

dl-Bv



$$0 \leq n \leq 4$$

ν_i

(27642w) Vibrational spectra and force constants of the tetrachloroaluminate, tetrabromoaluminate, and mixed bromochloroaluminate ions. Jones, D. E. H.; Bradley, R. H.; Brier, P. N. (Petrochem. Polym. Lab., Imp. Chem. Ind., Heath/Runcorn/Cheshire, Engl.). *J. Chem. Soc. A* 1971, (10), 1397-400 (Eng). The ir and Raman spectra of the 5 ions $[AlCl_nBr_{4-n}]^-$ ($0 \leq n \leq 4$), which form an equilibrated mixt. in soln. have been detd. and fitted to a unified Urey-Bradley force field.

C. A. 1971. 454

194

AlCl_nBr_{4-n}⁻

4-н

расчет

Ф. 1973. № 3

1972

3 Д164. Расчеты методом молекулярных орбиталей ионов тетрагалогенидов алюминия. Canadine R. M., Jones D. E. H. Simple molecular orbital calculations on tetrahalogenoaluminate ions. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1972, Part II, 68, № 10, 1665—1671 (англ.)

Методом, близким к итеративному расширенному методу Хюккеля, исследовано электронное строение ионов $AlCl_nBr_{4-n}^-$, $n=0-4$. Учитывались $3s$ - и $3p$ -АО атомов Al и Cl и $4s$ - и $4p$ -АО атомов Br. Для атома Al принята тетраэдрич. координация. Рассчитаны заряды на атомах, полные энергии, принятые равными суммам орбитальных энергий (E') и E' с учетом маделунговской поправки (E''). Для $n=0$ и 4 рассчитаны потенц. кривые для E' и E'' как ф-ции длин связей (оказавшиеся неудовлетворительными) и валентных углов (вариации углов отвечали модам нормальных деформаций колебаний). Последние с точностью $\sim 5^\circ$ воспроизводят опытные значения углов, причем учет маделунговской поправки ввиду ее малой вариации оказывается излишним. Рассчитанные силовые постоянные деформаций колебаний завышены в 5—7 раз. В. Л. Лебедев

АЛФ₃-Вч

1984

Лукитим М. И., Тавриш
Е. Н., Уголкина Н. А.

До;
7 Всес. симп. по химии
неорг. гетероидов, Душан-
бе, 9-11 окт., 1984. М., 1984,
240.

(см. АЛФ₃-Сл; III)

$Al_2Cl_2Br_3$

1995

Isteres M., Westberg N.,
et al.

Vi, paerem

Spectrochim. Acta,
Part A 1995, 51A(6),
1017-29.

(see Al_2Cl_6 ; III.)

$AlBr_n$

$n = 1-3$

1996
Hassanzadeh P.,

ИК в малых-

размерных молеку-

лярных соеди-

тельных

AX_2 молекул

Citra A. et al.

J. Phys. Chem. 1996,

100 (18), 7317-25.

(соед. AlF_n ; III)

FALBr⁺

1999

Petrie, Simon;

meopen.
panel
CTP-MK

Int. y. Mass spectrum.
1999, 184 (2-3), 191-199

Δ_{FH}

Call. F  Br⁺; III