

CrCl_2

VII 1312

1961

C_2Cl_2 (2c)

Oswald H.R.

Helv. chim. acta, 1961, 44, 44,
1049-1054.

РЖХ, 1962, 15210

8 с. 0 риз.

Мч

CrCl₂(2)

summe 1721.

1963

u. n.

L. Brewer? G. R. Somayajulu et al.

J. Chem. Rev. 1963, 63, III

THE HYDRODYNAMIC PROPERTIES.....

))

KCl, NaCl, CsCl, RbCl,
CaCl, BaCl, MgCl, SrCl,
ZnCl, CdCl, HgCl, $TiCl_2$, $CrCl_2$,
 $MnCl_2$, $FeCl_2$, $CoCl_2$, $NiCl_2$
(spekr. dannie)

Pearson R.G., Gray H.B.

Inorgn. Chem., 1963, 2, N2, 358-63.

RX., 1964, 2B34

J

ECTD W. H.

1963
V-763

CrCl_2 Nagarajan Ч. 1964
(v, v) Ж. Мolec. Spectrosc., 1964, 13,
4, 361-392.

Средние амплитуды ко-
лебаний и эффект, сокра-
щения Бастмансена - Мори-
но в некоторых симметричных
метам-ди-
гасюенидах.

Оттиск А-350

х. 1965.21

BSP VI 4031

1964

sil. post. (MSiF₆·6H₂O, (M=Ni, Mn, Fe), NiCl₂·6H₂O,
MnCl₂·4H₂O, MSO₄·7H₂O (M=Zn, Mg), CuSO₄·5H₂O ,
CrCl₃·6H₂O)

Nakagawa, J. Shimanouchi -
Spectrochim. acta, 1964, 20, n 7, 429-39

Infrared absorption spectra of aqua complexes
and the nature of co-ordination bond

PJF, 1966, 5D392

Paenica 6!

J.

Cr Cl₂

De Kock C.W., OM 41478/1966
Gruen D. M.

спектр
полюсу.

J. Chem. Phys., 1966, 44, n 12,
4387.

Дискретные спектры по-
люсу слия хлоридов пере-
ходных металлов
указаны на с. 44 в газетной

ком. составлен.

(см. $V\text{Cl}_2$)

Фториды, Хлориды, Бромиды, Иодиды Be, Mg, 1968
Zn, Cd, Hg, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, ^{6 7}
HgCl₂, HgBr₂ (см. пос. Средне-в. аэр.)
(атм. колебания) ⁹

Cyvin S. J. Vizi B. VI 6997
Veszpremi Vegyip. Egyet. Közlem. 1968,
10 (9) 11(1), 83-9

Mean amplitudes
effects of vibration for same linear 50

74941 Matrix-isolation study of the infrared and ultraviolet spectra of several first-series transition-metal dichlorides. Jacox Marilyn E.; Milligan, Dolphus E. (Nat. Bur. of Stand., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 1969, 51(9), 4143-55 (Eng). Individual mols. of CrCl_2 , MnCl_2 , FeCl_2 , CoCl_2 , and NiCl_2 have been isolated in an Ar matrix at 14°K in sufficient concn. for ir and uv spectroscopic study not only by using the conventional effusion cell as a source of the MCl_2 species, but also by trapping the products of the reaction of Cl with the hot transition-metal surface. Studies of the ir spectra of all of these species in the $250\text{--}4000\text{-cm}^{-1}$ spectral range are consistent with a linear structure. The uv absorptions in the $2000\text{--}5500\text{-\AA}$ spectral range are in good agreement with the previously reported gas-phase absorptions. However, the absorption observed for matrix-isolated NiCl_2 between 4400 and $5000\text{ \AA}$ must be attributed to 3 different electronic transitions, 1 of which exhibits extensive band structure. A MO treatment involving participation of the $3d$ Ni electrons in the bonding of the mol. predicts the occurrence of several transitions in this energy range and provides a framework for understanding the appearance of extensive vibrational structure in several of the electronic transitions of NiCl_2 .

RCJQ

1969

11-70-11

CrCl_2

CrCl₂

11-70-11

11-70-11

11-70-11

C.A. 1970, 72.2

CrCl_2

Linevsky M. J.

1968

Vi

U.S. Govt. Res. Develop. Rep.,
1968, 68, N16, 63

(Cell. H_2SO_2) III

CrCl_2

VI-7028

1969

10 Б193. Изучение инфракрасных и ультрафиолетовых спектров поглощения нескольких матрично-изолированных дихлоридов переходных металлов первого ряда. Loxox Marilyn E., Milligan Dolphus E. Matrix-isolation study of the infrared and ultraviolet spectra of several first series transition-metal dichlorides. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 9, 4143—4155 (англ.)

матрица
в матрице

Измерены спектры ИК- $(250-4000 \text{ см}^{-1})$ и УФ-поглощения $(2000-5500 \text{ Å})$ CrCl_2 (I), MnCl_2 (II), FeCl_2 (III), CoCl_2 (IV) и NiCl_2 (V), матрично-изолированных в Ar при 14°K . В ИК-спектре I в Ar матрице обнаружена интенсивная полоса поглощения $\sim 490 \text{ см}^{-1}$, отнесенная к антисимм. вал. кол. связей $\text{Cr}-\text{Cl}$ (ν_3) линейной I. Ряд полос, наблюдающихся в области $470-475 \text{ см}^{-1}$

X. 1970. 10

4



предположительно отнесен к колебаниям ассоциированных молекул I, расположенных в различных по симметрии положениях в кристаллич. матрице. В ИК-спектре II обнаружены 3 полосы в области $471\text{--}477\text{ см}^{-1}$, относительная интенсивность которых согласуется с их отношением к вал. кол. ν Mn—Cl различных изотопич. вариантов II. В ИК-спектре образца II, полученного осаждением из перегретых паров ($\sim 530^\circ$) обнаружена полоса 384 см^{-1} , которая может быть связана с образованием MnCl. ИК-спектры III—V оказались сходными с ИК-спектром I, что свидетельствует о линейной структуре III—V. Спектры УФ-поглощения матрично-изолированных I—V оказались близкими со спектрами газообр. I—V. Вид УФ-спектра V в области $4400\text{--}5000\text{ \AA}$ может быть объяснен существованием 3 различных электронных переходов. Расчет с учетом вклада $3d$ электронов Ni также предсказывает существование нескольких электронных переходов в этой области.

Г. Кузьмин.

Gr 2

[A-1438]

1969

Di, sp. kv.
amr.
konstant.

Cyvin S. F.,
Kgl. Norske Vidensk. S. k.
Selsk. Skr. 1969,
part 1, nr. 20 pp.

$\text{CrCl}_2(2)$

(obzop)

crucup

[D.M. 20 274]

1971

Brueen D.M.,

Progress in Inorg. Chem.,
1971, 14, 119-172.

VII 6130

1971

2; (CrCl₂, VCl₂, FeCl₂, CoCl₂,
NiCl₂, CuCl₂) (22) 7 6

Smith D.W.,

Inorg. chim. acta Revs, 1971, 5, v2,

231-240 (abbr).

ligand field splittings in non-cubic
complexes. I analysis of the d-d spectra
of the gaseous
first transition
dichlorides of the
series



W

12



CaCl_2 , ScCl_2 , TiCl_2 , VCl_2 , CrCl_2 , MnCl_2 , FeCl_2 , NiCl_2 , ScCl_3 , TiCl_3 , TiCl_4 7 6 8
(crystals; 1971
Vi: VII) 6162

Hastie J.W., Hauge R.H., Margrave J.D.,
High Temp. Sci., 1971, 3, N3, 257-74 (ann.)

Infrared spectra and geometries
for the dichlorides of calcium,
scandium, titanium, vanadium,
chromium, manganese, iron,
and nickel.

10 (4) 20 CA, 1971, 75, N10, 69061m

CrCl_2 авторегерат (КХН) ¹⁹⁷⁵

(A.P) Мамбеева М.А.

Масс-спектр. исследование CrCl_2 и смеси KCl , RbCl , $\text{CsCl} // \text{CrCl}_2$

оттиск 6207

1978

CrCl_2

14 Б57. Неэмпирические расчеты методом МО основных и возбужденных состояний мономерных линейных дихлоридов MCl_2 ($\text{M}=\text{Cr}, \text{Co}, \text{Cu}$). Garner C. Da-

vid, Hillier Ian H., Wood Carol. Ab initio molecular orbital calculations of the ground and excited states of the monomeric linear dichlorides MCl_2 (where $\text{M}=\text{Cr}, \text{Co}, \text{or Cu}$). «Inorg. Chem.», 1978, 17, № 1, 168—172 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО с учетом конфигурац. взаимодействий (КВ) в базе сгруппированных гауссовских функц. проведены расчеты основных и возбужденных состояний газообразных дихлоридов: CrCl_2 (I), CoCl_2 (II) и CuCl_2 (III). На основании полученных результатов идентифицированы полосы поглощения в электронных спектрах дихлоридов. Для I поглощение в областях 0,54 и 0,9 мкм^{-1} обусловлено переходами $^5\Sigma_g^+ \rightarrow ^5\Pi_g$ и $^5\Sigma_g^+ \rightarrow ^5\Delta_g$. $^4\Phi_g$ найдено основным состоянием для II, а переходы $^4\Phi_g \rightarrow ^4\Delta_g$, $^4\Phi_g \rightarrow ^4\Sigma_g^-$ и $^4\Phi_g \rightarrow ^4\Pi_g$ отвечают за поглощение в областях 0,52, 1,04 и 1,82 мкм^{-1} . Поглощение в области 1,9 мкм^{-1} III обу-

КВ, экр.
расчет

М.И.

(+1) CuCl_2

CoCl_2 ☒

ж, 1978, № 4

словлено переходом с переносом заряда с $3p$ Cl на $3d$ Cu АО, а поглощение в областях $0,7$ и $1,1$ мкм⁻¹— d — d -переходами ${}^2\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Delta_g$ и ${}^2\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Pi_g$. Анализ заселенностей МО по Малликену показал, что: 1) в соединении I для состояния ${}^5\Sigma_g^+$ атом Cr имеет конфигурацию $3d^{4,6}4p^{0,4}$, а формальные заряды $Cr^{1,04+}$ и $Cl^{0,52-}$; 2) в соединении II для состояния ${}^4\Sigma_g^-$ электронная конфигурация атома Co $3d^{7,4}4s^{0,14}4p^{0,4}$ с формальными зарядами на атомах $Co^{1,02+}$ и $Cl^{0,51-}$; 3) в соединении III для состояния ${}^2\Sigma_g^+$ атом Cu имеет конфигурацию $3d^{9,4}4s^{0,5}$.

С. Б. Никищенко

summary 6207 1978

CrCl₂
CoCl₂
CuCl₂

re. spec.
factor

(+2) ☒

88: 43223j Ab initio molecular orbital calculations of the ground and excited states of the monomeric linear dichlorides MCl₂ (where M = chromium, cobalt, or copper). Garner, C. David; Hillier, Ian H.; Wood, Carol (Chem. Dep., Univ. Manchester, Manchester, Engl.). *Inorg. Chem.* 1978, 17(1), 168-72 (Eng). Self-consistent field and CI calcs. were performed to describe the ground and excited states of CrCl₂(g), CoCl₂(g), and CuCl₂(g). The calcd. transition energies are sensitive to the configurations included but good agreement with exptl. data was obtained in each case. From these ab initio calcs. the absorptions at ≈ 0.54 and $0.9 \mu\text{m}^{-1}$ in the electronic spectrum of CrCl₂(g) can be assigned to the transitions $^5\Sigma_g^+ \rightarrow ^5\Pi_g$ and $^5\Sigma_g^+ \rightarrow ^5\Delta_g$, resp. The ground state of CoCl₂(g) is suggested to be $^4\Phi_g$ and the absorptions in the electronic spectrum at 0.52 , 1.04 , and $1.82 \mu\text{m}^{-1}$ are assigned to the transitions $^4\Phi_g \rightarrow ^4\Delta_g$, $^4\Phi_g \rightarrow ^4\Sigma_g^-$, and $^4\Phi_g \rightarrow ^4\Pi_g$, resp. The

absorption in the electronic spectrum of CuCl₂(g) at $\approx 1.9 \mu\text{m}^{-1}$ is considered to arise from a Cl 3p to Cu 3d charge-transfer transition, while the structured absorption band occurring between 7 and $11 \mu\text{m}$ is assigned to the "d-d" transitions $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Delta_g$ and $^2\Sigma_g^+ \rightarrow ^2\Pi_g$.

C.A. 1978, 82, 16

CrCl₂

19 Б97 Деп. Изучение геометрической структуры основных молекулярных форм пара над CrCl_2 методом газовой электронографии. Купреев В. Н., Слепнев Г. Е., Засорин Е. З., Татаринцев А. В. Белорус. технол. ин-т. Минск, 1978. 11 с., ил., библиогр. 17 назв. (Рукопись деп. в ОНИИТЭХИМ, Черкассы 21 июня 1978 г., № 1793/78 деп.). 1978

*гексамер
гексамер*

Экспериментальная дифракционная картина, полученная в области $S=2,6-22,6 \text{ \AA}^{-1}$; определяется в основном рассеянием на мономерных и димерных молекулах дихлорида хрома. Найденное соотношение мономер — димер близко к значению, полученному масс-спектрометрич. методом. В предположении, что димерная молекула Cr_2Cl_4 имеет мостиковую структуру, а концевые межъядерные расстояния хром — хлор совпадают с расстоянием хром — хлор в мономере, получены след. основные параметры димера: $r_a(\text{Cr}-\text{Cl})_{\text{мост}} = 2,34 \pm \pm 0,01 \text{ \AA}$; $\text{Cl}_{\text{мост}}-\text{Cr}-\text{Cl}_{\text{мост}} = 112 \pm 2^\circ$. Оптим. структурные параметры CrCl_2 : $r_a(\text{Cr}-\text{Cl}) = 2,199 \pm 0,005 \text{ \AA}$; $l_a(\text{Cr}-\text{Cl}) = 0,082 \pm 0,003 \text{ \AA}$; $r(\text{Cr}-\text{Cl}) = 2,199 \pm 0,005 \text{ \AA}$; $l_a(\text{Cl} \cdots \text{Cl}) = 0,17 \pm 0,02 \text{ \AA}$. Согласование расчетных и эксперим. значений амплитуд колебаний и эффекта сокращения свидетельствует в пользу линейной равновесной конфигурации молекулы.

Автореферат

2. 1978 N 19

1978

CrCl_2 , Cr_2Cl_4 (структ. парам.)

Купреев В. Н.,

Электрографическое исследование
строения комплексных соединений
на основе хлоридов щелочных метал-
лов, иттрия и  хрома, Ленинск,
1978.

1978

Cr Cl₂
Cr₂ Cl₄

Купреев В. И.

Автореферат К.Х.Н.

мод.
структ

Оттиск 9728 1980

$CrCl_2$

$MnCl_2$

$FeCl_2$

$CoCl_2$

$NiCl_2$

фотоэлектр.
спектр

(+4) ☒

ф. 1980 № 12

12 Д328. Фотоэлектронные спектры и электронная структура дихлоридов переходных металлов MCl_2 ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$). Photoelectron spectra and electronic structure of the transition metal dichlorides, MCl_2 ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$). Lee Edmond P. F., Potts Anthony W., Doran Mark, Hillier Jan H., Delaney John J., Hawksworth Roger W., Guest Martyn F. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 5, 506—519 (англ.)

Изучены HeI- и HeII-фотоэлектронные спектры дихлоридов переходных металлов MCl_2 ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$) (I—V). Первые вертикальные потенциалы ионизации I—V равны (в эВ): 9,97; 11,03; 10; 10,60; 11,23. Фотоэлектронные спектры I—V интерпретированы при помощи расчетов потенциалов ионизации в рамках неэмпирич. Δ ССП-метода и РВХ $_{\alpha}$ -метода, анализа изменений интенсивностей полос в HeI- и HeII-спектрах. Отмечено, что идентификация полос, относящихся к удалению d -электронов из атомов M затруднена. Обсуждено выполнение теоремы Купманса при удалении d -электронов M . Библ. 20. Ю. В. Чижев

Оттиск 14170

Оттиски 9728

1980

21 Б114. Фотоэлектронные спектры и электронное строение дихлоридов переходных металлов MCl_2 ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$). Lee Edmond P. F., Potts Anthony W., Doran Mark, Hillier Ian H., Delaney John J., Hawksworth Roger W., Guest Martyn F. Photoelectron spectra and electronic structure of the transition metal dichlorides, MCl_2 ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$). «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 5, 506—519 (англ.)

С использованием источников возбуждения He-I и He-II исследованы фотоэлектронные спектры (ФЭС) дихлоридов переходных металлов MCl_2 ($M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni$). Электронное строение $CrCl_2$, $MnCl_2$ и $NiCl_2$ рассчитано методом ССП МО ЛКАО в базисе 49 сгруппированных гауссовых орбиталей при линейной геометрии конфигурации. Потенциалы ионизации (ПИ) дихлоридов Cr, Mn и Ni оценены по теореме Купменса и в приближении Δ ССП; для этих молекул они были вычислены также методом ограниченного configuraц.

CrCl₂
MnCl₂
FeCl₂
CoCl₂
NiCl₂
фотоэлектр.
спектр. (74) 8
X. 1980/21

Оттиски 14170

взаимодействия (КВ), учитывающего конфигурации, получающиеся при удалении одного электрона с МО основного состояния молекул. Для сравнения расчеты электронного строения дихлоридов Сг, Мп и Ni проведены методом ССП— X_α рассеянных волн (X_α -РВ) в приближении перекрывающихся сфер; ПИ вычислены в приближении переходного состояния. Ионизация МО лигандов хорошо описывается в рамках теоремы Купменса и метода Δ ССП. В расчетах X_α -РВ энергетич. распределение этих ПП вдоль спектра получено большим, чем наблюдается в эксперим. ФЭС. ПИ атома металла неправильно передаются в расчетах как с использованием теоремы Купменса, так и метода Δ ССП. Правильный порядок следования ПИ d -уровней атомов металла в дихлоридах получен в расчетах методами КВ и X_α -РВ, в соответствии с к-рыми основная доля ПИ d -уровней металла сосредоточена в первой полосе ФЭС.

И. А. Тополь

Ommuck 9728

1980

93: 104369p Photoelectron spectra and electronic structure of the transition metal dichlorides, MCl_2 ($M =$ chromium, manganese, iron, cobalt, nickel). Lee, Edmond P. P.; Potts, Anthony W.; Doran, Mark; Hillier, Ian H.; Delaney, John J.; Hawksworth, Roger W.; Guest, Martyn F. (Phys. Dep., Kings Coll., London, Engl. WC2R 2LS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1980, 76(5), 506-19 (Eng). The He I and He II

photoelectron spectra of the title compds. were recorded and interpreted using scattered-wave- $X\alpha$ and ab initio MO calcs. The assignment of ligand levels is given accurately by use of Koopmans' theorem. The metal ionization energies are given incorrectly by both Koopmans' theorem and the ΔSCF method but are predicted accurately by a CI method allowing for orbital relaxation occurring on ionization.

(promoted. circ. rep.) (+1) ☒

C.A. 1980.33. N10

Ommuck 14170

AlCl_3

[Dm. 23327]

1978

Rosseinsky D. R.,
Dorrity J. A.,

Электрон.
спектр.

Coordinat. Chem. Rev.,
1978, 25, 31-67.

RCl₂(2)

[om. 24989]

1981

Hargittai M.,

Inorg. Chim. Acta,

1981, 53, ~~111~~ 111-112.



r_{M-Cl}

1981

$CuCl_2$
 $MnCl_2$
 $FeCl_2$
 $CoCl_2$
 $NiCl_2$
 $ZnCl_2$

список 70995

дл. спектров

(+5) ☒

Х. 1981. 1/14

14 Б148. Фотоэлектронные спектры с возбуждением He-I некоторых газообразных дигалогенидов переходных 3d-металлов. MacNaughton R. M., Bloor J. E., Sherrod R. E., Schweitzer Geo K. The He(I) photoelectron spectra of some gaseous 3d-transition metal dihalides. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1981, 22, № 1, 1—25 (англ.)

С использованием источника возбуждения He-I проведены измерения фотоэлектронных спектров (ФЭС) паров сильно нагретых смесей порошка металла и AgX ($X=Cl$ и Br), а также паров $(AgCl)_3$ и $(AgBr)_3$. Результаты измерений свидетельствуют о том, что практически все исследованные пары, за исключением паров смеси $Ni-AgBr$, состоят из дигалогенидов MX_2 ($M=Cr, Mn, Fe, Co, Ni$) или $(CuX)_3$ ($X=Cl, Br$). ФЭС $(AgBr)_3$ аналогичен ФЭС $(AgCl)_3$. ФЭС $(AgCl)_3$, $(CuCl)_3$ и $(CuBr)_3$ идентичны ФЭС этих соединений, известным из ранее опубликованных работ. Методом ССП- X_α рассеянных волн (X_α -РВ), в приближении перекрывающихся атомных сфер с использованием спин-поляризованного и спин-неполяризованного вариантов

метода рассчитано электронное строение молекул CrCl_2 , MnCl_2 , FeCl_2 , CoCl_2 , NiCl_2 и ZnCl_2 . Для всех молекул, кроме CuCl_2 , проведены расчеты низко- и высокоспиновых конфигураций. В MnCl_2 и CoCl_2 рассчитаны также конфигурации $\delta^3\pi^2\sigma^0$ и $\delta^3\pi^2\sigma^1$ соотв. На основании рассчитанных одноэлектронных энергий, а также неопубликованных данных Поттса по ФЭС с возбуждением He-II дихлоридов переходных 3d-металлов проведена интерпретация структур эксперим. ФЭС в соединениях MCl_2 . По аналогии интерпретированы также структуры ФЭС соединений MBg_2 . С учетом отнесения эксперим. ФЭС установлено, что валентными конфигурациями основного состояния являются $\delta^2\pi^2\sigma^0$ для CrCl_2 и CrBg_2 , $\delta^2\pi^2\sigma^1$ для MnCl_2 и MnBg_2 , $\delta^3\pi^2\sigma^1$ для FeCl_2 и FeBg_2 , $\delta^3\pi^3\sigma^1$ для CoCl_2 и CoBg_2 , $\delta^4\pi^4\sigma^0$ для NiCl_2 . Во всех случаях, за исключением CoX_2 , по данным расчетов полных энергий методом ХФ-РВ конфигурациям, полученным на основании отнесения эксперим. ФЭС, соответствует наименьшее значение полной энергии молекул. В CoX_2 полученная конфигурация соответствует 1-му возбужденному состоянию, однако разность энергий между этим и основным состоянием предельно мала.

И. А. Тополь

CrCl₂

Om. 17726

1983.

Ловба В.М.,

ИК спектры
полученные

М. Неотак. химии,
1983, 28, №10, 2689-91.

CrCl_2^-

1983

Alakarov A.V., Niki-
tin O.T.

(масс-
спектр
 CrCl_3)

Vestn. Mosk. Univ., Ser.
2: Khim. 1983, 24 (5),
503-4.

($\text{Cr}^\bullet$; III)

CrCl_2

(Dm. 23143) 1985

Hargittai Magdolna,
Zorofeeva Olga V., et al.

(re, L)

Inorg. Chem. 1985, 24
(23), 3963-5.

● (cell. VCl_2 ; III)

CrCl₂(2) (O.M. 26629) 1987

Ogden F.S., Wyatt R.S.,

M.N.,
Kp

J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1987, N4, 859-
-865.

(C.M. CrCl₄; III)

ГЦ₂

130353

1988

Краснов К.С.,
Филиппенко М.В.,

д.р.н.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. № 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

CrCl₂

Ум 31883

1989

7. 10 Д54. Является ли CrCl₂ линейной или изогнутой молекулой? Исследование неэмпирическим методом МО. Is CrCl₂ linear or bent? An ab initio MO study / Smith Stephen, Hillier Ian H. // J. Chem. Soc. Chem. Commun. — 1989.— № 9.— С. 539—540.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых ф-ций 14s9p6d/12s9p, сгруппированном в 10s8p3d/6s5p, а также с учетом конфигурац. взаимодействия исследовано электронное строение CrCl₂ в состояниях ⁵Σ_g⁺, ⁵A₁, ⁵Π_g, ⁵B₂ и ⁵A₂. Обнаружено, что основным является состояние ⁵Σ_g⁺ с линейной геометрией (длина связи 2,315 Å) и конфигурацией 1δ_g² 3π_g². Также линейно следующее по энергии состояние ⁵Π_g (2,309 Å). В остальных состояниях молекула изогнута. В то же время отмечено, что потенц. кривые деформации являются пологими. Рассчитанные частоты деформационного, симметричного и асимметричного валентных колебаний равны 92, 320 и 464 см⁻¹ (эксперим. значение 457).

В. Л. Лебедев

фр. 1989, N 10

CrCl_2

011.31883

1989

22 Б1026. Является ли молекула CrCl_2 линейной или изогнутой? Неэмпирическое исследование методом МО. Is CrCl_2 linear or bent? An ab initio MO study / Smith, St., Hillier I. H. // J. Chem. Soc. Chem. Commun.— 1989.— № 9.— С. 539—540.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в широком базисе с учетом конфигурац. взаимодействия рассчитана электронная структура и геометрия молекулы CrCl_2 в 2 электронных конфигурациях. Основным состоянием найдено $^5\Sigma$, отвечающее конфигурации $1d_g^2 3\pi_g^2$ (приведены только МО 3d-характера) и линейной геометрии; в конфигурации $1d_g^2 3\pi_g^1 9\sigma_g^1$ молекула также линейна, причем возбужденное состояние $^5\Pi_g$ лежит на 0,28 эВ выше основного состояния. Во всех исследованных состояниях потенциальные кривые, отвечающие изгибу молекулы, очень пологие. Вычисленные частоты колебаний в основном состоянии составляют 92 см^{-1} для деф. кол. и 320 и 464 см^{-1} соотв. для симм. и асимм. вал. кол.

В. К. Михалко

М.П.

X. 1989, N 22

662

Om. 37 662

1994

Beattie I.R., Spicer M.D.,
Young N.A.,

crump
f

recomp, g. Chem. Phys., 1994,
crump, 100, N 12, 8700-8705
p. 100

Cl₂

(DM. 38066)

1995

Hildenbrand D.L.,

D⁰₂₉₈

J. Chem. Phys., 1995,

103 (7), 2634-2641

Cx Clx

Um. 38405

1996

Konings R. J. M.,

u.n. High Temperat- and Materi-
als Science, 1996, 25,
105-113.

CrCl₂ Om 38777, Om 38778

1997

127: 113669j Bonding, bending and the ground state of CrCl₂. Bridgeman, Adam J.; Bridgeman, Catherine H. (University Chemical Laboratories, Lensfield Road, Cambridge, UK CB2 1EW). *Chem. Phys. Lett.* 1997, 272(3,4), 173-177 (Eng), Elsevier. Local d.-functional calcs. within the linear combination of Gaussian-type orbitals framework on the CrCl₂ mol. predict a linear ${}^6\Pi_g$ ground state. This ground state is unusual in having larger π than σ -bonding and differs from that predicted by earlier work. The linear geometry is consistent with spectroscopic studies of this mol. but is at variance with a recent calcn. of the third law entropy. A reanal. of the exptl. entropy, allowing for the likelihood of impurities, appears to be consistent with the theor. prediction of a linear mol.

($X^6\Pi_g$ лев-
спрвхм.)

C.A. 1997, 127, N 8

CrCl₂

1997

nomes
roberth.
X⁵B₂ com.

127: 86382b Chromium dichloride: the unusually flat bending potential of the ⁵II_g-derived ⁵B₂ ground state. Jensen, Vidar R. (Department of Chemistry, University of Bergen, N-5007 Bergen, Norway). *Mol. Phys.* 1997, 91(1), 131-137 (Eng), Taylor & Francis. Modern quantum chem. methods have been used to study the three lowest-lying electronic states of CrCl₂. The calcns. were performed at the single, double and perturbative triple excitation coupled cluster (CCSD(T)) levels, at the modified coupled pair functional level, and also with a hybrid d. functional method. For linear structures, the three lowest states were found to be (in order of increasing energy): ⁵II_g, ⁵Σ_g⁺ and ⁵Δ_g. This order implies a permutation of the two lowest states compared with previous reports. While the upper two linear states were found to represent min. on their resp. potential curves of bending, the ⁵II_g-derived ⁵B₂ ground state is found to be unusually flat, affording no conclusive evidence as to where the true min. is located. However, the isotopic shift pattern calcd. for the asym. stretching mode in a bent mol. is different from that obsd. in matrix isolation IR studies, suggesting that CrCl₂ is linear or nearly linear when trapped in a matrix.

C. A. 1997, 127, N 6