

AS-Cl

$As_3F_2Cl_9$
WK-_n Раман-
спектр

Weidlein J., Dehmcke K.

1965

Z. anorg. u. allgem. Chem., 1965, 337, N 3-4, 113

Ковалентный спектр $As_3F_2Cl_9$

подтверждена структура $AsCl_4AsF_6^{+}$

валентная симметрия построена

террасп. картина 3,23 mdyn/ \AA^2

1
 $\frac{1}{3}$

M 2525

1967

VI. (PCl_5^- , PCl_6^- , AsCl_4^+ , AsCl_6^- , SbCl_5^- , SbCl_6^- ,
 GeCl_6^{2-} , GeCl_5^- , SnCl_5^- , SnCl_6^{2-})

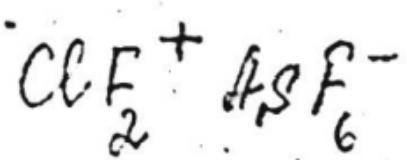
Beattie I.R., Gilson T., Livingston K., Fawcett V
Ozin G.A.

J. Chem., Soc., 1967, A, N 5, 712-18

The vibrational spectra of some chlorocomplexes of germanium, tin, phosphorus, arsenic and antimony.

PJF, 1968, 1D315

J.



V-5802

1967

11 Д488. Колебательные спектры и силовые постоянные катиона ClF_2^+ . Christe Karl O., Sawodny Wolfgang. The difluorochlorinium (III) cation, ClF_2^+ . Vibrational spectra and force constants. «Inorgan. Chem.», 1967, 6, № 2, 313—318 (англ.).

Исследованы ИК-спектры и спектры комб. рас. $\text{ClF}_2^+\text{AsF}_6^-$, а также ИК-спектры $\text{ClF}_2^+\text{BF}_4^-$. Наблюдались все фундаментальные частоты. Сделан вывод, что ранее сделанное отнесение ИК-спектра ошибочное. Подтвержден ионный характер комплексов и сделаны выводы о строении катиона ClF_2^+ (точечная группа C_{2v}). Сильное влияние кристаллич. поля наблюдалось в случае обоих комплексов. С учетом улучшенного отнесения колебаний дан расчет силовых постоянных с использо-

структурой;

сил. пост.

фундамент. частот

окт. 1967 · 119

ванием валентного силового поля. Найдено, что угол связи $F - Cl - F$ находится между $90 - 120^\circ$. Хотя валентная силовая постоянная ClF_2^+ , равная $4,77 \pm 0,07$ мдн/ \AA , несколько выше, чем вал. силовая постоянная ClF , их порядок связи тот же. Сравнение валентных силовых постоянных и порядков связей ClF_2^+ , ClF_2^- и ClF указывает на возможность их использования для определения полуионного характера в случае локализованных ковалентных связей. Для ClF_2^+ выбрана как наиболее вероятная модель локализованной ковалентной $p - \sigma$ -связи. Библ. 37.

Э. К.

15 Б205. Хлорильные соединения. Часть II. Хлорил-
гексафторарсенат и хлорилфторид. Carter H. A., John-
son W. M., Aubke F. Chloryl compounds. Part II.
Chloryl hexafluoroarsenate and chloryl fluoride. «Canad. J.
Chem.», 1969, 47, № 24, 4619—4625 (англ.)

1969

ClO₂AsF₆

спектр

Исследованы ИК- и КР-спектры хлорилгексафторарсена-
тата ClO_2AsF_6 . Спектры интерпретированы в рамках
представлений о ионном соединении $\text{ClO}_2^+\text{AsF}_6^-$, в к-ром
существует сильное катион-анионное взаимодействие,
приводящее к понижению симметрии аниона, что сопро-
вождается увеличением числа его колебаний, активных
в ИК-спектре. К колебаниям катиона хлорония (сим-
метрия C_{2v}) отнесены полосы 1045 см^{-1} (v_1), 515 см^{-1}
(v_2) и дублет $1293+1280 \text{ см}^{-1}$ (v_3 , расщепление за счет

X. 1970

15

кристаллич. эффектов). В среде HSO_3F по данным измерений электропроводности, электронных спектров и спектров ЯМР на ^{19}F , происходит диссоциация ClO_2AsF_6 и сольволиз FClO_2 с образованием сольватированного катиона ClO_2^+ . Обсужден характер хим. связей в соединениях хлорония. Часть I см. РЖХим, 1969, 16Б1052.

Ю. В. Киссин

$\text{ClF}_3\text{O}\cdot\text{AsF}_5$

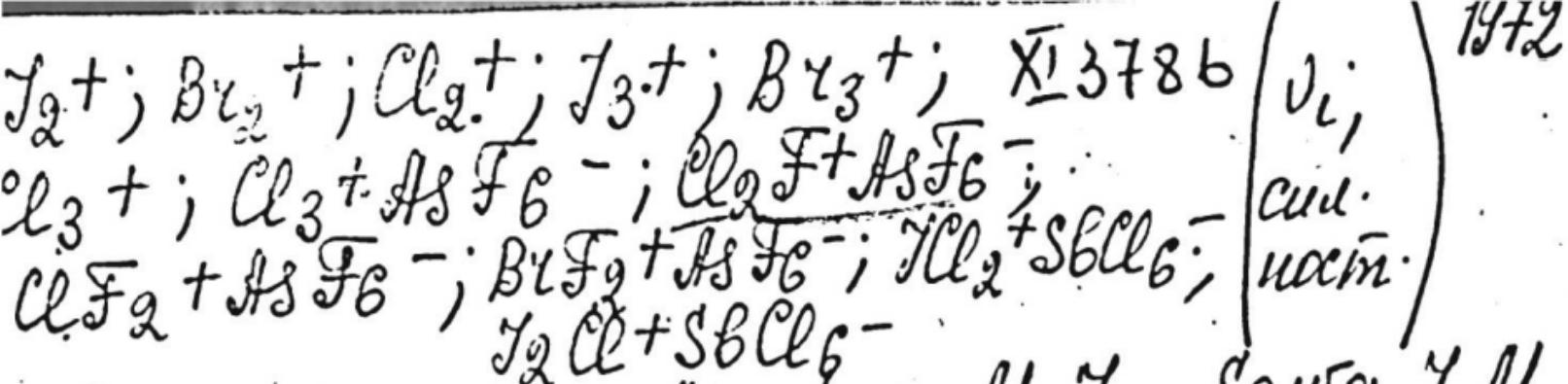
1972

Christe K. O.
et al.

Колл. рукоп.,
вид. носим.

Inorg. Chem., 1972,
11, №9, 2212 - 15-

● (см. $\text{ClF}\cdot\text{BF}_3$, III)



Gillespie R.J., Morton M.J., Sowa J.M.,

Advan. Raman Spectrosc., 1972,

1, 539-45 (and.)

Raman spectra of halogen and
interhalogen cations.

CA, 1973, 79, N26, 1511072

AsCl₂H

1972

Woods Clifton;

(vi)

From Diss. Abst. Int" B
1972, 32 (7), 3838.

• feu. As(CH₃)₃; III

GeH_x ; GeF_x ; GeCl_x ; $\text{Ge}(\text{CH}_3)_x$; $\text{Ge}(\text{CN})_x$; $\text{Ge}(\text{NO})_x$; AsH_x ; AsF_x ;
 AsCl_x ; $\text{As}(\text{CH}_3)_x$; $\text{As}(\text{CN})_x$; $\text{As}(\text{NO})_x$;
 SeH_x ; SeF_x ; SeCl_x ; $\text{Se}(\text{CH}_3)_x$; $\text{Se}(\text{CN})_x$;
 $\text{Se}(\text{NO})_x$; HBz ; BzF ; BzCl ; BzCN ; BCH_3 ; BrNO u. f. g. | XI. 37/1973
 re, L T pavüm

Hase H. Z., Schweig A.,
 Theor. Chim. Acta, 1973, 31, N3, 215-20
 CNDO/2 (complete neglect of lanu.)
 differential overlap method.
 for three - four molecules. | CA, 1974, 80, N10, 52568n
 TO 

CUR. NOONI, M.N. (PCl_6^- , AsCl_6^- , 1973
 SbCl_6^- ; GeCl_6^{2-} ; SnCl_6^{2-})
XIII & Y98

Singh B.F., Rema S.B., Pandey A.N.,
Sanyal N.K.

Indian J. Pure and Appl. Phys., 1973, 11,
N.9, 701-703 (austr.)

Force constants, Coriolis coupling con-
stants and mean amplitudes of vibra-
tions for some hexach-
lor anions of IVA and
PbVII. 1974, 12568 [10] for group elements.

OAsCl₃

1976

10 Б177. Матрично изолированная молекула окиси трихлорида мышьяка — OAsCl₃. Образование и описание его спектрами инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния. Benfield Frank W. S., Downs Anthony J., Gaskill Geoffrey P., Staniforth Sarah E. Matrix-isolated arsenic trichloride oxide molecule, OAsCl₃: formation and characterization by its infrared and Raman spectra. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1976, № 21, 856—858 (англ.)

Облучение низкот-рий ($T=8-30^\circ\text{K}$) матрицы благородного газа (напр., r), содержащей O_3 и AsCl_3 (соотношение компонент — 15 000 : 1 : 1) УФ-излучением $\lambda \sim 250$ нм приводит к появлению в спектрах ИК-поглощения и КР четырех новых полос с частотами 248, 373, 434 и 997 cm^{-1} при одновременном уменьшении интенсивности линий, относящихся к колебаниям O_3 и AsCl_3 . Аналогичные полосы появляются при облучении

Спектр
в матр.

Х. 1977 № 10

матрицы лазерным излучением $\lambda=514,5$ нм и при конденсации газовой смеси O_2+AsCl_3+Ar (1 : 1 : 70), прошедшей через зону МВ-разряда. Анализ спектров на основе поляризац. соотношений и изотопич. сдвигов частот позволяет отнести новые полосы к колебаниям соотв., $v_5(e)$, $v_2(a_1)$, $v_4(e)$ и $v_1(a_1)$ молекулы $OAsCl_3$, образующейся в этих условиях. Оценка силовых постоянных отдельных связей показывает, что молекула достаточно стабильна, а невозможность синтеза ее при коми. т-ре (обычно образуются AsO_4Cl и AsO_2Cl_2) обусловлена кинетич. причинами.

А. В. Бобров

оанъ
илокса

1876

OAsCl₃

6 Б184. Исследование некоторых фотолитических реакций в низкотемпературных матрицах методом спектроскопии комбинационного рассеяния: образование и свойства молекулы OAsCl₃. Downs A. J., Gaskell G. P. Some photolysis reactions in low-temperature matrices as studied by the Raman effect: the formation and characterization of the molecule OAsCl₃. «Proc. 5th Int. Conf. Raman Spectrosc., Freiburg, 1976». Freiburg—Breisgau, 1976, 130—131 (англ.)

Синтез

K.P.

Обсуждены особенности применения спектров КР для исследования фотолитич. р-ций в тв. матрицах инертных газов. На примерах переноса атома кислорода в р-циях с озоном и фоторазложения гексакарбонилов переходных металлов показана возможность исследования р-ций при одновременном использовании возбуждающего лазерного излучения 514,5 нм для фотолиза. В первом случае $O + MCl_3 \rightarrow OMCl_3$ ($M = P, As$) установлено в полном соответствии с данными ИК-спектров по УФ-фотолизу этих же матриц образование OAsCl₃.

X. 1977. 6 -

Отнесение частот нормальных колебаний проведено на основании поляризац. измерений, данных изотопозамещения по кислороду и хлору и сопоставления со спектрами ИК-поглощения. В случае гексакарбонилов Cr, Mo и W в матрицах метана с 0,5—15% содержанием N₂ установлено образование молекул M(CO)₅(N₂), имеющих точечную симметрию C_{4v}. Отмечено увеличение частоты вал. кол. N—N в ряду W<Cr<Mo, соотв-щее силовым постоянным вал. кол. C—O в исходных гексакарбонилах. Вал. кол. M—C возрастает в ряду Mo<
W<Cr.

О. Г. Гаркуша



AsCl₂

образов
анионов
As⁻

#3 - 148737

Pabst R. E.

"J. Chem. Phys." 1976,
65, N.4, 1550-60 (авар)

(ан AsF₂; III).

$AsOCl_3$

1976

Seppelt K.,

emphytyna

Angew Chem. 1976,
88(23), 806-7

Arsenic oxide trichloride.



C.A. 1978 86 N6.37118W

As_5OCl_3

ommeca 6192

1978

$(As_2O_3Cl_4)_n$

Seppelt K. von,
et al.

Pauwels, Z. anorg. und allgem.
u. k. anorg. Chem., 1978, 439, 5-12

Oxidchloride

des $AsOCl_3$...

OAsCl_3

1982

Dowrs A.J., Gaskill

G.P., et al.

Picav.

Inorg. Chem., 1982,
21, 3385-3393.

(cu. OPF_3 ; III)

AsCl₄F

Om. 17098

1983

23 Б125. Об изоляции AsCl₄F в матрице. Über die Matrixisolation von AsCl₄F. Claus F., Minkwitz R.

«Z. anorg. und allg. Chem.», 1983, 501, № 6, 19—26
(нем.; рез. англ.)

Методами масс-спектрометрии и ИК-спектроскопии изучено поведение матрицы AsCl₄+AsF₆⁻ при 90° С. В масс-спектре газ. продуктов присутствуют ионы, отвечающие наличию в смеси AsF₅ (ионы AsF_n⁺), AsCl₄F (I; ионы AsCl_n⁺ и AsCl_mF⁺), а также продуктов гидролиза I — OAsCl₃ (OAsCl₂⁺, AsO⁺) и HCl (HCl⁺). Новое соединение I зарегистрировано также методом ИК-спектроскопии. В ИК-спектре смеси присутствуют полосы, отвечающие поглощению AsF₅, а также линии 644, 452, 379, 334, 304, 232 и 208 см⁻¹, соотв-щие I. Проведен расчет силовых констант для I и его Р-аналога. Соединение I обладает низкой устойчивостью и при 90° разлагается до AsCl₃. Взаимодействие I с AsF₅ приводит к AsClF₄ и AsCl₂F₃.

Д. В. Загоревский

D_i, см. лист.

X. 1983, 19, 1/23

As Cl₂F₃

1983

100: 78917g Preparation of arsenic dichloride trifluoride,
AsCl₂F₃. Claus, F.; Glaser, M.; Minkwitz, R. (Abt. Chem. Anorg.
Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Fed. Rep. Ger.). Z. Anorg. Allg.
Chem. 1983, 506, 178-84 (Ger). Pyrolysis of [AsCl₄][AsF₆] in a
glass app. under vacuum at 100° gave AsCl₂F₃. AsCl₂F₃ was formed
through the intermediate formation of AsCl₄F and AsF₅ via ligand
redistribution. AsCl₂F₃ was characterized by low-temp. Raman and
Ar-matrix IR spectra. The valence force consts. were calcd.

CHEM&P.

b

WAMPUS

c. A. 1984, 100, N10

AsOCl

dm. 17 894 1983

6 Б1197. Матричная изоляция молекул AsOCl и SbOCl. Matrixisolation von AsOCl und SbOCl. Schno-
ckel H., Lakenbrink M., Zhengyan L. «J. Mol.
Struct.», 1983, 102, № 3—4, 243—249 (нем.; рез. англ.)

При взаимодействии серебра со смесью AsCl_3 и O_2 или SbCl_3 и O_2 при т-ре 1300 К образуются AsOCl (I) или SbOCl (II). Измерен ИК-спектр (1000 — 200 см^{-1}) I, изолированного в Ag-матрице при т-ре 15 К. В спектре обнаружены полосы при $984,4 \text{ см}^{-1}$ (νAsO) и при $378,7 \text{ см}^{-1}$ (νAsCl). Отнесение подтверждено рассмотрением изотопич. $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ и $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$ -сдвигов полос. Рассчитано силовое поле молекул I. Значение силовой постоянной связи AsO (7,5 мдин/Å) свидетельствует о двойном характере связи AsO. Попытка получения ИК-спектра II окончилась неудачей, т. к. молекулы II стабильны в этих условиях только в присутствии газ. Sb_4O_6 , поглощение к-рого перекрывает слабые полосы II.

И. А. Гарбузова

спектр, vi,
клн-ност-

(4) 18

X. 1984, 19, № 6

AsOCl

Om. 17894

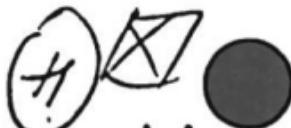
1983

| 100: 2762ly Matrix isolation of arsenenous chloride and chlo=rooxostibine. Schnoeckel, H.; Lakenbrink, M.; Zhengyan, Lin (Anorg. Chem. Inst., Univ. Muenster, D-4400 Muenster, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1983, 102(3-4), 243-9 (Ger). The mols. AsOCl and SbOCl were formed by reactions of Ag with mixts. of AsCl₃ and O₂ or SbCl₃ and O₂ resp. at ~1300 K. After condensation in an Ar matrix at 15 K the 2 stretching vibrations of AsOCl were obsd. in the IR spectrum: 984.4 cm⁻¹ [ν (AsO)] and 378.7 cm⁻¹ [ν (AsCl)]. This assignment was confirmed by the measured ¹⁶O/¹⁸O and ³⁵Cl/³⁷Cl isotopic shifts. The calcd. AsO force const. shows that there is a real AsO double bond in this mol. The characterization of SbOCl by the same method was not made because this mol. is only stable at 1350 K in the presence of gaseous Sb₄O₆ and therefore the absorptions of SbOCl are superimposed by the very strong bands of Sb₄O₆.

UK checkup
b

manuscript,

Pi, cul. room.



C.A. 1984, 100, NY

As ClF₄

1984

7 В11. Синтез тетрафторидохлорида мышьяка и анализ колебательных спектров соединений ряда $\text{AsCl}_n\text{F}_{5-n}$. Darstellung von arsenchloridtetrafluorid, AsClF_4 , und schwingungsspektroskopische betrachtungen innerhalb der reihe $\text{AsCl}_n\text{F}_{5-n}$. Claus F., Glaser M., Wölfel V., Minkwitz R. «Z. anorg. und allg. Chem.», 1984, 517, № 10, 207—214 (нем.; рез. англ.)

СЛЕКТУР

Описанным ранее методом синтезирован $[\text{AsCl}_4]^+$ $[\text{AsF}_6]^-$ (I); при фракционной конденсации продуктов пиролиза I выделен AsClF_4 (II). Измерены спектры КР II при -196°C и его ИК-спектр в аргоновой матрице. Сделано отнесение полос вал. кол. As—F: симм. кол. (A_1) при 745 и 628 см^{-1} (КР) и асимм. кол. (B_1 и B_2) при 791 и 722 см^{-1} (ИК), вал. кол. As—Cl отвечает интенсивная полоса при 463 см^{-1} в спектрах ИК и КР. Сделано также отнесение др. полос. Рассчитаны силовые постоянные связей в I и проведено сравнение

x. 1985, 19, № 7

экспериментально измеренных и рассчитанных положений основных полос. Проанализированы также колебательные спектры всех серий соед. типа $\text{AsCl}_n\text{F}_{5-n}$ (III) ($n=0-5$); обсуждена их стабильность. Установлено, что в серии соед. типа III существует линейное соотношение между усредненной частотами вал. кол. $1/5\Sigma\nu_{\text{вал}}$ и суммой электроотрицательностей лигандов.

В. В. Дунина



As Cl^+

On 22948

1985

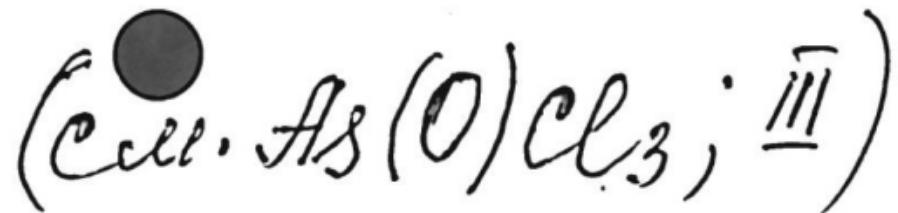
104: 98503e First observation of an electronic band system of the arsenic chloride (AsCl^+) cation: vibrational analysis of a visible ${}^2\Pi \rightarrow X{}^2\Pi$ system. Coxon, J. A.; Naxakis, S.; Yamashita, A; Brian (Dep. Chem., Dalhousie Univ., Halifax, NS Can. B3H 4J3). *Spectrochim. Acta, Part A* 1985, 41A(12), 1409-12 (Eng). A new band system was recorded photoelec. at low resoln. from the reaction of discharged He with AsCl_3 at total pressures near 3 torr. Fifty-nine head positions were assigned to a ${}^2\Pi \rightarrow X{}^2\Pi$ system of $\text{As}^{35}\text{Cl}^+$ and $\text{As}^{37}\text{Cl}^+$. Estd. vibrational consts. (cm^{-1}) for $\text{As}^{35}\text{Cl}^+$ from a least squares fit are as follows: $T'_e = 25,435$, $\Delta G(1/2) = 242.4$, $\omega''_e = 527.7$, $\omega''_e X''_e = 1.739$, $\Delta A = |A'_e - A''_e| = 1386.3$.

$(27 \rightarrow X27)$
M.N.

C.A. 1985, 104, N 12

AsCl₂ On 22/244 1985
Elbel S., Blanck A.,
et al.

Zeeckmann.
Empoemue $\text{J. Chem. Soc. Faraday Trans.}$, 1985, Pt 2,
81, n° 6, 869-880.



As(O)Cl_3

AsCl_2

Микрорентгеноструктурное исследование

(Он 22244)

1985

2 Б1156. Характер связывания в аналогичных и изоэлектронных соединениях элементов группы VB/VA As(O)Cl₃ и Nb(O)Cl₃. Исследование с помощью фотонной спектроскопии и метода ССЗ-Х α . Bonding modes in the analogous und isoelectronic group VB/VA compounds As(O)Cl₃ and Nb(O)Cl₃. An ultraviolet photoelectron-spectroscopic and SCC-X α study. Elbel S., Blanck A., Walther H., Grodzicki M. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1985, PT 2, 81, № 6, 869—880 (англ.)

С использованием источника возбуждающего излуче-

fig

X.1986, 19, N2



Nb(O)Cl_3 , PCl_3
 POCl_3 , AsCl_2
 VOCl_3

ния He-I измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) молекул $\text{As}(\text{O})\text{Cl}_3$ и $\text{Nb}(\text{O})\text{Cl}_3$ в газовой фазе. Методом самосогласования по заряду с использованием $X\alpha$ -приближения для описания потенциала взаимодействия электронов в системе (CC3- $X\alpha$) рассчитано электронное строение $\text{As}(\text{O})\text{Cl}_3$ и $\text{Nb}(\text{O})\text{Cl}_3$, а также родственных им соединений элементов группы V: VOCl_3 , AsCl_2 , PCl_3 , POCl_3 . На основании результатов расчетов интерпретированы эксперим. ФЭС. Изменения х-к хим. связи в ряду рассмотренных молекул исследованы в рамках анализа заселенностей МО по Малликену, расчетов контурных карт плотностей МО и сопоставления Пт ионизации валентных МО. Обсуждены особенности 2 различных типов связи в одной и той же молекуле: полярной ковалентной связи M—Cl и частично полярной, возможно даже ретродативной, связи M—O. Исследована роль d -электронов элементов M в хим. связи в рассмотренном ряду молекул.

И. А. Тополь

A8H3... HCl. OM-21588 | 1985

Hirschfleiss A.,
ab initio J. Mol. Struct.
pacrim (Theochem), 121, N.Y.,

201-205.

H₃As...HCl

[OM. 27942] 1987

Alabart J.R., Cobal-
ab initio lot R.,
paerim Chem. Phys. Lett.,
1987, 141, N 4, 334-
- 338.

As Cl_n F_{5-n}

(Om. 27473)

1987

$n = 1 \div 5$

2008.

Mekingoro

2007.)

Onyxypyr.

represente,
cell. no. 21.

107: 84224q The gas phase structure of arsenic dichloride trifluoride and a vibrational analysis of AsCl_nF_{5-n} (n = 1-5). Minkwitz, R.; Prenzel, H.; Schardey, A.; Oberhammer, H. (Fachbereich Chem., Anorg. Chem., Univ. Dortmund, D-4600 Dortmund, 50 Fed. Rep. Ger.). *Inorg. Chem.* 1987, 26(16), 2730-2 (Eng). A gas electron diffraction study of AsCl₂F₃ results in a trigonal bipyramidal structure with the 2 Cl atoms occupying equatorial positions (C_{2v} symmetry). The following geometric parameters (r_g values) were obtained: As-F_{ax} = 172.3(4), As-F_{eq} = 166.3(7), As-Cl_{eq} = 209.7(3) pm, Cl_{eq}AsCl_{eq} = 120.6(5) $^{\circ}$ and F_{ax}AsF_{eq} = 89.2(2) $^{\circ}$. Valence force fields were detd. for the entire series AsCl_nF_{5-n} (n = 0-5). The trends in the force consts. within this series are very similar to those in the homologous phosphoranes.

C.A. 1987, 107, n 10

As Cl₂F₃

(M. 27 473)

1987

№ 4 Б1150. Структура AsCl₂F₃ в газовой фазе и анализ колебательного спектра AsCl_nF_{5-n} ($n=1-5$). Gas-phase structure of AsCl₂F₃ and a vibrational analysis of AsCl_nF_{5-n} ($n=1-5$). Minkwitz R., Prezel H., Schardey A., Oberhammer H. «Inorg. Chem.», 1987, 26, № 16, 2730—2732 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы AsCl₂F₃. Для семейства хлорфторарсоранов AsCl_nF_{5-n} ($n=1-5$) по данным ИК- и КР-спектроскопии определены силовые константы валентных связей.

А. Б. Мазалецкий

м.п.

X. 1988, 19, NЧ

As Cl₃F₂(K) (Om. 27396)

1987

Minkwitz R., Prezel H.,

racnomer,

M.N.

Z. Anorg. und Allg.

Chem., 1987, 548, N 5,

103 - ● 107.

$\text{AsCl}_4^- \cdot \text{AsF}_6^-$ (OM. 30903, a") 1988

Klapötke T., Passmore J.
et al.,

(UK)
Di

J. Chem. Soc. Chem. Commun.
1988, N 21, 1426-1427.

Asocl

(30353)

1988

Краснов К. С.,
Русецкого Н. В.,

ОНИИТЭХИМ.

Ден. № 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

ст.н.

(обзор)

ClF₃·AsH₃

1988

Macharia N. P.
Ault B. S.

UK & Inorg. Chem., 1988, 27,
example (13), 2383-5.

Infrared spectroscopic
studies of the interaction
of chlorine fluoride and

Chlorine with hydrogen
selenide, dimethyl selenide
and arsine in argon
matrices.

Ch. Ash

1988

Machara N. P., Sult B.S.

UK 6 Inorg. Chem., 1988,
mannure 27(13), 2383-5.

Infrared spectroscopic
studies of the interaction
of chlorine fluoride and

AsF_2Cl_2 1989

Gel'mbol'dt V. O.,
D'yachkov P. N.

(Кузбасс) Zh. Neorg. Khim.
1989, 34 (4), 840-3.

(c.c.r. $PF_3(CF_3)_2$; \bar{I})

D=As-Cl [am. 33714] 1990

Binnewies M.,

Schnöckel M.,

γ, meadow.
garnure

Chem. Rev. 1990, 90,
N1, 321-330.

AsH₂ll
AsH₂ll

1991

Novak I.,

param
konemp.

ii
MURKINOV
CHYVCHYAN

Inorg. chim. acta 1991,
186, N 1, C. 131 - 134.

(au. AsH₂ (F; III)

AsCl₂

AsCl₂ +

May 20, 1997,

De, Meop.

Facem

④

□



38637)

1997

126: 282965n Geometries and energy separations of electronic states of AsCl₂, AsBr₂, AsCl₂⁺, and AsBr₂⁺. Latifzadeh-Masoudipour, Lida; Balasubramanian, K. (Dep. of Chemistry-Biochemistry, Arizona State Univ., Tempe, AZ 85281-1604 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(7), 2695-2701 (Eng), American Institute of Physics. Spectroscopic properties of the low-lying ²B₁, ²A₁, ²A₂, ⁴A₂, ²B₁(II), ⁴B₁, ²B₂(I), ²B₂(II) electronic states of AsCl₂ and AsBr₂ were studied with the complete active space SCF (CASSCF) followed by multireference singles and doubles CI (MRSDCI) methods. The 3 low-lying electronic states of AsCl₂⁺ and AsBr₂⁺, (¹A₁, ³B₁, ¹B₁) and the ground states of AsCl and AsBr were studied. The bond dissociation energies of AsCl₂, AsBr₂, AsCl, and AsBr were computed at the CASSCF/MRSDCI and CASSCF/s order CI (SOCl) levels as D_b(ClAs-Cl)=2.56 eV, D_b(BrAs-Br)=1.96 eV, D_b(As-Cl)=2.68 eV, and D_b(As-Br)=2.26 eV. The adiabatic ionization energies obtained in this work are 8.40 eV for AsCl₂ and 8.33 eV for AsBr₂. All these species possess bent geometries at their ground electronic states.

AsBr₂, AsBr₂⁺

C.A. 1997, 126, N21