

Al-C-hal

V 6244

1958

TiCl₄, Al₂(CH₃)₄Cl₂, Al₂(CH₃)₂Cl₄
TiCH₃Cl₃ (Vi)

Groenewege M.P.

Z. phys. Chem. (BRD), 1958, 18,
n 3-4, 147-162.

РЖХ, 1959, N 14, 48499. 6 см опр. 2.
Ю.

1960

V 4852

$$Al(CH_3)_3 \cdot \underline{Al(CH_3)_2Cl} \quad (V_1)$$

Hoffmann E.G.

Z. Elektrochem., 1950, 54, 1. 5, 616-631

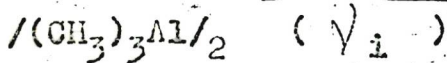
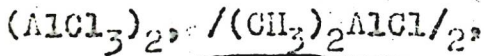
Спектроскопическое исследование алюминий органических соединений. IV. Спектроскопические характеристики ассоциации соединений типа AlR_3 и AlR_2Cl

РЖ., 1961, 36105

10

V 3882 ; BP-728-7

1962



Onishi T., Nakagawa T., Shimanouchi T.

O Internat. sympos. molec. struct. and
spectrosc. Tokyo, 1962, A310/1-A310/4

Normal vibrations of organo-aluminum
compounds

J

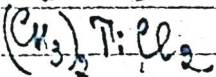
orig.

PX., 1963, 235106

Cocoonium AL

BQ-5808-V

1963



h sp.

Chenoph

The infrared spectra of trimethyl aluminum, dimethyl aluminum chloride, methyl aluminum dichloride, methyl titanium trichloride, dimethyl titanium dichloride, and some deuterium derivatives. A. P. Gray (Du Pont Ltd., Kingston). *Can. J. Chem.* 41, 1511-21(1963). The vapor-phase infrared spectra to 300 cm^{-1} are discussed and assignments made for Me_3Al_2 , $(\text{CD}_3)_3\text{Al}_2$, $\text{Me}_2\text{Al}_2\text{Cl}_2$, $(\text{CD}_3)_4\text{Al}_2\text{Cl}_2$, $\text{Me}_2\text{Al}_2\text{Cl}_4$, MeTiCl_3 , CD_3TiCl_3 , and Me_2TiCl_2 . The assignments differ significantly from those previously published, but are consistent throughout the series of Al compds. and with related spectra. The data are in agreement with a bridged structure for AlMe_3 of D_{2h} or C_{2h} symmetry and with a bridged structure of Me_2AlCl with Cl bridging. The dimer $\text{Me}_2\text{Al}_2\text{Cl}_4$ exists in the trans configuration. An impurity is commonly found in spectra of Me_2AlCl which is identified as the mixed dimer $\text{Me}_3\text{Al}_2\text{Cl}_3$. Anomalies observed in the spectra of the Me-Ti compds. are discussed. RCCM

C.A-1963-59-1

134f

7964
V 3883

Al_2Cl_6 , $\text{Al}_2(\text{CH}_3)_6$, $\text{Al}_2(\text{CH}_3)_4\text{Cl}_2$ (Vibrations)

Onishi T., Shimanouchi T.

Spectrochim. acta, 1964, 20, N 3, 325-
338

Normal vibrations of dimers of aluminium trichloride, trimethyl aluminum and dimethyl aluminum chloride

PT., 1966, 5D312

J

1964

$\text{CH}_3\text{Br} : \text{AlBr}_3$

3

$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br} : \text{AlBr}_3$

3

6 Д294. Спектры комбинационного рассеяния соединений бромид алюминия с бромформом и бромистым этилом. Rice, Bernard, Bald, Kenneth C. Raman spectra of the aluminum bromide addition compounds in methyl bromide and in ethyl bromide. «Spectrochim. acta», 1964, 20, № 4, 721—727 (англ.)

Получены спектры комб. рас. растворов бромид алюминия (I) в циклогексане и определены частоты колебаний димера Al_2Br_6 . В спектрах растворов I в CH_3Br (II) и $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$ (III) обнаружены новые частоты, которые приписаны соединением $\text{CH}_3\text{Br} : \text{AlBr}_3$ (IV) и $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br} : \text{AlBr}_3$ (V). Наблюдалось уменьшение частот в IV и V по сравнению с II и III, причем в случае IV это уменьшение составляет 6,9%, а в случае V — 9,5%, что следует отне-

ф. 1966. 6Д

Физ. 10

539.293

Наггор Р. J.

Intrinsic electrical conductivity in alumina.
Brit. J. Appl. Phys., 1965, 16, N 5, 729—730.

Собственная электропроводность окиси алюминия.

сти в основном за счет снижения силовых постоянных
связи C—Br. Это находится в согласии с выводом рабо-
ты (Jungk H., Smoot C., Brown H. «J. Amer. Chem. Soc.»,
1956, 78, 2185) об увеличении полярности этой связи.
В. Никитин

ВГБИЛ

1966
 $(CH_3)_2AlCl$ Gray sp

Can. J. Chem. 41, 1511-21 (1963)

$CH(CH_3)_3Al$

139-5459-V

1966

V_i, complex ($AlCl_3 \cdot (CH_3)_2O$,
 $AlCl_3 \cdot CH_3NO_2$)

5459

Jones D. E. H., Wood J. L.

J. Chem. Soc., 1966, A, no, 1448-1453/any
The spectra and structure of alu-
minium chloride complexes.

Bu gus, 1967, 42316 12

$Al_2 Cl_2 (CMe_3)_4$

Kato Hiroshi и др.

1966

Bull. Chem. Soc. Japan
39, N 7, 1377

Электронное строение
гидридов, галогенидов и
алкилов бора и Al_2

см. B_2H_6

$(\text{CH}_3)_2\text{AlF}$

1-6/34

15 В192. Колебательные спектры диметил- и диэтил-
алюминийфторида. Weidlein J., Krieg V. Die Schwin-
gungsspektren von Dimethyl- und Diäthylaluminiumfluorid.
«J. Organometallic Chem.», 1968, 11, № 1, 9—16 (нем.; рез.
англ.)

Исследованы ИК- и КР-спектры диметил- и диэтил-
алюминийфторида в диапазоне $3000-140\text{ см}^{-1}$. Табулиро-
ваны частоты полос в спектрах обоих соединений, их ин-
тенсивности, поляризация (для КР-спектров) и отнесение
к типам колебаний. Молекулы обоих исследованных в-в
тетрамерны. Анализ числа и интенсивности полос в об-
ласти вал. кол. группировки AlC_2 показывает, что обе мо-
лекулы имеют плоское восьмичленное кольцо (симметрия
 D_{4h}). Полосы колебаний скелета отнесены следующим об-
разом (последовательно для диметил- и диэтилалюминий-
фторида): асим. вал. кол. AlC_2 726,680 (ИК-) 717,668
(КР-), сим. вал. кол. AlC_2 560,552 (ИК-) 599,565 (КР-),
сим. и асим. вал. кол. AlF_2 638—614,872 (ИК-), пульсиру-
ющее кол. кольца Al_4F_4 —, 835 (ИК-), —, 822 (КР-).

Ю. В. Киссин

2.1968.15

$(\text{CH}_3)_2\text{AlF}$

1968

18

$[AlCH_3Cl_2]^-$

1970

8 Д491. ИК-спектры и спектры комбинационного рассеяния метилтрихлоралюминатного комплекса натрия. Kawai Kiyoyasu, Kanetaka Isao, Ichimura Fumio. Infrared and Raman spectra of sodium methyltrichloroaluminate complex. «Spectrochim. acta», 1970, A26, № 3, 593—597 (англ.)

Получены и расшифрованы ИК-спектры (4000—250 cm^{-1} ; твердая фаза) и спектры комб. рас. (расплав при 150° C) комплекса $Na[AlCH_3Cl_2]$. Для норм. колебаний комплексного аниона рассчитаны силовые постоянные. Показано, что при переходе от $AlCH_3Cl_2$ к рассматриваемому соединению полярность связи Al—Cl увеличивается. Библ. 13. Л. В. Коновалов

ИК-спектр,
спектр КР,
сил. пост.

ф. 1970.88

AP(IV)-C-H-O-Hal

1970

Hal = F

(AP)

(137670z) Mass spectral studies of metal chelates. V. Mass spectra and appearance potentials of some fluorine-substituted acetylacetonates. Reichert, C.; Bancroft, George M.; Westmore, John B. (Dep. Chem., Univ. Manitoba, Winnipeg, Manitoba). *Can. J. Chem.* 1970, 48(9), 1362-70 (Eng). The mass spectra of the hexafluoroacetylacetonates (hfacac) and trifluoroacetylacetonates (tfacac) of Al(III), Cr(III), Fe(III), Fe(II), Cu(II), and Zn(II) are reported. The main features of the spectra are discussed. Compared with the spectra of the acetylacetonates (acac), substitution of CF_3 for CH_3 in these complexes leads to more extensive fragmentation of the mol. ions. For example, ions corresponding to loss of $\cdot\text{CF}_3$ radicals are more abundant than those corresponding to loss of $\cdot\text{CH}_3$ radicals. The appearance potentials of the mol. ions and, where possible, of fragment ions formed from the mol. ion by loss of $\cdot\text{CF}_3$, $\cdot\text{CH}_3$, or ligand radicals are reported. The appearance potentials of the

C.A. 1970.72.26

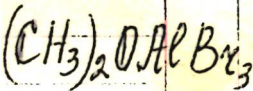
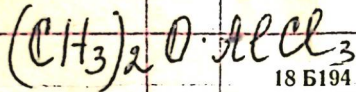
+4



mol. ions are more sensitive to the nature of the ligand than to the metal. Thus, for the metal chelates studied here the appearance potentials of the mol. ions from ML_2 and ML_3 (L stands for ligand) were 9.95 ± 0.25 V for $L = \text{hiacac}$, 9.05 ± 0.35 V for $L = \text{tfacac}$, and 8.3 ± 0.35 V for $L = \text{acac}$. The energy required to dissociate a $\cdot\text{CF}_3$ or $\cdot\text{CH}_3$ radical from the mol. ion is sensitive to the nature and valency of the metal M, being low (relatively) for Al(III) and Fe(III), and high (relatively) for Cr(III) (inferred) and Fe(II). This variation is discussed in terms of the effect of substituent, and of interaction of metal d orbitals with the ligands.

RCCM

7971



18 Б194 Д. Исследование колебательных спектров координационных соединений состава 1:1 диметилового эфира с хлористым и бромистым алюминием. De gou-ault Jean. Etude des spectres de vibration des composés de coordination de stoechiométrie 1—1 de l'éther diméthylque avec le chlorure et le bromure d'aluminium. Thèse doct. sci. phys. Univ. Bordeaux, 1971. 100 p., ill. (франц.)

ν_i ; сил. пост.

Изучены ИК-спектры и спектры КР комплексов $(\text{CH}_3)_2\text{O} \cdot \text{AlX}_3$ и $(\text{CD}_3)_2\text{O} \cdot \text{AlX}_3$, где $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$. Спектры сопоставлены с данными для свободных молекул донора и акцептора. Обсуждены изменения в спектре Me_2O при координации. Отмечено возрастание частот вал. кол. CH и снижение частот вал. кол. CO . Проведен расчет

X 1975 N 18

нормальных колебаний фрагмента OAlX_3 и молекулы Me_2O в комплексе. Найдено, что силовой коэф. связи CH растет на $\sim 5\%$, а связи CO — снижается на 20% . Для силового коэф. связи AlO получено значение $1,9$ млн/А, близкое к силовым коэф. связей AlCl и AlBr . Расчет частот при различных значениях углов в комплексе показал, что величина угла ClAlCl лежит в пределах $109^\circ 28' - 113^\circ$, угла BrAlBr $113 - 117^\circ$, COAl $109^\circ 28' - 113^\circ 30'$. Исследование спектров р-ров в CH_2Cl_2 при разных соотношениях компонент указывает на существование в р-ре, по крайней мере, 3 компонентов разного состава.

Б. В. Локшин

$(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{AlBr}_3$ (коорг. соед).

1972

Derouault J., и др.

(с. н.) "J. Mol. Struct." 1972, 11,
N 3, 423-38.

(с. н. AlCl_4^- , III)

1972

$(\text{CH}_3)_2\text{O} - \text{AlCl}_3$ (коорг. соед).

пероцикл J., и др.

(с.н.)

"J. Mol. Struct.", 1972, 11,
N 3, 423-38.

(соед. AlCl_4^- , III)

$[(\text{CH}_3)_2\text{AlF}]_4$

1972

Электро-
нограф.

23 Б98. Молекулярная структура тетраметра фторид-
да диметилалюминия, изученная методом электроногра-
фин. Gundersen Grete, Haugen Torbjørn,
Haaland Arne. Molecular structure of dimethylalumi-
nium fluoride tetramer by electron diffraction. «J. Chem.
Soc. Chem. Commun», 1972, № 12, 708 (англ.)

Методом газовой электронографии при $T = 65^\circ$
изучена структура молекулы $(\text{Me}_2\text{AlF})_4$ (I). Установле-
но, что в условиях опыта концы I в парах не меньше
95%. Найдено, что молекула обладает неплоской циклич.
восьмичленной структурой типа «кресло—ванна» сим-
метрии C_2 с двумя атомами Al в плоскости зеркального
отражения. Получены след. значения межъядерных рас-
стояний (А) и углов: C—H 1,116 (13), Al—C 1,942 (6),
Al—F 1,808 (4), $\angle \text{CAlC}$ 127 (3)°, $\angle \text{FAlF}$ 94 (2)°,
 $\angle \text{AlFAI}$ 148 (2)°.

В. Спиридонов

X-1972-23

$(\text{CH}_3)_2\text{AlF}$

1973

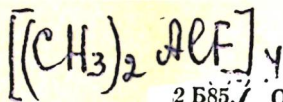
computer.
reference.

D 71150r Molecular structure of dimethylaluminum fluoride tetramer, $[(\text{CH}_3)_2\text{AlF}]_4$. Gundersen, G.; Haugen, T.; Haaland, Arne (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *J. Organometal. Chem.* 1973, 54, 77-86 (Eng). $(\text{CH}_3)_2\text{AlF}$ was studied by gas phase electron diffraction. The compd. is tetrameric under the exptl. conditions. The main mol. parameters are $R(\text{Al}-\text{C})$ 1.947 (4), $R(\text{Al}-\text{F})$ 1.810 (3) Å, $\angle\text{C}-\text{Al}-\text{C}$ 131.2 (1.9)°, $\angle\text{F}-\text{Al}-\text{F}$ 92.3 (1.2)° and $\angle\text{Al}-\text{F}-\text{Al}$ 146.1 (2.6)° the Al_4F_4 ring being puckered. The factors detg. the degree of assocn. of compds. of the type R_2AlX ($\text{X} = \text{F}, \text{OR}', \text{NR}_2', \text{Cl}, \text{SR}'$ and PR_2') are discussed, and it is suggested that Pitzer strain may be a significant factor in some cases.

C. A.

1973

79 N12



1973

2 Б85. О молекулярной структуре тетрамера диметилалюминийфторида, $[(CH_3)_2AlF]_4$. Gundersen G., Haugen T., Haaland Agne. On the molecular structure of dimethylaluminium fluoride tetramer, $[(CH_3)_2AlF]_4$. «J. Organometal. Chem.», 1973, 54, 77—86 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы $[(CH_3)_2AlF]_4$. Установлено, что атомы Al и F образуют неплоское восьмичленное кольцо. Найдены след. значения основных молек. параметров: $r(Al-C) = 1,947$ (4) Å, $r(Al-F) = 1,810$ (3) Å, $\angle CAlC$ 131,2 (1,9)°, $\angle FAlF$ 92,3 (1,2)°, $\angle FAlAl$ 146,1 (2,6)°. С привлечением литературных данных обсуждены проблемы полимеризации соединений типа R_2AlX ($X=F$, OR' , NR'_2 , Cl , SR' и PR'_2).
В. Спиридонов

структ

x. 1974

N2

☒ ④ Есенов



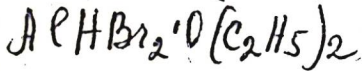
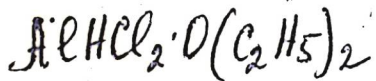
* 4-4699

1974

21 Б70. Молекулярная структура димера хлорида диметилалюминия $[(CH_3)_2AlCl]_2$, повторно определенная методом газовой электронографии. Brendhaugen Kristen, Haaland Arne, Novak David P. The molecular structure of dimethylaluminium chloride dimer, $[(CH_3)_2AlCl]_2$, redetermined by gas phase electron diffraction. «Acta chem. scand.», 1974, A 28, № 1, 45—47 (англ.)

Методом газовой электронографии повторно изучена молекула $[(CH_3)_2AlCl]_2$ (I). Полученные данные согласуются со структурой C_{2h} симметрии типа димера хлорида алюминия с мостиковыми атомами Cl. Найдены след. значения межъядерных расстояний (А) и углов: C—H 1,104(8), Al—C 1,935(4), Al—Cl 2,803(3), AlCH 109,5(1,1)°, CAIC 126,9 (0,8)°, ClAlCl 89,4(0,5)°, AlClAl 90,6(0,5)°. В. Спиридонов

x. 1974. N 21



Толлякова

1974.

Василка Болковича

Колебел.
спектр

Автоматизация
спискивание упроченной стержни
кадидата хим. наук
" Спектрохим. исследов.
химии производных
и боргидрида
алюминия

60504.7263
Ch, TC

ГОМУСОВ, СЕРГЕЙ
29864
(CH₃)₂AlX₂

1976

4-12811

X = Cl, Br, I

Lappert Michael F., Pedley J.
Brian, Sharp Graham J., Guest Martyn F.
Bonding studies of compounds of boron
and elements of groups 3-5. Part 16.
Ab initio SCFMO calculations and He(I)
photoelectron spectra of halogen-bridged
dimeric group 3 metal halides and
methylmetal halides. "J. Chem. Soc. Faraday
Trans.", 1976, Part 2, 72, N 3, 539-551

(АНХЛ.)

586 591

605

0613 ГРН

ВИНИТИ

Суд. № 2 Вр 61111

Cr^{2+} ; Al_2O_3

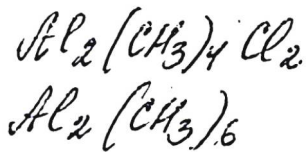
Эффект
Яна-Теллера

Ф. 1970/13

(3 Д643.) Изучение эффекта Яна — Теллера в Cr^{2+} : Al_2O_3 . Bates C. A. Jahn-Teller study of Cr^{2+} : Al_2O_3 . «J. Phys.», 1978, C11, № 16, 3447—3460 (англ.) 1978

Проведен анализ результатов измерений термически детектируемого индуцированного электрическим полем ЭПР ионов Cr^{2+} в диамагн. матрице Al_2O_3 . Наблюдаемые спектры при направлении поля H вдоль оси с обусловлены переходами в возбужденном триплетном состоянии $S'=1$. Эти результаты сопоставлены также с ранее доложенными данными измерений акустического парамагн. резонанса. Анализ эксперим. данных проводился с помощью ЭВМ. Показано, что изученная система хорошо описывается в рамках многомодовой модели эффекта Яна—Теллера, а не в кластерной модели. Определены коэф. преобразования Яна—Теллера, q и p , связанные с операторами симметрии A_2 и E соответственно в кубич. поле: $q=0,306$ и $p \approx (0,2-0,3)$. Коэф. $r=0,70$. Предложенная модель правильно предсказывает наличие линии ЭПР, не использованной при анализе эксперим. данных, и хорошо согласуется с результатами ранее проведенных измерений теплопроводности и кросс-спин-решеточной релаксации. Библ. 35.

Т. К. П.



Venkateswarlu K.
et al.

конечн.
исчерп.
патент

Bull. cl. sci. Acad.
Roy. Belg., 1978, 69
(3), 562-564.

1978

1979

Al-C-F
(coequal)

empirical
2 eq. 2 eq.

91: 9745h The structure of tris(1,1,1,3,5,5-hexafluoro-2,4-pentanedionato)aluminum(III) determined by gas-phase electron diffraction. Morris, M. L.; Hilderbrandt, R. L. (Dep. Chem., North Dakota State Univ., Fargo, ND 58102 USA). *J. Mol. Struct.* 1979, 53(1), 69-80 (Eng). The r_g structure of tris(1,1,1,3,5,5-hexafluoroacetylacetonato)aluminum(III) was detd. by gas phase electron diffraction. The exptl. data are consistent with a D_3 model in which the O atoms of the three ligands are arranged in a slightly distorted octahedron about the Al atom [$\angle OAlO$ for the ligand is 87.2° (1.4)]. The Al-O bond length [Al-O = 1.893(14) Å] is in excellent agreement with the value previously obtained by x-ray diffraction for the related acetylacetonato complex of Al [Al-O = 1.893(14) Å]. Structural parameters for the ligand [C-O = 1.277(11) Å, C-C_{ring} = 1.412(14) Å, C-CF₃ = 1.561(11) Å, and C-F = 1.338(3) Å] are in

excellent agreement with the values obtained in an earlier electron diffraction study of the Cr(III) complex with hexafluoroacetylacetonate. The resulting structure agrees quite well with the predictions based on a force law model for tris bidentate complexes developed by Kepert.

C.A. 1979, 91, 92

$\text{C}_2\text{H}_5\text{AlCl}_3$

1980

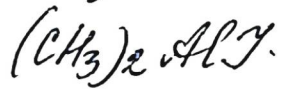
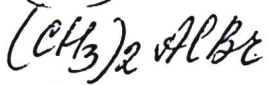
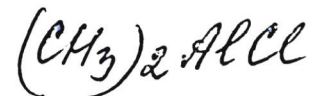
Тюркарев В.Н. и др.

масс-
спектрометр.

Ж. общ. химии,
1980, 50, №3, 586-91



$\text{C}_2\text{H}_5\text{AlCl}_3$ III



monomers,
compounds,
chain FOP

[Osmun 11087] 1981.

Hasegawa et al.

Chem. Phys. Lett.,
1981, 77 (3), 618-22

ESR spectra and
● structure of...

$(\text{ClAl}(\text{CH}_3)_2)_2$

1981

характер
связи

IX

(41)

95: 121436s Electrostatic molecular potential analysis of electron density distribution in dimers of chlorodimethylaluminum and aluminum chloride. Okninski, A.; Pasynkiewicz, S. (Inst. Org. Chem. Technol., Tech. Univ., 00-662 Warsaw, Pol.). *Adv. Mol. Relaxation Interact. Processes* 1981, 20(3), 121-30 (Eng). Electrostatic mol. potential approach (E. Scrocco and J. Tomasi, 1973) was used to det. reaction channels for $(\text{ClAlMe}_2)_2$ and $(\text{AlCl}_3)_2$. The character of bonding and electron deficiency are also analyzed and discussed in terms of the frontier orbitals.

C. A. 1981, 95, N 14.

$[\text{ClAl}(\text{CH}_3)_2]_2$

1981

24 Б43. Анализ распределения электронной плотности в $[\text{ClAl}(\text{CH}_3)_2]_2$ и $(\text{AlCl}_3)_2$ методом электростатического молекулярного потенциала. Okniński A., Pasynkiewicz S. Electrostatic molecular potential analysis of electron density distribution in $(\text{ClAlMe}_2)_2$ and $(\text{AlCl}_3)_2$. «Adv. Mol. Relax. and Interact. Process.», 1981, 20, № 3, 121—130 (англ.)

геометр.;

Методом электростатич. молек. потенциала (ЭМП) рассчитаны реакц. каналы молекул $[\text{ClAl}(\text{CH}_3)_2]_2$ и $(\text{AlCl}_3)_2$. Расчеты выполнены методом ППДП/2 в базе одночленных ОСТ с учетом 3d-АО у атомов Al и Cl. Геометрич. параметры не варьировались, а были взяты из электронографич. эксперимента. Показано, что молекула $[\text{ClAl}(\text{CH}_3)_2]_2$ обладает каналами для нуклеофильной атаки, расположенными в плоскости мостиковых атомов в направлении мостиковых атомов Cl, и каналами электрофильной атаки в терминальной

⚡
(+1)

X. 1981, 19, N 24.

плоскости в направлении метильных групп. В молекуле $(AlCl_3)_2$ найдено два типа каналов нуклеофильной атаки (в направлении различных атомов Cl) и два типа каналов электрофильной атаки в направлении мостиковых атомов Cl перпендикулярно мостиковым связям и вдоль молек. оси Cl_2 . Благодаря наличию указанных электро- и нуклеофильных каналов во всех плоскостях симметрии молекула $(AlCl_3)_2$ может быть легко поляризована. Отмечено, что метод ЭМП позволяет проводить обсуждение характера связей и распределения плотности в молекулах в терминах граничных орбиталей системы.

С. Долин



$(CH_3)_{6-n}Al_2Cl_n$ Om. 25147]

1986

($n=2-6$)
и гр.

Rytter E., Kvistle S.,

вк энергии
в матрице
COX,
анал. пост.

Inorg. Chem., 1986, 25,
N21, 3796-3804.

$CF_4 \cdot n AlF_3$

$n = 1, 2$

1996

77. $CF_4 \cdot n AlF_3$
 $CF_4 \cdot n AlF_3$

⑦ Δ

125: 205018h Electronic structure, geometry, and stability of organic cations, dications, and donor-acceptor complexes. Part 2. Polyhalomethane complexes with aluminum halides. Chistyakov, A. L.; Stankevich, I. V.; Akhrem, I. S.; Gambaryan, N. P.; Vol'pin, M. E. (Nesmeyanov, A. N., Institut Elementoorganicheskikh Soedinenii, Moscow, Russia 117813). *Izv. Akad. Nauk, Ser. Khim.* 1996, (3), 554-560 (Russ). The search of a local min. on the potential energy surface of the systems $CF_4 \cdot n AlF_3$ ($n = 1, 2$) and $CBr_4 \cdot n AlBr_3$ ($n = 1, 2, 4$) was carried out by AM1. The geometrical, electronic, and energetic characteristics of the complexes formed in these systems were detd. The ionic complexes $CBr_3^+ \dots AlBr_4^-$, $CBr_3^+ \dots Al_2Br_7^-$, $CBr_2^{2+} \dots (AlBr_4^-)_2$, and $CBr_2^{2+} \dots (Al_2Br_7^-)_2$ can be formed in the $CBr_4 \cdot n AlBr_3$ systems beside the donor-acceptor ones. In the cations and dications of the polyhalomethanes (Hal = Cl, Br, I), both free and bound in ionic complexes, the C atoms carry a neg. charge, the bonds C-Hal are considerably shortened, and the pos. charges are carried by 1-coordinated halo atoms, which differ considerably from the 2-coordinated halo atoms of the halonium salts. The max. pos. charge on the Br atoms amts. to 0.39 in the cationic and 0.66 and 0.94 in the dicationic complexes of the $CBr_4 \cdot n AlBr_3$ systems. In the $CF_4 \cdot n AlF_3$ systems there are donor-acceptor complexes only.

C.A. 1996, 125, N 16

$CBr_4 \cdot n AlBr_3$

CB_2 и AlB_3
 $n = 1, 2$

1996

Chistyakov, A. L.;
Stankovich, I. V. et al.

некомпл.
структура,
состав и свойства.
Изв. Акад. Наук,
Сер. Хим. 1996, (3), 554-
560

(См. CB_2 и AlF_3 ; III)