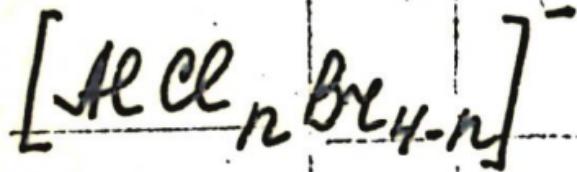


SL-BE



1941

$0 \leq n \leq 4$

(27642w) Vibrational spectra and force constants of the tetra-chloroaluminate, tetrabromoaluminate, and mixed bromochloro-aluminate 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 $[\text{AlCl}_n\text{Br}_{4-n}]^-$ ($0 \leq n \leq 4$), which form an equilibrated mixt. in soln. have been detd. and fitted to a unified Urey-Bradley force field.

Di

C. d. 0941

VS 4

AlCl_nBr^-

4-n

ЗД164. 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.)

1972

paeret

Методом, близким к итеративному расширенному методу Хюкеля, исследовано электронное строение ионов $\text{AlCl}_n\text{Br}_{4-n}^-$, $n=0—4$. 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 деформац. колебаний). Последние с точностью $\sim 5^\circ$ воспроизводят опытные значения углов, причем учет маделунговской поправки ввиду ее малой вариации оказывается излишним. Рассчитанные силовые постоянные деформац. колебаний завышены в 5—7 раз.

В. Л. Лебедев

ф. 1973. № 3.

AlF_3 -Br

1984

Нукусский др. л., Гаврилов
Е. Н., Чоджиков М. А.

No;

7 Всеэ. сен. по земле
Иногран. фоториоф, Душан-
бе, 9-11 окт., 1984. лл., 1984,
240.

(см. AlF_3 -Cl; III)

$\text{Al}_2\text{Cl}_9\text{Br}_3$ 1995
Ysteres M., Westberg N.,
et al.

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

(cfr. Al_2Cl_6 ; III.)

AlBr_n

$n = 1-3$

UR Brno -

ručné práce -

me Citra -

elektron

AX_2 monely

1996

Hassanzadeh P.,
Citra A. et al.

J. Phys. Chem. 1996,
100 (18), 7317 - 25.

(ccq. AlF_n ; III)

FAlBr⁺

1999

Petrie, Simon;

meopren.

panel

CTP-MC

ΔfH

Int. J. Mass Spectrom.
1999, 184 (2-3), 191-199

(all. F  BCl⁺; III)