm.}^{-1}$, in addn. to bands due to HF and ice. XeF_4 alone gave a broad band at $282 \pm 3 \text{ cm.}^{-1}$. Deposition of H_2O on top of this produced the same 3 bands, but reaction ceased quickly, presumably because H_2O cannot diffuse into XeF_4 at this temp. The 3 bands grow in intensity together, and disappear together on warming up the CsI window; owing to reaction with the excess of H_2O the final product, identified by its ir spectrum, is XeO_3 . The 3 bands thus belong to the same species. On using D_2O , the higher-frequency bands due to HF and ice shifted to lower frequency, but the 3 low-

+ 1 used

C.A. 1967.66.2



frequency bands remained unaffected. On using a mixt. of $\text{H}_2^{18}\text{O}/\text{H}_2^{16}\text{O}$ ($^{18}\text{O}:^{16}\text{O}$ 3:2) bands were observed at 747, 710, 520, and 490 cm^{-1} . With XeF_4 and H_2O together in a quartz app. at -80° no E.S.R. signal from the product can be observed. The E.S.R. and ir work suggest that the reaction product at -80° contains no H (no D shift with D_2O), 1 atom of O (only 2 bands around 700 cm^{-1} by using a 3:2 $^{18}\text{O}:^{16}\text{O}$ mixt.), and hence, assuming the species contains Xe, and is uncharged, must contain an even number of F atoms (no E.S.R. signal). The ir spectra of the known O fluorides and of XeOF_4 do not correspond to the observed bands; XeOF_4 seems unlikely, and hence XeOF_2 is the most likely product. It is possible that the yellow intermediate is not present in sufficient quantities to give an ir spectrum, and a different colorless compd. is produced at the same time. If the product (yellow or colorless)

O
|

is XeOF_2 , the most likely structure is $\text{F}-\text{Xe}-\text{F}$, i.e., planar, with an $\text{O}-\text{Xe}-\text{F}$ angle of $\sim 90^\circ$. The $\text{O}-\text{Xe}-\text{F}$ angle in XeOF_4 is 92° and is thus similar to the pentafluorides of Br and Cl where the $\text{F}-\text{X}-\text{F}$ angle is $\sim 90^\circ$. XeOF_2 might therefore be compared with ClF_3 , where the $\text{F}-\text{X}-\text{F}$ angle is 89° . On this analogy, XeOF_2 has C_{2v} symmetry, and 6 fundamental normal modes of vibration. By assuming a diatomic Xe-O group, and using the frequency 747 cm^{-1} a value of 4.7 millidynes/A. is obtained for the Xe-O stretching force const. A similar calcn. for XeOF_4 gives 7.2 millidynes/A. compared with 7.08 millidynes/A. by using the full force-field. The bands at 520 and 490 are reasonably assigned to Xe-F stretching vibrations. The Xe-F stretching vibrations in XeOF_4 are not very different from the approx. corresponding vibrations in XeF_4 , and the 2 Xe-F stretching frequencies in XeF_2 are at 557 (asym.) and 496 (sym.) cm^{-1} .

H. Sadek

$\text{XeF}_2, \text{XeF}_4, \text{XeF}_6$ (энергии связей) 1966
XI 1418 3 $\Delta H_f^\circ, \Delta S_f^\circ$
~~первог. таб.~~

Weinstock B., Weaver E. E., Knorr Ch. P.,

Inorg. Chem., 1966, 5(12), 2189-203.

The Xenon-fluoride system. Вязь

M (P)

Ест.: СД 1967, 66, 54, 16146a

Xe F₆

Xe F₄

Xe F₂

(crystalline)

" XI 1422 1266

Willet R. D.

Theoret. Chem. Acta, 1966, 6, 12, 186-187

A comment on the bonding in Xe F₆.

Ref. X₄, 1967, 18, 558



W

7

XeF₄

XI 2459

1966

14 Б51. Полуэмпирические энергетические уровни молекулярных орбит XeF₄. Yeranov Walter A. Semi-empirical molecular orbital energy levels of XeF₄. «Molec. Phys.», 1966, 11, № 1, 85—92 (англ.)

В приближении типа Вольфсберга — Гельмгольца вычислены одноэлектронные энергетич. уровни молекулы XeF₄. Базис включал 4d-, 5s-, 5p-, 5d-, 6s-функции центрального атома и 2s-, 2p-орбиты лигандов, причем рас-

X. 1967. 14

считались 38 электронов молекулы (18 от Xe и по 5 от каждого атома F). В отличие от прежних исследований, использованы аналитические самосогласованные функции атома Xe и учтено перекрывание лиганд — лиганд. Кроме того, резонансные интегралы вычислялись по новой полуэмпирич. ф-ле $H_{ij} = F_x G_{ij} H_{ii} H_{jj} / [(H_{ii} + H_{jj})/2]$, где G_{ij} — интеграл группового перекрывания; $F_x = 2$ как для σ -, так и для π -связей. На основе полученных результатов рассчитан дальний УФ-спектр XeF_4 в хорошем согласии с экспериментом. Обсуждены недостатки прежних расчетов.

Е. М. Шусторович

XeF₄

XI 2459

1966

Semiempirical molecular orbital energy levels of XeF₄. Walter A. Yeranos (Northern Illinois Univ., DeKalb). *Mol. Phys.* 11(1), 85-92(1966)(Eng). By using anal. S.C.F. wave functions for Xe, the 1-electron mol. orbital energies of XeF₄ have been redetd. in the Wolfsberg-Helmholz semiempirical approxn. The present study takes into account ligand-ligand overlap and uses the reciprocal mean for the semiempirical evaluation of the resonance integrals. The calens. fit well with the observed electronic transitions in the far uv. L. C. Cerny

C.A. 1966. 68. 13
19467 b

XeF₄

XI 2459

1966

Д110. Уровни энергий XeF₄, рассчитанные с помощью полуэмпирического метода молекулярных орбиталей. Yeranov Walter A. Semi-empirical molecular orbital energy levels of XeF₄. «Molec. Phys.», 1966, 11, № 1, 85—92 (англ.)

В рамках полуэмпирич. варианта метода МО ЛКАО, предложенного Вольфсбергом и Гельмгольцем с использованием самосогласованных атомных электронных волн. ф-ций Xe, рассчитаны молекулярные орбитали XeF₄ и их энергии. Подчеркивается, что настоящий расчет более полный, чем аналогичные вычисления, предпринятые ранее: учитывается перекрывание между лигандами (атомами фтора), вместо стандартных слейтеровских АО (которые, по-видимому, непригодны для аппроксимации)

ф. 1967. 42

АО с высокими квантовыми числами) применяются АО Хартри — Фока, вместо геометрич. среднего при расчете резонансных интегралов используется усреднение обратных значений. Полученные результаты очень хорошо согласуются с имеющимися спектральными данными для XeF_4 , при этом такое согласие имеет место для всех 5 рассчитанных в работе электронных переходов.

В. Быховский

Впр - 4041-VI

1967

XeF₄

10 Д156. Вычисление силовых постоянных некоторых молекул и ионов типа XY₄ симметрии D_{4h} по «методу кратчайшего решения» в общем валентном силовом поле. Eadini A., Müller A. Berechnung von Kraftkonstanten des allgemeinen Valenzkraftfeldes einiger Moleküle und Ionen vom Typ XY₄ mit D_{4h}-symmetrie nach dem Verfahren der nächsten Lösung [1]. «Molec. Phys.», 1967, 12, № 2, 145—148 (нем.; рез. англ.)

сил. конст.

По «методу кратчайшего решения» вычислены силовые постоянные ряда молекул, имеющих симметрию D_{4h}: XeF₄, JCl₄⁻, PtCl₄²⁻, AuCl₄⁻, AuBr₄⁻ и [Pt(NH₃)₄]. Последние находятся в соответствии с найденными другими методами. Силовая постоянная связи Xe—F увеличивается в ряду XeF₂, XeF₄ и XeOF₄. Полагают, что сила связи растет с уменьшением числа неподеленных пар электронов у атома Хе. Подобным образом силовой коэф. связи JCl в JCl₄⁻ больше, чем в JCl₂⁻. Я. М. К.

09.1967. 10

8

XeF₄

Вер-4041-VI

1967

силовые
постоян.

D20 Б89. Вычисление силовых постоянных общего валентно-силового поля некоторых молекул и ионов типа XY₄ симметрий D_{4h} методом последовательных приближений. Fadini A., Müller A. Berechnung von Kraftkonstanten des allgemeinen Valenzkraftfeldes einiger Moleküle und Ionen vom Typ XY₄ mit D_{4h}-symmetrie nach dem Verfahren der nächsten Lösung (1). «Molec. Phys.», 1967, 12, № 2, 145—148 (нем., рез. англ.)

Вычислены силовые постоянные XeF₄; YCl₄⁻; PtCl₄²⁻; AuCl₄⁻; AuBr₄⁻ и Pt(NH₃)₄²⁺ симметрии которых D_{4h}. Приводится схема преобразования внутренних координат в координаты симметрии для соединения симметрии D_{4h}.

X. 1967 : 20



Из литературных данных взяты частоты колебаний. Расчет силовых постоянных проводился путем уточнения силового поля до совпадения наблюдаемых и вычисленных частот путем последовательных приближений методом G; F-матриц. Приведены силовые поля XeF_4 ; YCl_4^- ; PtCl_4^{2-} ; AuCl_4^- ; AuBr_4^- ; $\text{Pt}(\text{NH}_3)_4^{2-}$. Отмечается возрастание силовой постоянной XY-связи (значения приведены в скобках) в рядах XeF_2 (2,83); XeF_4 (3,02); XeOF_4 (3,26); и YCl_2 (0,94); YCl^- (0,26). Предполагается, что прочность связи растет с уменьшением числа неподеленных электронных пар у атомов Хе.

А. Я. Фридман

Raw

XeF₄

Chem. uocf.

Bcp-4048-VI

1967

25742q Calculation of force constants of the general valence force field for some XY₄-type molecules and ions with D₄-symmetry according to the method of the closest approximation. A. Fadini and A. Mueller (Tech. Hochsch., Stuttgart, Ger.). *Mol. Phys.* 12(2), 145-8(1967)(Ger). The force consts. of the general valence force field are calcd. according to the method of the closest approxn. for XeF₄, ICl₄⁻, PtCl₄²⁻, AuCl₄⁻, AuBr₄⁻, and Pt(NH₃)₄²⁺. DYJG

+5

C.A. 1967 67 6

XeF₄

XI 1223

1967

27452u Vibrations of planar symmetrical XY₄ molecules with application to xenon tetrafluoride. Georg Hagen (Inst. Teoretisk Kjemi, Norges Tek. Høyskole, Trondheim, Norway). *Acta Chem. Scand.* 21(2), 465-72(1967)(Eng). The distribution of vibrations in the appropriate D_{4h} symmetry group is chosen, contrary to other authors, as A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + A_{2u} + B_{2u} + 2E_u: here terms B_{1g}, B_{2g}, and B_{2u} represent the stretching mode, the bending, and the ring deformation along an XY bond. Calcns. are included of the mean sq. perpendicular amplitudes, shrinkage effects, and addnl. results from a harmonic vibration analysis for the Coriolis const. and centrifugal stretching const. This model proves more satisfactory by the emergence of regularities in the Coriolis const. involving the E_u coordinates. Vibrational frequencies adopted are those recently given by Claassen. 20 references. H. Marshall

Cur. not

no. 17.

C.A. 1967-64-6

X/ 1223

1967

XeF₄

10 Д155. Колебания плоских симметричных молекул XY₄, применение к тетрафториду ксенона. Hagen G. o. r. g. Vibrations of planar symmetrical XY₄ molecules with application to xenon tetrafluoride. «Acta chem. scand.», 1967, 21, № 2, 465—472 (англ.)

см. наст.

Дана теоретич. трактовка гармонич. колебаний плоской (квадратной) молекулярной модели XY₄, включающая исследование кориолисовых взаимодействий, колебаний и вращения и центробежного искажения. Особое значение придается вычислению матричных элементов среднеквадратичных амплитуд и связанных с ними величин, а именно: средней амплитуды колебаний и эффектов сокращения. Теория применяется к тетрафториду ксенона, для которого приводятся рассчитанные силовые постоянные вместе с численными результатами для вышеупомянутых величин.

Резюме

ф. 1967. 10

Хе F₄

XI 1223

1967

Силы
постоянны.

20 Б92. Колебания плоских симметричных молекул XY₄ с применением к тетрафториду ксенона. Hagen Georg. Vibrations of planar symmetrical XY₄ molecules with application to xenon tetrafluoride. «Acta chem. scand.», 1967, 21, № 2, 465—472 (англ.)

Дана теоретич. трактовка гармонич. колебаний плоской (квадратной) молекулярной модели XY₄, включающая исследование кориолисовых взаимодействий колебаний и вращения и центробежное искажение. Особое значение придается вычислению матричных элементов среднеквадратичных амплитуд и связанных с ними величин, а именно средней амплитуды колебаний и эффектов сжатия. Теория применяется к тетрафториду ксенона, для которого приводятся рассчитанные силы постоянные вместе с численными результатами для вышеупомянутых величин.

Резюме

И. 1967. 20

XeF_4

1967

2 Д153. Теоретическое определение среднеквадратичных амплитуд колебаний в XeF_2 и XeF_4 . Yeganos Walter A. A theoretical evaluation of the root-mean-square amplitudes of vibration in XeF_2 and XeF_4 . «Molec. Phys.», 1967, 12, № 6, 529—532 (англ.)

Получены ф-лы, выражающие среднеквадратичные амплитуды колебаний ϵ в координатах симметрии молекул XeF_4 и XeF_2 через среднеквадратичные амплитуды колебаний σ валентных и деформационных естественных колебательных координат. По этим ф-лам определены численные значения величин ϵ и σ для 298°K . Средние значения амплитуд колебаний расстояний $\text{Xe}-\text{F}_1$, F_1-F_2 , F_1-F_3 в XeF_4 равны 0,0465; 0,1101; 0,0633 Å. Измеренные значения первых двух величин равны 0,05 и 0,10 Å. Вычисленные соответствующие значения для $\text{Xe}-\text{F}$ и $\text{F}-\text{F}$ в XeF_2 равны 0,0469 и 0,0638 Å. Сравнение этих данных указывает на сходство химич. связей в обеих молекулах.

М. А. Ковнер

9.1968.22

(См. также XeF_2) III



XeF₄

XeF₆

IF₇

BP-XI-1675

1968

90063d Molecular structure of xenon hexafluoride and iodine heptafluoride. W. E. Falconer, A. Buehler, James L. Stauffer, and William Klemperer (Bell Teleph. Lab., Inc., Murray Hill, N.J.). *J. Chem. Phys.* 48 (1), 312-18(1968)(Eng). The deflection of mol. beams of XeF₂, XeF₄, XeF₆, and IF₇ in an inhomogeneous elec. field has been examd. From the defocusing behavior of each of these species, it is concluded that the elec. dipole moment μ is less than 0.03 D. for XeF₄, XeF₆, and IF₇ if these mols. have rigid structures. The upper limit for the polarity of nonrigid (inverting) structures is $(\mu/\Delta^{1/2}) < 0.1 \text{ D.}/(\text{cm.}^{-1})^{1/2}$, where Δ is the sepn. between inversion doublets. These results imply mol. structures with symmetry-forbidden elec. dipole moments for XeF₄, XeF₆, and IF₇. 24 references. RCJQ

gen. moment

C.A. 1968. 68. 20



XeF₄

B9 - X1 - 1675.

1968

дип.
момент

10 Д116. Структура молекул XeF₆ и JF₇. Falco-
ner W. E., Büchler Alfred, Stauffer James L.,
Klemperer William. Molecular structure of XeF₆
and JF₇. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 1, 312—318 (англ.)

Сделана попытка определить структуру молекул XeF₆
и JF₇, изучая отклонение пучков этих молекул в неоднородном электр. поле. Исследовались также пучки XeF₂
и XeF₄. Найдено, что даже при потенциале квадруполь-

69. 1968. 102

☒

ной линзы ~ 35 кВ рефокусировка пучков всех исследованных молекул не превышала $\sim 0,1\%$, тогда как для молекул XeOF_4 и NH_3 условия рефокусировки обеспечиваются при потенциале ~ 1 кВ. В приложении проведен подробный анализ эксперимента, который показал следующее: XeF_2 из-за деформационных колебаний может обладать электр. дипольным моментом $\leq 0,5$ ед. Дебая. Для молекул XeF_4 , XeF_6 и JF_7 в случае жесткой структуры типа симметричного волчка максимально возможный дипольный момент μ не превышает 0,03 ед. Дебая, если же для них возможны инверсные конфигурации (типа F_{1u} для XeF_6), то произведение $\mu\Delta^{1/2} < 0,1$ ед. Дебая/см $^{-1/2}$, где Δ — величина дублетного расщепления колебательных уровней ($\nu=0,1$). Это позволяет значительно сократить число возможных классов симметрии исследованных молекул.

Ю. Н. Беляев

1968

XV 537

XeF₄

м. н.,

V) Д148. Силовое поле, коэффициенты взаимодействия Корнолиса, обобщенные средние квадратичные амплитуды колебаний и постоянные сокращения молекул XeF₄ и XeOF₄. Venkateswarlu K., Babu K. Joseph. Forge field, coriolis coupling coefficients, generalized mean square amplitudes of vibration and shrinkage constants of XeF₄ and XeOF₄. «Acta phys. Acad. scient. hung.», 1968, 24, № 2—3, 139—145 (англ.; рез. русск.)

Решены задачи о норм. колебаниях молекул XeF₄ и XeOF₄. Для первой из них применена система силовых постоянных в валентно-силовых координатах, а для второй — система Юри—Бредли. Приводятся ф-лы для

ф. 1969.

18

X

силовых постоянных в координатах симметрии, различные соотношения между постоянными Корнелиса и ф-лы для вычисления линейного и нелинейного эффектов сокращения. Для обеих молекул получены отнесения частот к типам симметрии и численные значения силовых постоянных, постоянных Корнелиса, коэф. сокращения и обобщенных средних квадратичных амплитуд колебаний межатомных расстояний.

М. А. Ковнер

(69819r) Force field, Coriolis coupling coefficients, generalized mean square amplitudes of vibration and shrinkage constants of XeF_4 and XeOF_4 . Venkateswarlu, K.; Joseph, K. Babu (Kerala Univ., Alwaye, India). *Acta Phys. (Budapest)* 1968, 24(2-3), 139-45 (Eng). Normal coordinate analyses of XeF_4 and XeOF_4 have been carried out by using the general valence and Urey-Bradley force fields, resp. The Coriolis coupling coeffs., generalized mean sq. amplitudes and shrinkage constns. have also been evaluated. The values obtained in both cases have been discussed in relation to each other. According to the simple treatment of bonding in Xe fluorides, there are two nonbonding electron pairs above and below the Xe-F₄ plane in XeF_4 . One of these pairs is utilized in the bonding Xe-O with a consequent increase of charge on Xe. This increased charge reduces the amplitude of the Xe atom leading to a lowering of the corresponding Xe-F frequency value. The shrinkage constants are different in the two mols. It has been shown that the general valence force field and modified Urey-Bradley force field give a satisfactory fit between the observed and calcd. frequencies of XeF_4 and XeOF_4 , resp. The calcd. values agree with the values of previous authors.

A. Kreinheller

1968

XeF_4

XeOF_4

(Ch. 100)
Frequency
Yi

+ 1/2

C.A. 1968-69-18

XI 537

XeF₄

XeOF₄

Chem. Abstr.

XI 540

1968

22128z Force field, Coriolis coupling coefficients, generalized mean square amplitudes of vibration, and shrinkage constants of XeF₄ and XeOF₄. Venkateswarlu, K.; Babu, Joseph K. (Kerala Univ., Alwaye, India). *Acta Phys. Acad. Sci. Hung.* 1968, 24(1), 95-101 (Eng). Normal coordinate analyses of XeF₄ and XeOF₄ were carried out by using the general valence and Urey-Bradley force fields, resp. The Coriolis coupling coeffs., generalized mean sq. amplitudes, and shrinkage constns. were also evaluated. The values obtained in both cases are discussed in relation to each other. The perpendicular mean sq. amplitudes $\langle \Delta z^2 \rangle$ and $\langle \Delta y^2 \rangle$ assocd. with the Xe-F and Xe-O bonds are greater than the corresponding $\langle \Delta z^2 \rangle$ values. The parallel

(+Juv)

C.A. 1968. 69.6

☒

mean sq. amplitude of Xe-F in XeOF₄ is a little lower than in XeF₄. This lowering in the value of $\langle \Delta z^2 \rangle$ of Xe-F may be due to the increase in the charge on Xe owing to the bonding Xe-O. According to the simple treatment of bonding in Xe fluorides (N. Bartlett, 1964), there are 2 nonbonding electron pairs above and below the Xe-F₄ plane in XeF₄. One of these pairs is utilized in the bonding Xe-O, with a consequent increase of charge on Xe. This increased charge reduces the amplitude of the Xe atom leading to a lowering of the Xe-F $\langle \Delta z^2 \rangle$ value. The shrinkage consts. are different in the 2 mols.

A. Krehmeller

XI 40

1969

XeF₆XeF₄ ϵ_i

8 Б117. Пороговое возбуждение электронным ударом и образование отрицательных ионов в XeF₆ и XeF₄. Begun G. M., Compton R. N. Threshold electron-impact excitation and negative-ion formation in XeF₆ and XeF₄. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 6, 2367—2370 (англ.)

Исследованы процессы возбуждения и диссоциации молекул XeF₆ и XeF₄ с образованием отрицат. ионов при электронном ударе в газовой фазе. Регистрация отрицат. ионов проводилась масс-спектрометрич. методом. Показано, что при энергиях электронов $E=0-10$ эв как в XeF₆, так и в XeF₄ образуются гл. обр. ионы F₂⁻, XeF⁻, XeF₂⁻, XeF₃⁻, XeF₄⁻ и F⁻. Определены энергии ряда низлежащих электронных уровней XeF₆ и XeF₄. Отмечено отсутствие уровней этих молекул в интервале 1—3 эв.

М. Р. Алиев

X. 1970. 8

ХеҒу

VII 3778

1969

Туманов Ю.Н.,
Талкин Н.П.

колеб. и вр.
характер-ки;
м. о. 1969, 43, IV, 836



см 264 III

XeF_2 , XeF_4 , XeF_6 (paper E, Do, u. n. / 1971
14 260/2

Basch H., Moskowitz J.W., Hollister
C., Hankin D.,

J. Chem. Phys., 1971, 55, N4, 1922-1933
(ann.)

Self-consistent-field study
of the series XeF_n , $n=2, 4, 6$.

Pl. Linn., 1972, 2520

10

8
9

XeF₂, XeF₄, XeF₆ (I) " 2603 1971

Brundle C.R., Jones G.R., Basch H.,
J. Chem. Phys., 1971, 55, N3, 1098-1104
(ann.)

HeI and HeII photoelectron
spectra and the electronic
structures of XeF₂, XeF₄ and
XeF₆. 10 8 (9)

PkLum, 1972, 2521

XI 1844

1971

XeF_2 , XeF_4 , XeOF_4 (м.н., Vi, перелог. & уау)

Tsao P., Cobb C.C., Claassen H.H.,
J. Chem. Phys., 1971, 54, n12, 5247-5253

ХеF₄

1972

резюме

18 Б25. Определение конформации молекул при комбинированном применении теории взаимодействия связывающих и неподеленных электронных пар и критерия максимального перекрывания. Конформация ХеF₄. Андреев Ст. Комбинирано разглеждане на конфигурации с теорията на взаимодействието на свързващи и изолирани електронни двойки и критерия за максимално припокриване. Конфигурацията на ХеF₄. «Годишн. Висш. хим.-технол. ин-т — София», 1968(1972), 15, № 5, 377—389 (болг.; рез. рус., англ.)

Для повышения достоверности предсказаний наиболее вероятной геометрич. конформации молекул типа MX_n предложено совместно использовать два квантово-хим. метода — критерий максим. перекрывания и теорию Сиджвика—Пауэлла, согласно которой конформация молекулы определяется взаимодействием связывающих и неподеленных электронных пар. Применение каждого из этих методов в отдельности может приводить к неод-

Х. 1973 № 18

позначным результатам. Рассмотрено 8 примеров комбинирования результатов двух методов для структур с симметрией тетраэдра, тригон. бипирамиды, октаэдра, пентагон. бипирамиды, равностороннего треугольника и плоского квадрата. Применение предложенного комбинированного метода проиллюстрировано на примере XeF_4 . В этом случае максимумы величин суммарного перекрывания валентных орбит лигандов и гибридных орбит центрального атома для структур с симметрией искаженного тетраэдра и плоского квадрата практически одинаковы, но энергия взаимодействия электронных пар минимальна в случае квадратной структуры. Поэтому для молекулы тетрафторида ксенона наиболее вероятна структура плоского квадрата. Ю. Удачин

1973

XeF₄

computer.

118479x Combined treatment of configurations using the theory of bonding and lone electron pairs and the maximum overlap method. Configuration of xenon tetrafluoride. Andreev, S. (Bulg.). *God. Vissh. Khimikolekhnol. Inst., Sofia* 1968 (Pub. 1972), 15(5), 377-89 (Bulg). A general method for the theor. detn. of the configuration of EX_n mols. (where X is a halogen atom) involves detn. of all possible configurations with stable electron pairs (using the theory of bonding and long electron pairs) and selection of the most favorable configuration by the max. overlap method. In the case of XeF₄, the max. total orbital overlap calcd. for square and distorted tetrahedron configurations are similar, but the square configuration is more favorable because of the min. lone electron pair interactions.

T. Ordentlich

C.A. 1973, 79 v 20

1973

Xe F₄

Chemistry a topological subject.

Jotham R. W.

Chem. Soc. Rev. 1973, 2(4),
457-74 (Eng.)

Di;

macrom.

(all CH₄; III)

C.H. 1974. 80. N26

CH₄, P₄, XeF₄ (vi) XI 4142 1973

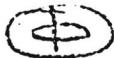
Gotham R.W.;

Chem. Soc. Rev., 1973, 2 (4), 257-77.

Chemistry a topological subject.

C.A. 1974.80.N26.149203c.

10



XeF₄; XeF₆; (реом. стpукт., расчёт) 1973

Lombardi E., XI 3560

Chim. e. ind. (Ital), 1973, 55, 15,
415-416 (англ.)

Theory of stability of rare-gas
halides.

РжХим, 1974, 1538

10



XeF_2 ; XeF_4 (~~гидролиз~~ ~~у.ф. спектры~~) 1973
3378
Comes F. J., Haenzel R., Nielsen U.,
Schwarz W. H. E.
J. Chem. Phys., 1973, 58, N2, 516-29
(англ.)

Spectra of the xenon fluorides,
xenon difluoride and xenon
tetrafluoride, in the far uv
region.

10 Φ (~~суперспектр~~) CA, 1973, 78, N12, 77 6597

50108.6721

(TC) Ch

96625

 XeF_4

1974

од * 4-7990

Adams Chris J. The raman spectra
of solid xenon tetrafluoride and its
adduct with xenon difluoride. "J. Raman
Spectrosc.", 1974, 2, N 4, 391-397

(АНГЛ.)

0276 ДИК

249 252 2 16 8

ВИНИТИ

1979

XeF^+ , XeF_2 , XeF_4 , XeF_6 , XI4327
(кв. мех. расчет).

Гаркин О.П., Соловьев А.Е., Зыбин
А.С., Клименко Н.М.,

Же. структурн. химии, 1974, 15
(3), 539-46

Расчеты электронных структур
соединений галогенов и инертных
газов методом

SCF LCAO MO.

(MO LCAO SSP)

С.А. 1974. 81 N18 111615w

10

(Ф)

XeF₄⁺

XI 4772

1974

162626d Correlation of electronic states of the positive ions of xenon tetrafluoride, xenon oxide tetrafluoride, and iodine pentafluoride. Dekock, Roger L. (Dep. Chem., Am. Univ. Beirut, Beirut, Lebanon). *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 1974, 4(2), 155-61 (Eng). A correlation of electronic states of XeF₄⁺, XeOF₄⁺, and IF₅⁺ ions is presented. The results are interpreted in terms of the MO's of the neutral mols. via Koopman's Theorem. The results strongly suggest that the 1st band in the uv photoelectron spectrum of XeOF₄ contains only 2 electronic states; the Xe-O σ bond in XeOF₄ is at least 1.5 eV more stable than the corresponding Xe lone pair in XeF₄. The interpretation of O lone pair electron energies is complicated by ionic and covalent effects, both tending to stabilize these electrons.

D. L. Coom.

C. A. 1975, 82 v24.

(+2)

⊗

X1-4772

1974

 XeF_4^+

3 Д220. Корреляция электронных состояний положительных ионов тетрафторксенона, окиси тетрафторксенона и пентафториода. Dekock Roger L. Correlation of electronic states of the positive ions of xenon tetrafluoride, xenon oxide tetrafluoride, and iodine pentafluoride. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1974, 4, № 2, 155—161 (англ.)

фотоэл.
спектр

Рассмотрена корреляционная диаграмма и обсуждены фотоэлектронные спектры (ФЭС) для ионов XeF_4^+ , XeOF_4^+ , IF_5^+ . Особое внимание уделено электронной структуре XeOF_4^+ . Обращено внимание на имеющуюся в литературе противоречие в заключениях об отсутствии двоевязности в $\text{Xe}-\text{O}$ (ФЭС) и наличия двое-

Ф. 1975 N 3

+2 X

связности (ЯМР-, ИК-спектры). Утверждается, что отнесение перехода с ионизацией электрона с МО Хе — О-связи к первой полосе ФЭС XeOF_4^+ неправильно, соответствующий уровень лежит на 1,5 эв ниже, чем энергия МО локализованной пары электронов Хе в XeF_4 . Исследованы ионные и ковалентные составляющие, которые важны в интерпретации энергии МО $2p\pi$ локализованной пары электронов кислорода. Утверждается, что наличие компенсации вкладов не позволяет сделать определенного заключения о наличии (или отсутствии) двоевязности в связи ХеО по ФЭС. Г. М. Жидомиров

XI 4135

41014.8471

Ch, TC, Ph

XeFn

40604

02

1974

n = 3; 4;

*4-6843

Lombardi E., Pirola L., Tarantini G.,
Jensen L., Ritter R. Validity of the
 three-center, four-electron model for sta-
 -bility of rare gas halides on the basis
 of exchange perturbation theory.

"Int.J.Quant.Chem.", 1974, 8, N 3, 335-345

(англ.:рез.франц.,нем.)

176 180 2 0 3

0244

ВИНИТИ

XeF_2 , XeF_4 , XeOF_4 , XeO_3 1974.
(спектр Я.М.Р., empty space)

Seppelt K., Rupp H.H.,
Z. Anorg. Allg. Chem., 1974,
409 (3), 331-7.

Xenon-129 NMR spectra of
Xenon compounds...

C.A. 1975. 82 N6. 37004 y 10

⊕

XeF_4
 XeF_6

(see.)

1976
Burdett J. K.
Struct. and Bond, 31,
Berlin, c.a. 1976, 67-105.



(cell. XeF_2 ; III)

60511.3636

Ch, Ph, TC

96200

DeFy. (список)

1976

4-12851

Nielsen U., Schwarz W.H.E.

VUV spectra of the xenon fluorides.

"Chem. Phys.", 1976, 13, N 3, 195-202

(англ.)

0616 лнк

589 591

608

ВИНИТИ

Xe F₄

(I)

Nielsen U.

1976

Schwartz W. H. &

Chem Phys 1976, 13(3)

195-202 (eng)

(cu Xe F₂; III)

Le Ty

Pauling Linus

1976

магн.
запись

"Proc Nat Acad Sci USA"

1976, 73, N5, 1403-1405 (abstract)

(see Ty; III)

Хе Фу

Сидор А. В.

1976

(Редколлегия, М. ф.ц. имени "
АН СССР) см, 1976, 91с,
библиогр. 9 назв. (Рукопись
ген. в ВИНТИ 20 окт.
1976 г. и 3686-76 деп)

(св Хе Фу III)



раса
директр
структ.

Xe F₄

X4-18922
Falconer W. E. et al 1977

"J. Chem. Phys.",
1977, 66, n 12, 5335-5338.

ассоциац.
в шок-
нужках

(сери. KrF₂) III

Cl Fy

Number 6331

1977

Natarjan A, et al

coll. nos. 1;
Vi

Acta chim Acad. sci.
hung 1977(1978), 95, N2-3,
157-161 (1977)

coll. Cl Fy - II

№ F₄

сериал 8416 | 1978

обзор, Л.
Раман
Сенит

Asundi R.K. et al.
Indian J. Pure and Appl. Phys.,
1978, 16, p. 142-150.

NeF₄

Commence 8309 | 1978

сфуктура
молекулы

Andersson S.

Acta crystallogr;
1978, B35, 1321-24

XeF₄

omniucci 6592

1978

Banerjee B. N., et al.

Sci. Group Inorg. Chem., 1978,
17 (6), 1595-99

Gas-phase ESCA studies of
Valence and ● Core Levels in...
(cm. XeF₂; iii)

1978

XeF_4

рентгено-
электр.
спектры

Bancroft G.M., et al.,
"Inorg. Chem.", 1978, 17,
N6, 1595-1599.



(см. XeF_2 ; III)

XeF₄

PtCl₄²⁻

Оттиски 6760

1978

12 Д226. Усовершенствованная программа для вычисления колебательных силовых постоянных. Davidson George, Duce David A. An improved program for calculating vibrational force constants. «J. Mol. Struct.», 1978, 48, № 1, 87—92 (англ.)

Описана программа определения силовых постоянных из экспериментальных колебательных частот, в основе которой лежит известная модификация метода Ньютона — Рафсона (Marquardt D. W., «J. Soc. Ind. Appl. Maths.», 1963, II, 431). Программа отличается от известных лучшей сходимостью в случае больших отличий исходных значений силовых постоянных от конечных, что продемонстрировано на примере расчетов силовых постоянных для молекулы XeF₄ и иона PtCl₄²⁻ с различными исходными значениями их.

Р. Мухтаров:

силов.
пост.

(+1)

4

ф. 1978, N/2

XeF_4

ammuck 6760

1978

PtCl_4^{2-}

curr. note

D_2

(+1) $\boxtimes$

89: 67710n An improved program for calculating vibrational force constants. Davidson, George; Duce, David A. (Dep. Chem., Univ. Nottingham, Nottingham, Engl.). *J. Mol. Struct.* 1978, 48(1), 87-92 (Eng). A new program is described for the calcn. of vibrational force consts., based upon a minimization algorithm. This has certain advantages in comparison with existing programs for solving the vibrational force const. problem, as shown by series of calcns. of approx. valence force fields for XeF_4 and PtCl_4^{2-} .

C.A., 1978, 29, N8

XeF₄

1978

89: 80303b Electric deflection and molecular structure. Determination of polarities of binary fluorides and oxyfluorides. Falconer, W. E. (Bell Lab., Murray Hill, N. J.). *Isr. J. Chem.* 1978, 17(1-2), 31-6 (Eng). The topics reviewed with 63 refs. include: principles of the elec. deflection of a mol. beam by an inhomogeneous d.c. quadrupolar elec. field; and applications of elec.-deflection spectroscopy in obtaining information on mol. polar properties (e.g., dipole moments, polarizabilities) in relation to studies of the mol. structures of triat. difluorides (e.g., alk. earth fluorides, transition metal fluorides, XeF₂), tetraat. trifluorides (e.g., lanthanide fluorides), binary tetrafluorides (e.g., XeF₄, SiF₄, transition metal and lanthanide fluorides), binary pentafluorides (e.g., pnictogen fluorides, halogen fluorides, transition metal fluorides), and ternary oxide fluorides (e.g., IO₂F₃, XeOF₄, ReO₃F, OsO₂F₃).

monocycle
cylinder.

(+5)



P.A. 1978, 89, N16

ХеF₄

1978

11 Б29. — Конструирование наилучших гибридных орбиталей (ХеF₂) и ХеF₄ методом максимального перекрытия. Petráň P., Valko L. Konstruktia najlepších hybridných orbitálov ХеF₂ a ХеF₄ metódou maximalného prekryvu. «Zb. pr. Chemickotechnol. fak. CVST, 1975—1976». Bratislava, 1978, 15—20 (словац.; рез. рус., нем.)

построены
гибридные
орбитали

Построены наилучшие гибридные орбитали атома Хе в молекулах ХеF₂ и ХеF₄. При расчете применялось условие максим. перекрытия. Результаты расчета находятся в хорошем согласии с эксперим. значениями и позволяют интерпретировать нек-рые физ. и хим. св-ва приведенных молекул.

Автореферат

сс. 1979, N11

оттиск 103.19

1980

XeF₄

4 Б41. Исследования методом ССП—МО в приближении псевдопотенциала гипervalентных соединений. I. XeF₂ и XeF₄. Bartell Lawrence S., Rothman Michael J., Ewig Carl S., Van Wazer John R. Pseudopotential SCF—MO studies of hypervalent compounds. I. XeF₂ and XeF₄. «J. Chem. Phys.», 1980, 73, № 1, 367—374 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода псевдопотенциала рассчитаны электронное строение и силовое поле молекул XeF₂ и XeF₄. Псевдопотенциал, построенный неэмпирически с использованием оператора Филлипса—Клейнмана, представлялся комбинацией 7 гауссовых ф-ций (ГФ) и отличался для *s*- и *p*-орбиталей. В расчетах использовались два базиса: в 1-м, миним. базисе, каждая из слейтеровских орбиталей оптимизированного атомного базиса аппроксимировалась 4ГФ; во 2-м базисе, также миним., параметры показателей экспонент находились

Кв. мех.
расчет

17

Х. 1981. 144

аппроксимацией атомных двухэкспонентных базисов. Рассчитанные орбитальные энергии XeF_2 и XeF_4 хорошо согласуются с данными прямых неэмпирич. расчетов этих молекул методом ССП МО ЛКАО. Рассчитанные равновесные длины связей 2,068 Å для XeF_2 и 2,037 Å для XeF_4 на 5% превышают соотв-щие эксперим. значения, однако сжатие длин связей на 0,03 Å при переходе от XeF_2 к XeF_4 , наблюдаемое экспериментально, в расчетах передано правильно. Рассчитанные силовые постоянные вал. и деф. кол. в обеих молекулах хорошо согласуются с экспериментом. Частоты вал. кол., вычисленные при эксперим. значениях равновесных длин связей, на ~25% превышают эксперим. значения. Роль несвязывающих взаимодействий фтор—фтор оценена путем вычисления разности энергий системы $\text{F}_2 \dots \text{F}_2$ с симметрией группировки D_{2d} и двух изолированных молекул F_2 .

И. А. Тополь

Xe F₄

Comptes 10834

1980.

Lutar K; et al.

preliminary
results.

F + Xe

J. Fluor. Chem., 1980,
16 (6), p 638.

BP-XI-6346

1980

XeF_4

Значен.
свойств

Scheire L.,
Phariseau P., et al.,

"Physica", 1980, A101,
N1, 22-48.

(all. XeF_2 ; III)

LeFy

1981

Соловьев А. Е. и др.

г. "12^е Мелеховский съезд
№1; по общ. и прикл. Железнодорож.
Респ. докт. и сообщ. №3"
М., 1981, 126.

(Сол. СС F3; III)

XeF₄

1982

Maria Zorlescu Tg. Jic.

Rev. fiz. si chem., 1982,

reomempr,
emprukm.

19, N 7, 235-237.

(сир. XeF₂ ; III)

XeF₄

1983

Bancroft G.M., Bristow D.J.
et al.,

(Xe-paref)

Inorg. Chem., 1983, 22(19),
2673-7.

XeF₄

1984

Mitsunaga, Sigeru,
Klobukowski, Marjusz,
et al.

теор.
расчет
эксперим.
наблюдения.

J. Phys. Chem. 1984,
88 (21), 4880-6.

• (Cor. F₂; III)

XeF₄

lom 230271

1986

Larsson S., Pyykkö P.,

неоп.
раств

Chem. Phys., 1986, 101,
N 3, 355-369.

XeF₄

1986

Pösch N., Pyykko P.

u. n. Mol. Phys., 1986, 57,
N1, 193-200.

(см. ● XeF₂; III)

Хет4

(OM. 29649)

1988

Емцов Н. С.

расчет
сил.
по столбам.

Ж. Риз. Хмель, 1988, 62, N 6, 1651-

1988, 62, N 6, 1651-



- 1653.

F_4Xe^+
(XeF_4^+)

com. 30490

1988

Jacox M. E.,

Ti, J. Phys. and Chem. Ref.

Di; Data, 1988, 17, N 2, 467.

XeF₄

1988

Herdon William C.

J. Mol. Struct. Theo-
chem. 1988. 169. C.

u.n.

● 389-401.

(see XeF₂; III)

ХеF₄

(Дм. 31 738)

1989

18 Б1114. Электронографическое исследование структуры тетрафторида ксенона в газовой фазе / Ивашкевич Л. С., Ищенко А. А., Киселев Ю. М., Романов Г. В., Соколов В. Б., Спиридонов В. П. // Докл. АН СССР.— 1989.— 305, № 6.— С. 1396—1400.— Рус.

Методом газовой электронографии с использованием более совершенной методики анализа и привлечением спектральных данных повторно исследована молекула ХеF₄ (I). Установлено, что структура I м. б. удовлетворительно описана на основании квазижесткой модели симметрии D_{4h} при значении $r_a(\text{Xe}-\text{F}) = 1,948(7)$ А. С использованием параметра морзе-подобной потенциальной ф-ции $a(\text{Xe}-\text{F}) = 1,26 \text{ \AA}^{-1}$, определенного на основании спектроскопич. данных для молекулы ХеF₂ (J. Chem. Phys.— 1969.— 51.—

М. П.

Х. 1989, N 18

С. 2355), из анализа, основанного на кумулянтном представлении интенсивности рассеяния (см. РЖХим, ссылка 14), получена величина $r_e(\text{Xe}-\text{F}) = 1,943$ (7) Å. При этом все частоты колебаний, кроме $\nu_4(b_{1u})$ и $\nu_7(e_u)$, зафиксировали на значениях, измеренных спектроскопически (J. Amer. Chem. Soc.— 1963.— 85.— С. 1927). Для частот $\nu_4(b_{1u})$ и $\nu_7(e_u)$ получены оценки (см^{-1}) 215(20) и 135(20), соотв., хорошо согласующиеся с имеющимися лит. данными.

В. П. Спиридонов

XeF₄

1989

(Im 31738)

структура

, 111: 202180c Electron-diffraction study of the structure of xenon tetrafluoride in gas phase. Ivashkevich, L. S.; Ishchenko, A. A.; Kiselev, Yu. M.; Romanov, G. V.; Sokolov, V. B.; Spiridonov, V. P. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1989, 305(6), 1396-400 [Phys. Chem.] (Russ). The radial distribution function is given, and is compared with theor. results; the parameters are detd. in relation to IR spectral data for XeF₄. The harmonic force field and vibrational frequencies are calcd.

C.A. 1989, 111, N 22

XeF₄ 1990
Lu Qi-Shi, Liu Chao-
Meng.

Хуацзоу цоэбао. Acta
u. n. Chim. Sin. 1990. 48, n 9.
C. 841 - 845.

(car. ● XeF₂; III)

XeF_4

1991
Nabiev Sh. Sh., Klimov V. D.
et al.,

M. A.
J. Fluor. Chem. 1991,
54, N1-3, p. 344.

(an. XeF_4 ; III)

ХеF₄

1993

8 Б3123. Молекулярная динамика ХеF₄ и ХеF₆ в безводном фтористом водороде /Набиев Ш. Ш. //Высококист. вещества .— 1993 .— № 5 .— С. 138—158 .— Рус. ;рез. англ.

Изучены спектры КР систем ХеF_n—HF (n=2,4) в широкой области колебат. частот и конц-ий. Показано, что в системе ХеF₆—H наряду с ионизованными мономерными и полимерными модификациями гексафторида ксенона, такими как $([ХеF_5]^+F^-)_n$ (n=1, 2, 4), существует целый ряд ассоциатов типа $(ХеF_6)_m - ([F_5Хе]_n^{δ+} ... n[FHF]^{δ-})$ образующихся в результате донорно-акцепторного взаимодействия оснований и к-ты. Проведено отнесение колебат. полос $([ХеF_5]^+F^-)_n$ (n=1, 2, 4) и указанных ассоциатов. Вычислены временные корреляц. функции колебат. и вращат. релаксации для вал. кол. $\nu_1(A_{1g})$ тетрафторида ксенона (552 см⁻¹) и трех ионизованных форм гексафторида ксенона (596—625 см⁻¹), а также соотв-щие характеристич. времена этих процессов. Сделан вывод, что при формировании контура полос $([ХеF_5]^+F^-)_2$ и $([ХеF_5]^+F^-)_4$ вклад в основном вносит процесс колебат. дефазировки, в то время как в случае ХеF₄ и $([ХеF_5]^+F^-)$ вклады процессов колебат. и вращат. релаксации практически совпадают.

М.П.

④ ХеF₆
Х. 1994, № 8

XeF_y

1994

Nabiev Sh.Sh.,

Ostrovkova I.I. et al.

Proc. SPIE-Int. Soc. Opt.

(Vi)

Eng. 1994, 2205, 261-3.

(сер. XeF₂; III)

XeF₄

1995

123: 66125j Electron correlation and relativistic effects in xenon tetrafluoride. Styszynski, Jacek; Malli, Gulzari L. (Dep. Chem., Simon Fraser Univ., Burnaby, BC Can. V5A 1S6). *Int. J. Quantum Chem.* 1995, 55(3), 227-35 (Eng). Ab initio all-electron fully relativistic Dirac-Fock SCF and Dirac-Fock-Breit calcns. are reported for the XeF₄ mol. at various internuclear distances assuming the exptl. D_{4h} geometry with our recently developed relativistic universal Gaussian basis set. The nonrelativistic limit Hartree-Fock calcns. were also performed for XeF₄ at various internuclear distances. The calcd. relativistic correction to the total energy of mol. at the Dirac-Fock level is ~ -5856 eV, whereas the magnetic part of the Breit correction to the electron-electron interaction is calcd. as ~ 177 eV. The electron correlation effects were included in the nonrelativistic Hartree-Fock calcns. using the second-order Moeller-Plesset (MP2) theory, and the calcd. correlation energy for XeF₄ is -71 eV. The basis-set superposition error (BSSE) was estd. by using the counterpoise method for Xe and F. The inclusion of both the relativistic and electron correlation effects in the calcd. total energies of F, Xe, and XeF₄ as 1.952 Å and 5.59 eV, resp., which are in excellent agreement with the exptl. values of 1.953 Å and 5.69 eV.

ab initio
pacem, Ho
cmrykypa, D

C.A. 1995, 123, N 6

resp., for XeF_4 . The contribution of the electron correlation and relativistic effects to the dissocn. energy of XeF_4 is 8.11 and 0.05 eV, resp. The Breit interaction, however, contributes only 0.02 eV to the dissocn. energy of XeF_4 . Electron correlation is most significant for the prediction of an accurate value of dissocn. energy, whereas relativistic effects are very important for the prediction of spin-orbital splitting as well as the energies of the orbitals, esp. the inner orbitals of XeF_4 .

XeF₄

Om 38394

1996

ab initio
param)
фуре ук
сукмп, м.н.

124: 273206x Ab initio calculations and high resolution infrared investigation on XeF₄. Buerger, H.; Ma, S.; Breidung, J.; Thiel, W. (Fachbereich Chem., Univ. Wuppertal, D-42097 Wuppertal, Germany). *J. Chem. Phys.* 1996, 104(13), 4945-53 (Eng). Ab initio calcns. employing effective core potentials and polarized triple-zeta basis sets were carried out for XeF₄ at the following levels: SCF theory, Moeller-Plesset 2nd-order perturbation theory (MP2), and coupled cluster theory with single and double excitations and a perturbational treatment of triple excitations (CCSD(T)). Pronounced correlation effects are found, esp. for the Xe-F bond length and the vibrational frequencies. The theor. predictions for the harmonic and anharmonic force fields and the assocd. spectroscopic consts. have guided the anal. of the exptl. data. FTIR spectra of monoisotopic ¹³⁶XeF₄ were recorded between 100-1170 cm⁻¹ with an effective resohn. of 0.002-0.004 cm, and a rotational anal. was performed for the ν_2 band. The high resohn. results provide accurate mol. parameters for the ground state and the $\nu_2 = 1$ excited state of XeF₄ and allow a precise detn. of the ground state Xe-F bond length, $r_0 = 193.487(3)$ pm. The agreement between the exptl. and the correlated theor. results is generally quite good.

C. A. 1996, 124, N 20

1996

F: XeF₄

P: 3

16B1174. Исследование XeF[4] неэмпирическими методами расчета и с использованием ИК-спектроскопии высокого разрешения. Ab initio calculations and high resolution infrared investigation on XeF[4] / Burger H., Ma S., Breidung J., Thiel W. [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 13. - С. 4945-4953. - Англ.

РЖХ 1997

Неэмпирическими методами ССП, МП2, связанных кластеров с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений и использованием эффективных основных потенциалов, и поляризованных трехэкспонентных базисов исследована молекула $\text{XeF}[4]$. Найдено значительное влияние корреляционной энергии на длину связи Xe-F и колебательные частоты. Рассчитаны гармоническое и ангармоническое силовые поля и спектроскопические параметры. Рассчитанные величины находятся в хорошем согласии с эксперим. данными, полученными для моноизотопического $\{^{136}\}\text{XeF}[4]$ с использованием ИК-спектроскопии с фурье-преобразованием в области $100\text{-}1170\text{ см}^{-1}$. Библ. 63.

1999

F: XeF₄

P: 3

131:329283 Comparative analysis of the mass-spectra and thermochemical characteristics of XeF₂, XeF₄, and XeOF₄. Zelenov, V. V.; Aparina, E. V.; Kashtanov, S. A.; Dodonov, A. F.; Aleinikov, N. N. Pil. Inst. Energet. Pr Khim. Fiz., Ross. Akad. Nauk Chernogolovka, Russia Khim. Fiz., 18(4), 83- (Russian) 1999 Using low-voltage electron ionization the wide energy distribution of 0. eV the authors obtained the mass spectra of the individual

substances XeF, XeF₄, and XeOF₄ in the energy range 10-30 eV. Inverse spectra regularization allows the elimination of electron energy spreading, detected by the substance ionization energies (IEs) and fragment ion appearance energies (AEs). On basis of the exptl. IE and AE values the authors calcd. the XeF ionization energy, the bond breaking energies for F-XeF₃, O-XeF₄, F-Xe+, F-XeF+, F-XeF₃+, and O-XeF₄+. On the basis of the temp. dependence of the satn. pressure the authors detd. the enthalpies of sublimation and evapn. for X