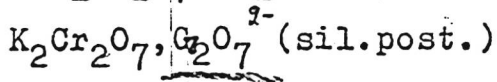
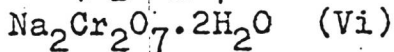
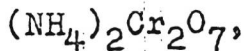


Craig

VII 846 1958



Stammreich H., Bassi D.,
Sala O., Siebert H.,

Spectrochim. acta, 1958, 13, N3, 192-96.

Колебательный спектр бихромат-иона

RX., 1959, N19, 67049

Ж

Есть ф. к.

Cr₂O₇⁻²

8 Б218. Спектры комбинационного рассеяния окрашенных веществ: растворы бихроматов калия, натрия и аммония. Применение газового He-Ne-лазера (6328А). Dang Vinh Luu, Clément Christine, Lafont Robert. Effet Raman des substances colorées: solutions des bichromates de potassium, sodium, ammonium. Utilisation d'un laser à gaz He—Ne (6328 А). «С. г. Acad. sci.», 1967, 264, № 26, В1822—В1825 (франц.)

Для уточнения структуры иона Cr₂O₇⁻² (I) получены спектры КР р-ров Cr₂O₇K₂ (II), Cr₂O₇Na₂, Cr₂O₇(NH₄)₂ и монокристалла Cr₂O₇K₂. Спектры возбуждались линией 6328А He—Ne-лазера. Проведен теоретико-групповой анализ спектра и сделано отнесение наблюдаемых частот к различным типам колебаний. Иону I приписана симметрия C_{2v}. В случае монокристалла II наблюдались также и частоты колебаний кристаллич. решетки (≤ 100 см⁻¹). Вал. кол. Cr—O лежат в области ~904—960 см⁻¹, а деформ. кол. CrO₃ ~362 см⁻¹; частота ~160 см⁻¹ приписана деф. кол. мостика Cr—O—Cr. Бобров

1967

ж. 1968. 8



1967

$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$

5 Д299. Комбинационное рассеяние в окрашенных веществах. Растворы двуххромовокислого калия, натрия, аммиака. Применение лазера на He—Ne (6328 Å). Dang Vinh Luu, Clément Christine, Lafont Robert. Effet Raman des substances colorées: solutions des bichromates de potassium, sodium, ammonium. Utilisation d'un laser à gaz He—Ne (6328 Å). «C. r. Acad. sci.», 1967, 264, № 26, B1822—B1825 (франц.)

структур

Исследован спектр комб. рас. иона $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ (I) с использованием лазера на He—Ne (6328 Å). Отнесение колебаний I проведено на основании анализа спектров комб. рас. растворов $\text{Cr}_2\text{O}_7\text{K}_2$, $\text{Cr}_2\text{O}_7\text{N}_2$, $\text{Cr}_2\text{O}_7(\text{NH}_4)_2$ и монокристалла $\text{Cr}_2\text{O}_7\text{K}_2$. Предположено, что пространственная структура иона I представляет собой два тетраэдра C_2O_4 с одним общим атомом кислорода $\text{O}_3\text{Cr}—\text{O}—\text{C}_2\text{O}_3$. Исходя из этой гипотезы, авторы приписали иону I тип симметрии C_{2v} как наиболее вероятный.

А. М. М.

ф. 1968. 52

$(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$

16 Б211. Исследование ИК-спектров при низких температурах. I. Предварительное сообщение об ИК-спектре бихромата аммония $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$. Schutte C. J. H., Heyns A. M. Low-temperature infrared studies. I. Preliminary communication on the infrared spectrum of ammonium dichromate $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ «Chem. Phys. Letters», 1967, 1, № 10, 487—489 (англ.)

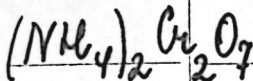
Исследованы ИК-спектры $(2000—500 \text{ см}^{-1})$ $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ при разных т-рах $(298—17^\circ \text{ K})$ обнаружено, что в исследованном температурном интервале $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ может существовать в четырех кристаллич. фазах. Отмечены изменения в спектрах, сопровождающие фазовые переходы. Отсутствие в спектре соли при комнатной т-ре полосы поглощения $\nu_4 + \nu_6$ свидетельствует о свободном вращении иона аммония. При более низких т-рах происходит, по-видимому, заторможенное вращение иона.

А. Белозеров

Ж. 1968. 16

Исправление

1968



1 Б223. Исправление авторов к статье: «Исследования методом ИК-спектроскопии при низкой температуре»

I. Предварительное сообщение об ИК-спектре $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$. Schutte C. J. H., Heyns A. M. Low-temperature infrared studies. I. Preliminary communication on the infrared spectrum of ammonium dichromate $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$. (Erratum). «Chem. Phys. Letters», 1968, 1, № 11, 560 (англ.)

К РЖХим, 1968, 16Б211

х. 1969. 1

1968

 $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$

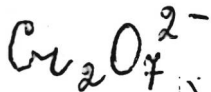
(Kongere)

(Culep)

14239w Low-temperature infrared studies. III. Phase transitions in ammonium-d₄ dichromate. Schutte, C. J. H.; Heyns, A. M. (Univ. South Africa, Pretoria, S. Africa). *Chem. Phys. Lett.* 1968, 1(11), 515-6 (Eng). The temp.-dependence (17-180°K.) of the ir spectra of thin, polycryst. films of $(\text{ND}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ and $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ on KBr, NaCl, and CsI windows was investigated. The temp. dependence of the ν_4 -bending band of the ND_4^+ ion showed changes at $\sim 170, 140, 120$, and 80°K . $(\text{ND}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ has 1 more phase than $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$. The new phase occurs below 80°K . Two possible phase-change sequences are discussed for $(\text{NH}_4)_2\text{Cr}_2\text{O}_7$. FBJN

C.A. 1968. 69.4

1973



(vi)

120141z Vibrational spectra of crystalline, molten, and aqueous potassium dichromate. Bates, J. B.; Toth, L. M.; Quist, A. S.; Boyd, G. E. (Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1973, 29A(8), 1585-600 (Eng). Raman and ir spectra of cryst. $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ were detd. at -196° and Raman spectra were recorded from 25° to the solid-solid phase transition at 269° . Raman spectra of $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ at 435° and of a satd. aq. soln. at 25° were also recorded. Two-site and correlation field splitting of the internal modes of $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ in the low-temp. solid phases were discussed, and assignment of the Raman active external modes in the crystal were made by using a cell model. Calcs. of the 21 normal modes of $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ supported the proposed frequency assignments.

C.A. 1973, 79 N20

$\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$

1976

Li ;
Complex.

85:38853y Infrared absorption of chromate(2-) ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$) impurity ion in potassium chloride and potassium bromide lattices. Grigoruk, V. I.; Kondilenko, I. I.; Tsyashchenko, Yu. P. (Kiev. Gos. Univ. im. Shevchenko, Kiev, USSR). *Ukr. Fiz. Zh. (Russ. Ed.)* 1976, 21(4), 684-5 (Russ). The ir absorption spectra of single crystals $\text{KCl} + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ and $\text{KBr} + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ were obtained at 100°K. The sharp bands are attributed, for example $\nu_{\text{max}} = 802 \text{ cm}^{-1}$ to the antisymmetrical vibration of Cr-O-Cr, the band at 890 cm^{-1} to the valence vibration of the B_2 type of the pyramid CrO_3 , the band at 912 cm^{-1} to the valence vibration of the A_1 type of the pyramid CrO_3 . The formation of the complex $\text{CrO}_4^{2-}\text{M}^{2+}$ seems to be energetically very favorable.

M. Wiedemann

C.A. 1976 85 N6

CrO_7^{2-}

1987

№ 21 Б1310. Приложение идей Яблонского в неорганической химии. Поиск метастабильных триплетных состояний тетраоксианионов переходных металлов с конфигурацией d^0 . Jabłoński's ideas applied to inorganic chemistry: a search for metastable triplet states of the d^0 transition metal tetraoxo anions. Van der Waals J. H. «Acta phys. pol.», 1987, A71, № 5, 809—821 (англ.)

Рассмотрено применение диаграммы Яблонского для исследования методом ЭПР фотовозбужденных триплетных состояний оксианионов переходных металлов с конфигурацией d^0 ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$, VO_4^{3-} , MoO_4^{2-}). Отмечено, что из данных по расщеплению фотовозбужденного триплета в нулевом поле можно получить информацию о симметрии оксианиона: показано, что VO_4^{3-} и MoO_4^{2-} в фотовозбужденном триплетном состоянии искажены вследствие статич. эффекта Яна—Теллера, а в $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ триплетное состояние локализовано на одном из фрагментов CrO_4^{2-} . Обсуждена возможность наблюдения триплетных состояний в ионах CrO_4^{2-} и MnO_4^- , где люминесценция отсутствует.

В. С. Миронов

Х. 1987, 19, № 21

F: Cr207

P: 3

131:262911 Ab initio calculations on some transition metal heptoxides by effective core potentials.

Amado, Ana M.; Ribeiro-Claro, Paulo J. A.

Unid Quimica-Fisica Molecular, Departamento de Quimica, Faculdade de Ciencias Tecnologia, Universidade de Coimbra Coimbra P-3049, Port. THEOCHEM, 469, 200

(English) 1999 Ab initio mol. structures and vibrational frequencies for several transition metal heptoxides $X_2O_7^{n-}$ ($X = V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Mn, Re, Tc; 2, 4$) were calcd. using effective core potentials at the HF and DFT (B3LY levels. The relative merits of different valence basis set arrangements tested by comparison with exptl. results available, in particular with ga Re_2O_7 mol. structure and vibrational

1999

frequencies. The calcns. were then extended to other heptoxides of the VB, VIB and VIIB transition metal groups. The results indicate that a staggered geometry (either D3d or C2) is the min. for most of the heptoxides studied. The only exceptions are Mn2O7, clearly prefers an eclipsed C2v(syn) configuration, and Tc2O7, for which C2v(syn) geometries have nearly the same energy. Particular attention was to the magnitude of the X-O-X bond angle, as this structural parameter has a matter of some controversy. The calcd. values range from 125.degree. (to 180.degree. (Group VB heptoxides) and depend on the position of the transition metal in the Periodic Table. A tendency for linearity of the moiety on going both downwards the group and backwards the period was observed.