

NeFn

1983

28880

GASEOUS FLUORIDES OF XENON. Martin H.

Studler and Eric N. Sloth (Argonne National Lab., Ill.).

J. Phys. Chem., 67: 925-6 (Apr. 1963). (TID-17494; UAC-6908)

Mass spectrometric analyses were carried out on the ions produced by electron bombardment of the vapors from solid XeF_4 . The following ions were identified: Xe^+ , XeF^+ , XeF_2^+ , XeF_3^+ , XeF_4^+ , Xe^{2+} , XeF^{2+} , XeF_2^{2+} , XeF_3^{2+} , XeO^+ , XeOF^+ , XeOF_2^+ , XeOF_3^+ , and XeOF_4^+ . The ions XeF_2^+ , XeF_4^+ , XeOF_3^+ , and XeOF_4^+ probably arise from independent neutral species while the others are fragmentation products. It is concluded that XeF_2 exists as an independent species of greater volatility than XeF_4 . The possible existence of XeOF_3 and XeOF_4 is discussed. (D.L.C.)

 XeF_n

NSA-1983-17-17

1963

XeF

Studier M. H., Sloth E. N.,

XeF₂

J. Ph. Ch., 1963, 67, 925

XeF₂

репродукция группы Ксенона

XeF₄

u. XeF₄or

- полимеры p

mass-change

• XeF₄

XeFn (кв. мех. расчѐт) 1969

№ 3638

Александр С. Андреев Ст.,
Год. Высш. Химикотехнол. Инст.
София, 1969 (Pub. 1971), 16, N1, 45-56

(50м.)
Best values of the Coulomb
integrals in a molecular
orbital treatment of xenon
fluorides.

10
Ⓟ (англ. издание) CA, 1973, 79, N10, 57869a

XeF_n

1971

16 Б20. Исследование молекул XeF , XeF_3 , XeF_3^+ , XeF_5 и XeF_5^+ методом молекулярных орбиталей с использованием надежных значений кулоновских интегралов. Андреев С. т. Разглеждане на молекулите XeF , XeF_3 , XeF_3^+ , XeF_5 и XeF_5^+ в схема на терията на молекулните орбитали с използване на надеждни стойности на кулоновите интегралы. «Годишн. Висш. хим.-технол. ин-т — София», 1969(1971) 16, № 1, 33—44 (болг.; рез. рус., англ.)

Электр.
строен.

С использованием значений диагональных матричных элементов, полученных в пред. работе (см. пред. реф.), методом Вольфсберга—Гельмгольца исследовано электронное строение XeF (I), XeF_3 (II), XeF_3^+ , XeF_5 (III) и XeF_5^+ . Ср. энергии связи для I, II (симметрия C_{2v}) и III (симметрия C_{4v}) найдены равными —4, 20 и 24 ккал/моль соответственно.

По резюме.

X. 1973 N 16

1972

XeF_3
 XeF_3^+

Электр
Струк.

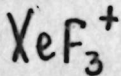
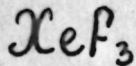
У 18 Б24. Применение метода МО ЛКАО к молекулам XeF_3 и XeF_3^+ . Андреев Ст. Изследване на XeF_3^+ и XeF_3^+ с теорията на МО ЛКАО. «Годишн. Висш. хим.-технол. ин-т — София», 1968(1972), 15, № 5, 205—212 (болг.; рез. рус., англ.)

По методу Вольфсберга и Гельмгольца с учетом только $p\sigma$ -АО рассмотрено электронное строение молекул XeF_3 (I) и XeF_3^+ (II). Вычисления проводились для трех различных геометрич. конфигураций с симметрией D_{3h} , C_{2v} и C_{3v} . Для I, согласно расчету, наиболее устойчивой конфигурацией должна быть структура с симметрией C_{2v} , имеющая наибольшее значение (по абс. величине) суммарной орбитальной энергии. Для II выбор стабильной геометрии неоднозначен — наиболее вероятны D_{3h} или C_{2v} . Распределение зарядов на атомах в рассмотренных молекулах характеризуется значит. переносом электронов от атома ксенона к атомам фтора.

По резюме

X. 1973 N 18

1972



m. n.

kb. mex.
paerem

45943g MO LCAO treatment of xenon trifluoride and xenon trifluoride(+) molecules. Andreev, S. (Bulg.). *God. Vissh. Khimikotekhnol. Inst., Sofia* 1968 (Pub. 1972), 15(5), 205-12 (Bulg). A MO LCAO treatment of XeF_3 and XeF_3^+ is used to obtain the total orbital energy values for the symmetry forms D_{3h} , C_{2v} , and C_{3v} ; the min. values, corresponding to the preferred symmetry, correspond to C_{2v} for XeF_3 and to C_{2v} or D_{3h} for XeF_3^+ . In all cases there is considerable charge sepn. from Xe to F; the calcd. bond energies are 1.87 eV for XeF_3 and 1.57 eV for XeF_3^+ and are close to those of XeF_2 and XeF_4 .

C. D. Kopkin

C. A. 1973. 79 N 8

30726.8742

TE, Ch

 XeF_2 ; XeF_4 ; XeF_6
40771

Дж. С. Р. ...

1973
25-1216

Liskow Dean H., Schaefer Henry F., III,
Bagus Paul S., Liu Bowen.

Probable nonexistence of xenon monofluoride as a chemically bound species in the gas phase.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, N 12,

4056-4057

(англ. 0923 ник

903 906 09 10

ВИНИТИ

40510.3701
TE,Ch

40771

XeF_2
 XeF_4 ; XeF_6

02

1974

2113

Carroll T.X., Shaw R.W., Jr, Thomas T.D.,
Kindle C., Bartlett N.
Electron distribution in the xenon fluo-
rides and xenon oxide tetrafluoride by
ESCA and evidence for "Orbital
Independence" in the xenon-fluorine
bonding.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N. 7,
1989-1996 (англ.)

0100

085 086 0 0 8

ВНИИТИ

Xe F_x[±]

1974

x = 1-6

Чаркис О. П. и др.

Proc. Int. Conf.
Coord. Chem., 16th
1974, 2.3a, 3/p.

(кв. всех
населен.
и. с.рук.)

(all. Ae F_x[±]) III

1974

XeF_n

№ Д140. Пригодность трехцентровой четырехэлектронной модели для анализа стабильности галогенидов инертных газов на основе теории обменных возмущений. Lombardi E., Pirola L., Tarantini G., Jensen L., Ritter R. Validity of the three-center, four-electron model for stability of rare gas halides on the basis of exchange perturbation theory. «Int. J. Quant. Chem.», 1974, 8, № 3, 335—345 (англ.; рез. франц., нем.)

геометр.
стабильн

Исследована стабильность галогенидов инертных газов RX_n ($n=2, 3, 4$; $R=Xe, Kr$; $X=F, Cl$) с помощью $(n+1)$ -центровой $(n+2)$ -электронной модели. От каждого атома X учитывается 1 электрон, от центрального атома $n-2$ электрона. Волн. ф-ция Φ представляется в виде линейной комбинации спин-спроектированных произведений орбитальных ф-ций на каждом центре, а энергия находится по теории обменных возмущений до 2-го порядка включительно. Получено, что XeF_4 стабильно.

ф. 1975 №1

(43) ☒

лен лишь при геометрич. конфигурации типа симметрии D_{4h} и при условии синглетности состояния; KrF_4 , если и стабилен, то с очень малой энергией связи; остальные тетрагалогениды Xe и Kr, нестабильны. Тригалогениды Xe и Kr нестабильны (конфигурации D_{3h} и C_{2v}), из дигалогенидов стабильны лишь фториды при конфигурации $D_{\infty h}$.

А. И. Дементьев



XeF₆

глас. сир.

1974

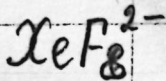
9 Б137. Электронная и геометрическая структура свободной молекулы XeF₆. Nielsen U., Haensel R., Schwarz W. H. E. Electronic and geometric structure of the free XeF₆ molecule. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 9, 3581—3586 (англ.)

В области 50—170 эв исследовано поглощение синхротронного излучения в газе XeF₆. Полосы вблизи 66 эв отнесены к 4d→5p-переходам Xe. Вблизи 140 эв и ниже 64 эв не найдены полосы, предсказанные моделью электронной изомеризации Гудмана. Не найдены также ридберговые 4d-серии при 72—75 эв, а широкая полоса вблизи 100 эв отнесена к 4d→εf-ионизации. Результаты согласуются с моделью молекулы XeF₆ с симметрией O_h или квази-O_h и с основным состоянием типа 5s² ¹A_{1g}.

М. Р. Алиев

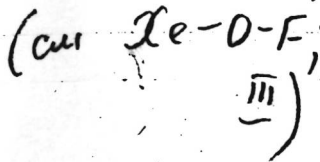
х. 1975. №9

1974



геометр
расчет

23 Б38. Изучение молекулы гексафторида ксенона в модели кристаллического поля. II. Сопоставление с другими молекулами шестивалентного ксенона. Wang Sylvester Y., Lohr Lawrence L., Jr. Crystal-field model study of the xenon hexafluoride molecule. II. Comparisons with other hexavalent xenon molecules. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 10, 3916—3919 (англ.).



х. 1974. N23

В рамках двухэлектронной модели крист. поля (см. пред. реф.) проведен расчет молекул $\text{XeOF}_4(C_{4v})$, $\text{XeO}_3(C_{3v})$, $=\text{XeO}_2\text{F}_2(C_{2v})$ и иона XeF_8^{2-} . Значения орбитальных энергий получены с одним набором энергетич. параметров. Проведенное сопоставление полученных результатов с расчетом расширенным методом МО Хюккеля показало их качеств. соответствие. Для иона XeF_8^{2-} проведены расчеты с различными значениями деформ. углов. Найдена оптим. геометрия. С. Долин

60514.9169

Ch, TC

58811GR

 XeF_3^-

1976

* 13-12837

Liebman Joel F. On the existence of the trifluoroxenate (II) ion, XeF_3^- : comments on "The 'base catalyzed' fluorination of SO_2 by XeF_2 ". "J. Fluor. Chem.", 1976, 7, N 5, 531-535 (англ.)

0619 пик

593 594

ВИНИТИ

60511.3636

Ch, Ph, TC

96200

ReF₃ (omnif)

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



Coord. no.

7

1978

89: 120031v Tautomerism in xenon hexafluoride. An investigation of xenon hexafluoride and its complexes by Raman spectroscopy. Adams, Chris J.; Bartlett, Neil (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, Calif.). *Isr. J. Chem.* 1978, 17(1-2), 114-25 (Eng). Raman spectra are reported for complexes of XeF_6 with the fluoride-ion acceptors BF_3 , PdF_4 , PF_5 , AsF_5 , RuF_5 , PtF_5 , and AuF_5 , and for solns. of XeF_6 in HF and in WF_6 . Vibrational assignments were made for the cations XeF_5^+ and $\text{Xe}_2\text{F}_{11}^+$, and a normal coordinate anal. was made for XeF_5^+ . XeF_6 , present in concd. soln. in HF as $[\text{XeF}_5^+\text{F}^-]_4$, progressively ionizes on diln. to give $\text{Xe}_2\text{F}_{11}^+$ and XeF_5^+ ; on the other hand, in WF_6 soln. $[\text{XeF}_5^+\text{F}^-]_4$ exists in equil. only with mol. XeF_6 .

C.A., 1978, 89, N14

XeF_3

summary 6749 1978.

Baird N.C.

monomers,
reactions

J. Chem. Educ.

1978, 55(7), 412-417

№ F₆

1948

кв. макс.
расшир

Симаре В. М. et al
J. Am. Chem. Soc. 1948,
70(8), 2334-9

см. P F₆ - III

XeF_5^+

XeF_6

M. N.; Ae⁻
Kb. sec.
fact

93: 120736m Pseudopotential SCF-MO studies of hypervalent compounds. II. Xenon fluorides (XeF_5^+ and XeF_6). Rothman, Michael J.; Bartell, Lawrence S.; Ewig, Carl S.; Van Wazer, John R. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(1), 375-81 (Eng). Structures of both XeF_5^+ and XeF_6 are governed by a stereochem. active lone pair. In the case of the square-pyramidal cation, the $\text{F}_{\text{ax}}\text{-Xe-F}_{\text{eq}}$ angle calcd. for the bare ion is within 2° of the value obsd. in the cryst. complex. For the hexafluoride, however, the calcd. deformation from O_h symmetry is appreciably greater than that deduced from electron diffraction intensities. Nevertheless, the results of calcs. are in sufficient conformity with the Bartell-Gavin (1965), Pitzer-Bernstein (1975) interpretation and at variance with the 'electronic-isomers' interpretation to leave little doubt about the answer. With increasing fluorination in the XeF_n series, the HOMO-LUMO energy difference decreases and the second-order Jahn-Teller effect is enhanced. Increasing fluorination (and increased pos. charge of Xe) also shortens bond lengths; calcd. shortenings parallel obsd. shortenings. Steric aspects of the structure and force field are diagnosed and found to be minor.

1980

10378
Dmmdm

CA 1980.93 v12

XeF₆

1980

Scheire L., et al

Physica, 1980, A 101, n1,
22-48.

расчет
спектр.
строения

• ссм XeF₂ и III

Xe_2F^-

1982

5 Д625. Исследование излучения эксимера Xe_2F при возбуждении электронным пучком. Xe_2F eximer emission studied using electron-beam excitation. Tit-tel F. K., Sauerbrev R., Walter W., Wil-son W. L. «Appl. Phys.», 1982, B29, № 3, 148 (англ.)

Получены спектры флуоресценции эксимеров XeF ($B \rightarrow X$, $\lambda_{\text{max}} = 350$ нм), XeF ($C \rightarrow A$, $\lambda_{\text{max}} = 475$ нм) и Xe_2F ($\lambda_{\text{max}} = 610$ нм). Возбуждение флуоресценции осуществлялось импульсным пучком электронов в смесях высокого давления Ar/Xe/NF_3 и Xe/NF_3 . Установлено, что Xe_2F^* образуется в результате тройного столкновения с участием XeF (B, X). Определены константа скорости тушения XeF (B) ($2 \cdot 10^{-13} \text{ см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$) и константы скорости бимолекулярных реакций (в $\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$): $\text{Xe}_2\text{F} + \text{NF}_3 \rightarrow \text{продукты}$, $(7,8 \pm 1,2) \cdot 10^{-13}$; $\text{Xe}_2\text{F} + \text{Xe} \rightarrow \text{продукты}$, $(1,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-13}$; $\text{Xe}_2\text{F} + \text{Ar} \rightarrow \text{продукты}$, $(2,8 \pm 0,9) \cdot 10^{-14}$. Измерено радиационное время жизни Xe_2F (152^{+19}_{-10} нс). В. А. Е.

спектр, $\hat{t}$;

ср. 1983, 18, N5

Xe_2F^*

1982

97: 171800t Emission spectrum and quenching kinetics xenon fluoride excimer (Xe_2F^*). Walter, W.; Sauerbrey, R.; Tittel, F. K.; Wilson, W. L., Jr. (Rice Quantum Inst., Rice Univ., Houston, TX 77251 USA). *Appl. Phys. Lett.* 1982, 41(5), 387-9 (Eng). Expts. demonstrating the existence of the triat. rare-gas excimer Xe_2F^* are reported. Three-body quenching of $\text{XeF}^*(B,C)$ yields Xe_2F^* , which radiates around 610 nm with a bandwidth full width at half-max. (FWHM) of 120 nm. The 2-body quenching consts. of Xe_2F^* by NF_3 , Xe , and Ar as well as the radiative lifetime of 152 ns were detd.

спектр
испускания

C. A. 1982, 97, N 20.

Xe_2F^*

1982

3 Д856. Эмиссионный спектр и кинетика тушения Xe_2F^* . Emission spectrum and quenching kinetics of Xe_2F^* . Walter W., Sauerbrey R., Tittel F. K., Wilson W. L., Jr. «Appl. Phys. Lett.», 1982, 41, № 5, 387—389 (англ.)

Эмиссионный
спектр

Исследованы спектры и кинетика затухания люминесценции газовых смесей $\text{Ar}(\text{Ne})-\text{Xe}-\text{NF}_3$ при возбуждении пучком электронов с энергией 1 МэВ, плотностью тока 200 А/см² и длительностью импульса 10 нс. Спектральная полоса с максимумом ~ 610 нм и шириной на полувысоте ≈ 130 нм соотнесена с излучением эксимеров Xe_1F^* , образующихся предположительно в трехчастичных столкновениях с участием XeF и Xe . Радиационное время жизни Xe_2F^* оценено ≈ 152 нс. Определены бимолекулярные константы скорости тушения Xe_2F^* в столкновениях с NF_3 , Xe и Ar , составившие соответственно $(7,8 \pm 1,2) \cdot 10^{-13}$, $(1,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-13}$ и $(2,9 \pm 0,9) \cdot 10^{-14}$ см³·с⁻¹.

С. Литке

ср. 1983, 18, №3

Xe₂ F

1983

Sauerbrey R., Walter W.,
et al.

Vi, eremp

Excimer Lasers. Meet.
OSA, Lake Tahoe, Nev.
1983. New York, 1983, 249.
255.

●
(cell. XeF; III)

Спектралн.
характер.
плэны

(у Хумкова)

1983

Зайцев В.В., Хумкова Е.Ю
и др.,

$\text{Xe} + \text{F}_2$

Спектральные характер. плэ-
ны $\text{Xe} + \text{F}_2$.

Тезисы докладов XIX Всесоюзного
Всесоюзного по спектроскопии,
Томск, ● 1983.

Xe_2F^*

1985

Басов Н. Г., Дамель-
чев В. А. и др.

спектр Квант. электрон.
(Львеква), 1985, 12, N 7,
1425-1430.

●
(сер. XeF^* ; III)

XeF₆

1987

19 Б1031. Неэмпирические исследования методом ССП молекулярной структуры XeF₆, IF₆⁻ и TeF₆²⁻ в неоктаэдрических геометриях. Ab initio SCF studies of the molecular structure of XeF₆, IF₆⁻, and TeF₆²⁻ in non-octahedral geometries. Klobukowski M., Huzinaga S., Seijo L., Barandiarán Z. «Theor. chim. acta», 1987, 71, № 2—3, 237—245 (англ.)

Методом ССП в расширенных базисах ГФ оптимизированы структурные параметры молекул XeF₆, IF₆⁻ и TeF₆²⁻ в конфигурации симметрии O_h и в локальных минимумах потенциальной Пв, соотв. симметрии C_{3v} и C_{2v}. В O_h-конфигурации энергии связи TeF₆²⁻ и IF₆⁻ составили 172 и 104 ккал/моль, соотв. Полная энергия XeF₆ в той же конфигурации в заданном базисе превышает сумму полных энергий свободных атомов на 192 ккал/моль. При понижении симметрии системы до C_{3v} и C_{2v} полная энергия исследованных молекул увеличивается на ~20 ккал/моль. Для всех молекул в O_h-, C_{3v}- и C_{2v}-конфигурациях вычислены дипольные моменты, заряды на ядрах, атомные заряды, электр. поле и градиенты электр. поля на ядрах. И. А. Тополь

М.А.

⊠(42)

X. 1987, 19, N 19

XeF₆

1987

№ 10 Д46. Исследования неэмпирическим методом ССП молекулярной структуры XeF₆, JF₆⁻ и TeF₆²⁻ в неоктаэдрических геометриях. Ab initio SCF studies of the molecular structure of XeF₆, IF₆⁻, and TeF₆²⁻ in non-octahedral geometries. Klobukowski M., Huzinaga S., Seijo L., Barandiarán Z. «Theor. chim. acta», 1987, 71, № 2—3, 237—245 (англ.)

Для указанных в заглавии молекул проведены расчеты методом ССП для всех электронов в сжатом большом гауссовском базисном наборе. Начальная молекулярная геометрия для этих молекул принималась симметрией O_h. Затем применялась техника градиентной минимизации для определения молекулярной структуры исследуемых систем вблизи локальных минимумов, соответствующих C_{3v} и C_{2v} геометриям для внутреннего движения. В симметрии O_h энергии связей в TeF₆²⁻ и JF₆⁻ соответственно равны 172 и 104 ккал/моль. Понижение симметрии до C_{3v} и C_{2v} приводит к понижению энергии на ~20 ккал/моль для всех изученных систем. Г. К.

М.П.

Х (72)

ср. 1987, 18, N10

F_2Xe^+
(XeF_2^+)

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti; J. Phys. and Chem. Ref.

Di; Data, 1988, 17, N2, 347.

F_2Xe
(XeF_2)

[om. 30490]

1988

Jacob M. E.,

Ti, J. Phys. and Chem. Ref.
Di; Data, 1988, 17, N2, 348.

Xe₂F₃⁺

[Om. 40822]

2000

Giulia de Petris,
Andreina Ricci,

Chem. Phys. Lett., 2000,
332, 290-294.

Experimental ● evidence for

an asymmetric XeF_3^+ ion
in the gas-phase.

