

Gr-C-N, P, As,

Sb, Bi

Cr(CN)₆³⁻ (sil.post.)

VII 437 1958

Caglioti V., Sartori G.,
Furlani C.,

Atti Accad.naz.Lincei.Rend.LL.sci.fis.,
mat. e natur., 1958, 25, N5, 260-67.

Атомизиров. энергия ковал.

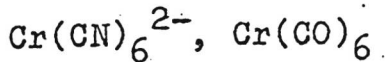
иона Cr(CN)₆³⁻

RX., 1959, N 18, 63477

J

силь. ф.к

VII 2129 1960



(sil.post.)

Caglioti V., Sartori G., Furlani C.

J. Inorg. and Nucl. Chem., 1960, 13, N1-2, 22-27.

Sil.post. $\text{Cr}(\text{CN})_6^{2-}$, $\text{Cr}(\text{CO})_6$.

RX., 1961, 1B110.

J

ЕСТЬ Ф. К.

1962

A-531

Vi, sil. post. / $\text{Ag}(\text{CN})_2$,

$\text{Au}(\text{CN})_2$, $\text{Hg}(\text{CN})_2$, $\text{Cu}(\text{CN})_4$, $\text{Zn}(\text{CN})_4$, $\text{Cd}(\text{CN})_4$, . . .

$\text{Hg}(\text{CN})_4$, $\text{Ni}(\text{CN})_4$, $\text{Pd}(\text{CN})_4$, $\text{Pt}(\text{CN})_4$, $\text{Au}(\text{CN})_4$,

$\text{Cr}(\text{CN})_6$, $\text{Mn}(\text{CN})_6$, $\text{Fe}(\text{CN})_6$, $\text{Ru}(\text{CN})_6$, $\text{Os}(\text{CN})_6$,

$\text{Co}(\text{CN})_6$, $\text{Rh}(\text{CN})_6$, $\text{Ir}(\text{CN})_6$, $\text{Mo}(\text{CN})_8$ / . .

Mathien J.P., Poulet H.

Advances Molec. Spectrosc. v.3, 1962, 1016-24.

Relations entre le spectre de vibration et la structure des cyanures complexes.

PJX, 1963, 15687 J, Est/orig.

VII 139/...

1963

$[Cr(CN)_6]^{3-}$ (Te)

Мауза Э.В., Батарунае И.В.
Литовский физический сборник
~~Let. fiz., tinkinys, lit. fiz.~~

1963, 3, ч 1-2, 341-346.

Весь орг.

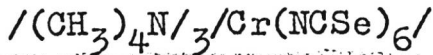
Резфиз., 1964,
5055.

Ю

9758

VII 2422

1963



()

Michelsen K.

Acta chem.scand., 1963, 17, N 6,
1811-1814

An isoselenacyanate ...

J

ЕСТЬ Ф. К.

/ обзор/ Карбонилы металлов

1969

A-904

$ML(CO)_5$, $ML_2(CO)_4$, $ML_3(CO)_3$,
 $MnX(CO)_5$, $/MnX(CO)_4/2$, где X,
M=Mo, W, Cr, L= PCl_3 , $P(C_2H_5)_3$, $P(CH_3)_3$ и др.
(Vi(CO), sil.post.)

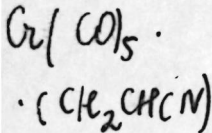
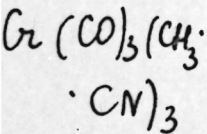
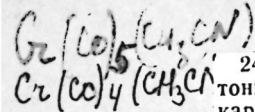
Cotton F.A.

Inorgn. Chem., 1964, 3, N5, 702-11.

Vibrational spectra and assignments of
CO stretching modes in various molecules,
evaluation of VO bond orders.

RX., 1965, 7B128 J

1967



24 Б106. Низкочастотный инфракрасный спектр ацетонитрильных и акрилонитрильных производных гексакarbониллов хрома, молибдена и вольфрама. Fagona Michael F., Grasselli Jeanette G., Ross Bonnie L. Low frequency infrared spectra of acetonitrile and acrylonitrile derivatives of chromium, molybdenum and tungsten hexacarbonyls. «Spectrochim. acta», 1967, A 23, № 6, 1875—1881 (англ.)

Изучены ИК-спектры в области $700-100 \text{ см}^{-1}$ комплексов $\text{M}(\text{CO})_{6-n}(\text{CH}_3\text{CN})_n$ ($\text{M} = \text{Cr}, \text{W}, n=1,2$); $\text{M}(\text{CO})_3(\text{CH}_3\text{CN})_3$ ($\text{M} = \text{Cr}, \text{Mo}, \text{W}$); $\text{M}(\text{CO})_5(\text{CH}_2\text{CHCN})$ ($\text{M} = \text{Cr}, \text{W}$). Показано, что из-за сильной поляризации связи CO силовая постоянная связи $\text{M}-\text{N}$ для производных карбониллов металлов должна быть больше, чем для производных галогенидов металлов. Из теоретико-груп-

+6

x. 1967. 24



пового рассмотрения следует, что для комплексов $M(CO)_5(CH_3CN)$ и $M(CO)_5(CH_2CHCN)$, принадлежащих к точечной группе симметрии C_{4v} , ожидаются следующие активные в ИК-спектре полосы: три вал. кол. $M-C$ ($2A_1 + E$), четыре ножн. кол. $A_1 + 3E$ и одно вал. кол. $M-N$ (A_1). В спектре $W(CO)_3(CH_3CN)_3$ в области ниже 265 см^{-1} имеются три очень слабые полосы, которые были отнесены к ножн. кол. $W-N-C$. Производные $W(CO)_5(CH_3CN)$ и $W(CO)_4(CH_3CN)_2$ в указанной области не имеют полос поглощения. Однако эти соединения поглощают в области выше 265 см^{-1} . В их спектрах в интервале $700-265\text{ см}^{-1}$ имеются полосы вал. кол. $M-C$, ножн. кол. MSO и CCN . Полосы вал. кол. $M-N$ в данном интервале не наблюдаются. Вал. кол. $M-N$ обнаружены только в спектрах тризамещенных производных $M(CO)_3(CH_3CN)_3$. В частности, для $M=Cr$ $\nu_a=552$, $\nu_s=495\text{ см}^{-1}$, для $M=Mo$ $\nu_a=533$, $\nu_s=481\text{ см}^{-1}$, для $M=W$ $\nu_a=538$, $\nu_s=489\text{ см}^{-1}$. И. В. Кумпаненко

$\text{Cr}(\text{CO})_5\text{I}^-$; $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{CN}^-$; $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{NCI}^-$; 1967
 $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{I}^-$; $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{CN}^-$; $\text{Cr}(\text{CO})_5(\text{NCI})^-$;
 $\text{Cr}_2(\text{CO})_{10}\text{I}_2$; $\text{Cr}_2(\text{CO})_{10}(\text{NCI})_2$; $\text{Cr}_2(\text{CO})_{10}\text{CN}^-$

Lindner E., Behrens H.,
Spectrochim. acta, 1967, A23, N12,

3025-33

Есть ф. н.

VII 3926

px 1968
135216

10

VII 4252

1967

$M(CO)_5L$ (7)

$M = Cr, Mo, W$; $L = PCl_3, P(OCH_3)_3, P(OC_2H_5)_3,$
 $CNC_6H_{11}, CNC_6H_5, CNC_4H_9$

Pignataro S., Foffani A., Innocenti G.,
Distefano G.

Advances in Mass Spectrometry, Proc.
Conf. Berlin, Sept. 1967, London, 1968, vol 4, 323-332

FD

eev6 qk

7 VII 4252

1968

J. ($\text{Cr}(\text{CO})_5\text{-P}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$; $\text{Mo}(\text{CO})_5\text{-P}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$,
 $\text{W}(\text{CO})_5\text{-P}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$, $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{-P}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$,

$\text{Mo}(\text{CO})_5\text{-P}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$, $\text{W}(\text{CO})_5\text{-P}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$, $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{-PCl}_3$,
 $\text{Mo}(\text{CO})_5\text{-PCl}_3$, $\text{W}(\text{CO})_5\text{-PCl}_3$)

Pignatello S., Foffani A., Innorta G.,
Lisefano G.

Advances Mass Spectrom Vol 4, London, 1968,
"323-332"

ЕСТЬ О. Н.

Mass spectra and ionization potentials

Ru Xue, 1970, 45145-

10

8

⊕

$V(NCS)_6^{3-}$; $Cr(NCS)_6^{3-}$; $Fe(NCS)_6^{3-}$; $Mo(NCS)_6^{3-}$; $V(NCS)_6^{4-}$; $Ni(NCS)_6^{4-}$; $Mo(NCS)_6^{2-}$ | V_i 1970
| Ca
| $Mod.$

Clark R. Y. H., Goodwin A. D. Y., 76 VII 4845
Spectrochim. Acta, 1970, A26, N°2, 323-30
(annu.)
Infrared and laser Raman
spectra of metal hexaisothiocy-
anate ions.

10

14



CA, 1970, 72, N16, 84482f

$(\text{PH}_3)_2 \text{Mo}(\text{CO})_4; (\text{PH}_3)_2 \text{W}(\text{CO})_4; (\text{PH}_3)_2 \text{Cr}(\text{CO})_4;$ (conv. wt. 1970)
 $(\text{NH}_3)_2 \text{Mo}(\text{CO})_4; (\text{NH}_3)_2 \text{W}(\text{CO})_4; (\text{NH}_3)_2 \text{Cr}(\text{CO})_4;$
 $(\text{CH}_3)_2 \text{SiFe}(\text{CO})_4]_2; [(\text{CH}_3)_2 \text{GeFe}(\text{CO})_4]_2; [(\text{CH}_3)_2 \text{SnFe}(\text{CO})_4]_2;$ C-O
 $[(\text{CH}_3)_2 \text{PFe}(\text{CO})_4]_2; (\text{R}_3\text{Sn})_2 \text{Fe}(\text{CO})_4, \text{R}_4\text{M}_3[\text{Fe}(\text{CO})_4]_4,$
 where $\text{M} = \text{Sn}$ and Pb and $\text{M}[\text{Fe}(\text{CO})_4]_4$ ($\text{M} = \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$)

Delbeke F.T., Claves E.G., Van der Kelen G.P.
 Feckhaut Z., v. 11 50-12

J. Organometal. Chem., 1970, 25, No 1, 213-17
 Transition metal chemistry. V Calculation
 of CO stretching force constants of cis-
 disubstituted Cu up VI metal iron
 carbonyl complexes with local C_{2v} symmetry.
 10 1976, April CA, 1970, 43, No 11, 1251-35 m

$(PH_3)_2 Mo(CO)_4$; $(PH_3)_2 W(CO)_4$; $(PH_3)_2 Cu(CO)_4$; 1970
 $(AsH_3)_2 Mo(CO)_4$; $(AsH_3)_2 W(CO)_4$; $(AsH_3)_2 Cu(CO)_4$; can.
 $(NH_3)_2 Mo(CO)_4$; $(NH_3)_2 W(CO)_4$; $(NH_3)_2 Cu(CO)_4$; no cm.
 $(CH_3)_2 Fe(CO)_4$; $[(CH_3)_3 Pb]_2 Fe(CO)_4$; C-O
 $[(CH_3)_2 Sn]_2 Fe(CO)_4$; $[(CH_3)_2 Si]_2 Fe(CO)_4$;
 $[(CH_3)_2 Ge]_2 Fe(CO)_4$ VII 5013
 Delbeke F.T., Claeys E.G., Van der Kelen G.P.,
 J. Organometal. Chem, 1970, 25, № 1, 219-22 (anal.)
 Transition metal chemistry. VI. Calculation
 of force constants in the CO stretching-
 region of cis-disubstituted Group VI
 metal carbonyls and iron carbonyl com-
 plexes with C_{2v} symmetry.
 CH, 1970, 73, № 24, 125134 R

$\text{Cr}(\text{CO})_5\text{N}_2$

1971

W. Lux
p. 108

155105k Electronic structures and stabilities of hexacarbonylchromium and nitrogenpentacarbonylchromium. Chambers, William J.; Fitzpatrick, Noel J. (Dep. Chem., Univ. Coll., Dublin, Ire.). *Proc. Roy. Irish Acad., Sect. B* 1971, 71(7), 97-108 (Eng). LCAO MO calcs. of the electronic configuration of $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{N}_2$ were carried out. A self-consistent charge and configuration method was used. Results were compared with those for $\text{Cr}(\text{CO})_6$. $\text{Cr}(\text{CO})_5\text{N}_2$ showed less σ and π back donation than $\text{Cr}(\text{CO})_6$.
B. J. Whitlock

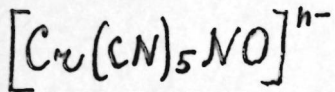
C. A. 1971. 75. 26



1974

(12700g) Potential constants of the hexacyanocobaltate ion. Jones, Llewellyn H.; Memering, Melvin N.; Swanson, Basil I. (Los Alamos Sci. Lab., Univ. California, Los Alamos, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(11), 4666-71 (Eng). The ir and Raman spectra of $\text{Co}^{12}\text{C}^{14}\text{N}_6^{3-}$, $\text{Co}^{13}\text{C}^{14}\text{N}_6^{3-}$, and $\text{Co}^{12}\text{C}^{15}\text{N}_6^{3-}$ were studied in aq. soln. and in the solid state. Fundamental frequencies were assigned for all but the F_{2u} vibrations. Force consts. and compliance consts. were calcd. and compared with isoelectronic $\text{Cr}(\text{CO})_6$ and with $\text{Au}(\text{CN})_2^-$.

C.H. 1974, 452.



1972

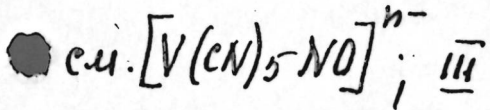
Kedzia B.B.; et al.

(C. n)

"Bull. Acad. pol. Sci.

Ser. Sci chim",

1972, 20, N 3, 237-43.



$\text{Cr}(\text{CN})_5\text{NO}^{3-}$

1982

40962m Infrared spectrum of potassium pentacyanonitrosylchromate. Normal coordinate analysis for $\text{Cr}(\text{CN})_5\text{NO}^{3-}$ anion. Paliani, G.; Poletti, A. (Inst. Phys. Chem., Univ. Perugia, Perugia, Italy). *Spectrosc. Lett.* 1972, 5(3-4), 105-10 (Eng). A normal coordinate anal. of the ir and far ir polarized absorption spectra of single-crystal $\text{K}_3\text{Cr}(\text{CN})_5\text{NO}$ gave the valence force consts. as $f_{\text{CN}}(\text{ax})$ 15.971, $f_{\text{CN}}(\text{eq})$ 16.472, f_{NO} 10.477, f_{MeN} 4.174, $f_{\text{MeC}}(\text{ax})$ 1.614, $f_{\text{MeC}}(\text{eq})$ 1.482, f_{MeNO} 1.200, and $f_{\text{MeCN}}(\text{ax})$ 0.239. The consts. $f_{\text{CN}}(\text{ax})$ and $f_{\text{CN}}(\text{eq})$ decreased somewhat, and the f_{NO} frequency decreased drastically in the series $[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]^{2-}$, $[\text{Mn}(\text{CN})_5\text{NO}]^{3-}$, $[\text{Cr}(\text{CN})_5\text{NO}]^{3-}$ due to a large increase in Me-N back bonding on going from the Fe complex to the Cr complex.

anal. n.

C.H. 1982. 77. 6

1973

 $\text{Cr}(\text{CN})_6^{3-}$

1 Б170. Использование люминесцентной спектроскопии для определения частот колебаний неактивных в инфракрасном спектре и спектре комбинационного рассеяния. Частоты колебаний τ_{2u} иона $\text{Cr}(\text{CN})_6^{3-}$. Flint Colin D., Greenough Paul. The use of luminescence spectroscopy to determine infrared and Raman inactive fundamentals: the τ_{2u} vibrational frequencies of the $\text{Cr}(\text{CN})_6^{3-}$ ion. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1973, № 14, 489—490 (англ.)

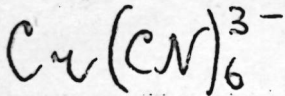
Vi

Исследован поляризац. спектр люминесценции (5°K) монокристалла $\text{K}_3\text{Co}(\text{CN})_6$, содержащего 0,073% Cr. Проведен анализ колебательной структуры полосы ${}^2E_g \rightarrow {}^4A_g$. Помимо активных в ИК-поглощении при 80°K колебаний с частотами 340 и 468 см^{-1} обнаружены компоненты, смещенные относительно O—O-полосы на 360 см^{-1} (деф. кол. $\tau_{2u} \text{Cr—C—N}$), 86 и 96 см^{-1} (преимущественно деф. кол. $\tau_{2u} \text{C—Cr—C}$) и 143, 152, 162 и 166 см^{-1} (в эти полосы предполагается существенный вклад колебания $\tau_{1u} \text{C—Cr—C}$). Полученные данные говорят в пользу отнесения верхней из двух наблюдаемых в ИК-поглощении полос к колебанию $\tau_{1u} \text{M—C}$. В. А. Сипачев

x 1974

N/

1973



120060x Use of luminescence spectroscopy to determine infrared and Raman inactive fundamentals. τ_{2u} Vibrational frequencies of the hexacyanochromate(III) ion. Flint, Colin D.; Greenough, Paul (Dep. Chem., Birkbeck Coll., London, Engl.). *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1973, (14), 489-90 (Eng). The ir and Raman inactive τ_{2u} Cr-C-N and C-Cr-C bending modes were assigned from the 5°K luminescence spectrum of $\text{Cr}(\text{CN})_6^{3-}$ in $\text{K}_3\text{Co}(\text{CN})_6$.

C.A. 1973. 79 v 20

$\text{Cr}(\text{CO})_5 \text{CN-CH}_3$

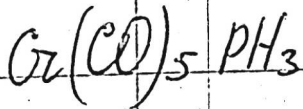
1974

Pince R

Thèse doct. sci. phys.
Univ. Paul Sabatier
Toulouse, 1974, (grecq.)

(reel
curep.)

iii
[all $\text{Cr}(\text{CO})_6$]

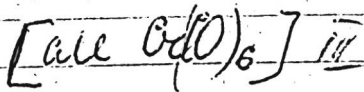


1974

Pince R.

(called
cuerp)

Thèse doct. sci. phys
Univ. Paul Sabatier
Toulouse. 1974. (gucerp)



50814.45215

TC, Ph, Ch

31603

 $Cu(CO)_5PH_3$

1975

3230

Jeanne C., Pince R., Poilblanc R.

Spectre vibrationnel et analyse en coordonnées normales des dérivés $M(CO)_5PH_3$

(M=Cr, Mo, W). "Spectrochim. acta", 1975,

A31, (819-838

N°7

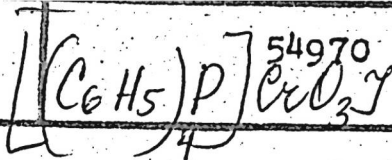
(франц., рез. англ.) 0433 пик

396 398

5.4.25

ВИНИТИ

70104.8831
Ch, TC



54970

1976

4-16112

Königer-Ahlborn E., Müller A.

Zur Existenz des CrO_3J^- -Ions.

"Z. Naturforsch.", 1976, 31 b, N 10,
1429-1430 (нем., росс. англ.)

0784

737 738

7.7.76

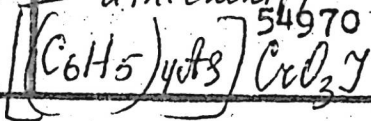
ВИНИТИ

70104.8831
Ch, TC

изв. сущей

54670

pgtb



X 4-16112

Königer-Ahlborn E., Müller A.

Zur Existenz des CrO_3J^- -Ions.

"Z. Naturforsch.", 1976, 31 b, N 10,
1429-1430 (нем., рез. англ.)

0784

737 738 7,20

ВИНИТИ

60409.7572

Ph, Ch, TC, MGU

4077120. С. И. К. И. Т. Р.

1976

[[C₂H₅)₄N]Ce(CO)₅Br]

*4-12256

Wrighton Mark S., Morse David L.,
 Gray Harry B., Ottesen David K. Interpretation of the electronic spectra of low-spin d⁶M(CO)₅X complexes. Primary excited state decay paths in Re(CO)₅X complexes. "J. Amer. Chem. Soc.", 1976, 98, N 5, 1111-1119 (АНГЛ.)

575 575

584

ВИНИТИ

Cr - C - N (изогнан. комплекс) 1977

сериф.
сб-ва

86:148130p An investigation of the photochemical and spectroscopic properties of chromium, molybdenum, tungsten, and rhodium isocyanide complexes. Mann, Kent Robert (California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). 1977. 214 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 77-3135. From Diss. Abstr. Int. B 1977, 37(8), 3947.

(3+)



Mo
W
Rh

изогнан. комплекс



C. A. 1977, 26 N 20

CrCN

1980

Лобов Б. В. и др.

(до л-сн)
Ис. прикл. спектроскопии,
1980, 32, №2, 197-201



См. ScCN i III

CuCW [number 10162] 1980.

Лобов Б.В., Терещенко А.

М.П.
(80)

Progress in Atomic
Absorption Spectrosc.,
1980 (перевод)

$C_5H_5Cr_2(CO)_2NO$ Immuck 12789 1981

помощник. Chen H.W., et al.,

чек

J. Electron. Spectrosc.
and Relat. Phenom. 1981,
24, 121-124.

$C_5H_5Cr(CO)_2NS$

[Ommuck 12789] 1981

гомомериз.
крем

Chen H.W., et al.,
J. Electron. Spectrosc.
and Relat. Phenom.
1981, 24, 121-124.

$(\eta^5-C_5N_5)Cr(NO)_2Cl$

1981

и др.

η, ε

5 Б146. Фотоэлектронные спектры и расчеты методом молекулярных орбиталей (η^5 -циклопентадиенил)-динитрозилгалогенхрома и -вольфрама. Morris-Sherwood Betty J., Kolthammer Brian W. S., Hall Michael B. Photoelectron spectra of and molecular orbital calculations on (η^5 -cyclopentadienyl)dinitrosylhalochromium and -tungsten. «Inorg. Chem.», 1981, 20, № 9, 2271—2276 (англ.)

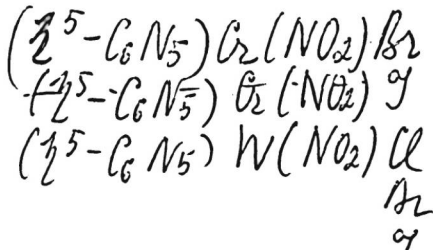
Измерены фотоэлектронные спектры комплексов $(\eta^5-C_5N_5)M(NO)_2X$, где $M=Cr$, $X=Cl$ (I), Br (II), I (III); $M=W$, $X=Cl$ (IV), Br (V), I (VI). Отнесение ионизац. полос (ИП) дано на основании эмпирич. критериев, качеств. аргументов простой теории МО и расчетов I методом МО в варианте Фенске—Холла. Первая ИП I—VI соответствует ионизации орбитали, отвечающей, гл. обр., неподеленной паре атома галогена, и расщеплена на две компоненты за счет спин-орбитального взаимодействия. Энергии компонент равны (эВ): I 8,17, 8,39; II 8,16, 8,41; III 7,86, 8,22; IV 8,03, 8,29; V 8,02, 8,34, VI 7,87, 8,24, Формально рассмотренные

⚡
(+5)

X. 1982, 19, № 5

комплексы обладают шестикоординированным атомом металла $M(O) d^6$, однако расчеты показывают, что электроны металла делокализованы на нитрозильные группы. Это подтверждается сходством ионизац. энергий I—III и изоэлектронных комплексов типа $(\eta^5-C_5H_5)Fe(CO)_2X$. Анализ ионизац. энергий связей $M-X$ показывает, что связи $W-X$ являются более прочны-

ми, чем связи $Cr-X$, что согласуется с различиями в реакц. способности этих комплексов. В. Фаустов



КТОВ
(I)



1982

) 6 Б25. Неэмпирические расчеты методом МО гексацианокомплексов. Ab initio MO calculations for hexacyano complexes. Sano Mitsuru, Kashiwagi Hiroshi, Yamatera Hideo. «Inorg. Chem.», 1982, 21, № 10, 3837—3841 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых функций рассчитано электронное строение комплексов $[M(CN)_6]^{3-}$ ($M = Cr, Mn, Fe$ и Co), а также $[Fe(CN)_6]^{4-}$. С использованием источника возбуждения Mg K α измерены основные рентгеноэлектронные спектры (РЭС) атомов Fe, C и N в исследованных комплексах, а также валентный РЭС соединения $K_4[Fe(CN)_6]$. Энергии ионизации основных уровней в комплексах были вычислены в рамках приближения Δ ССП. Распределение заряда в комплексах исследовано в рамках анализа заселенностей МО по Малликену, а также на основании рассчитанных карт электронной плотности. Механизм образования координац. связи обсужден в терминах взаимодействий между орбиталями атома металла и лигандов. Показано, что общие

р, струк.



X. 1983, 19, № 6

на 88

тенденции в изменении разностей энергий ионизации основных орбиталей атомов С и N в комплексах согласуются с результатами эксперим. исследований РЭС. На примере расчетов энергий ионизации валентных МО в $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ в приближении ДССП продемонстрировано нарушение теоремы Купменса для валентных МО. Анализ карт разности электронной плотности иона комплекса и невзаимодействующих ионов металла и цианида указывает на большую степень σ -донирования и обратного π -донирования в комплексе Co^{3+} по сравнению с комплексом Cr^{3+} . Наиболее ярко выраженное обратное π -донирование, согласно данным расчетов, следует ожидать в комплексе Fe^{2+} . И. А. Тополь

Тексацманокман. Cr (III) 1982

Zakharieva-Percheva
O., Dementiev V. A.

Vi, см. Ж. Mol. Struct., 1982, 90,
ноет. N3-4, Suppl.: „Theochem”,
I, N3-4, 241-248.

(см. Тексацманокман. Fe (II); III)

Cr-C-P комплексы 1983

Marquick D. S., Axe F. U.,
et al.

Равно-
весные
гипер-
связей.

Chem. Phys. Lett., 1983,
99, N5-6, 406-410.

(сер. Fe-C-N-комплексы; III)

$\text{Cr}(\text{NH}_2)_2$

1983

Ziegler Tom.

теор.
расчёты

J. Am. Chem. Soc. 1983,
105 (26), 7843-9.

( $\text{Cr} \cdot \text{Mo H}_3$; III)

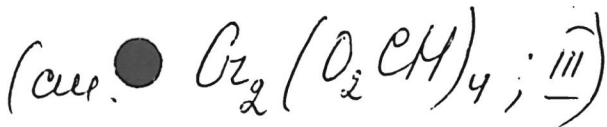


1985

Kok R. A., Hall M. B.

Электронное
строение,
теор.
расчёт.

Inorg. Chem., 1985,
24, N 10, 1542-1546.



$(CF_3NC)Cr(CO)_5$ (Am. 21803) 1985

22 Б1103. Структура пентакарбонил(трифторметилизоцианид)хрома $(CF_3NC)Cr(CO)_5$ в газовой фазе. Gas-phase structure of pentacarbonyl(trifluoromethyl isocyanide)chromium, $(CF_3NC)Cr(CO)_5$. Oberhammer H., Lentz D. «Inorg. Chem.», 1985, 24, № 8, 1271—1273 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура пентакарбонил(трифторметилизоцианид)хрома, $(CF_3NC)Cr(CO)_5$. Установлено, что группа CF_3NC имеет изогнутую форму, а структура группы $Cr(CO)_5$ несколько отличается от октаэдра, возможно, за счет движения большой амплитуды. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов: $C=O$ 1,140(3), $C=N$ 1,220(16), $C-F$ 1,338(11), $N-C$ 1,40(3), $(Cr-C)_{ср}$ 1,918(3), $\angle FCF$ 108,2(1,1)°, $\angle C_6NC_7$ 142(4)°, $\angle C_1C_2C_3$ 87,2(1,4)°.

В. П. Спиридонов

геометрия,
структура

X. 1985, 19, N 22

$(CF_3NC)Cr(CO)_5$ (Dm. 2180.3) 1985

102: 138086p Gas-phase structure of pentacarbonyl(trifluoromethyl isocyanide)chromium, $(CF_3NC)Cr(CO)_5$. Oberhammer, Heinz; Lentz, Dieter (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Tuebingen, 7400 Tuebingen, Fed. Rep. Ger.). *Inorg. Chem.* 1985, 24(8), 1271-3 (Eng). The gas phase structure was detd. of $(CF_3NC)Cr(CO)_5$ by electron diffraction. The bending of the isocyanate group ($CNC = 142 \pm 4^\circ$) and lengthening of the C:N bond in the complex (1.220 (16) vs. 1.171 (3) Å in the free mol.) indicate strong π acceptor ability of trifluoromethyl isocyanide.

сгруппы,
из. некомплекс.

C.A. 1985, 102, N 16.

$\text{Cr}(\text{CN})_6^{3-}$

1986

Calc. NCM,
Di;

/ 104: 98253y Full normal coordinate analysis and molecular dynamic parameters for the hexacyanochromate (3-) ion. Acevedo, R.; Diaz, G. (Fac. Cienc. Fis. Mat., Univ. Chile, Santiago, Chile). *Spectrosc. Lett.* 1986, 19(1), 73-88. (Eng). A full normal coordinate anal. for the $\text{Cr}(\text{CN})_6^{3-}$ ion, in O_h symmetry, was carried out on the basis of new exptl. data, using 3 different force fields. Consistent sets of force consts. were obtained and utilized to evaluate mean amplitudes of vibration, perpendicular amplitude correction coeffs., and shrinkage effects. The capability of the force fields to reproduce the obsd. vibrational frequencies is discussed.

C.A. 1986, 104, N12



1988

Deeth R. J., Figgis
B. N. et al.

u. n. Chem. Phys., 1988, 121,
N1, 115-130.

(see CoCl_4^{2-} ; III)

RCN

[30353]

1988

Краснов К.С.,
Филиппенко М.В.,

ОНИИТЭХИМ.

Деп. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

д.р.

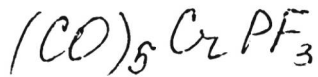
(обзор)

^{полимер}
 $\text{C}_2(\text{OH})_2(\text{CN})_2$ Лутаяская В. Д. 1988

Электронное строение
и электрон. спектры
димеров переходных
элементов.
Электрон-
структура;
теор. расчет

Автореферат диссер-
тации на соискание
учёной степени К. Х. Н.,

Mocker, 1988.



1989

Kotzian Manfred,
Roesch Wolker, et al.

некруп

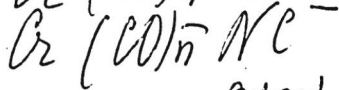
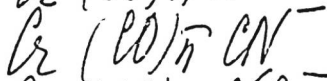
J. Am. Chem. Soc., 1989,
111(20), 7687-96

(Cr. $\text{Cr}(\text{CO})_6$, III)



(OM 37 955)

1995



Dapprich S., Piduen U.

~~Prasad~~ et al.,

De,

meep.

patem

Chem.

1995,

Phys. Lett.,

242,

521-526.



Li (CD)_n N₂

(OM. 37955)

1995

De,
neop.
pavem

Dapprich S., Pichler U.,
et al.,

Chem. Phys. Lett.
1995, 242.

521-526

Cr(CN)₆

?

1998

comp-pa,
di, clu.
no cm.

128: 94759r Density Functional Study of the Vibrational Spectra of Octahedral Transition-Metal Hexacarbonyls: Neutral Molecules (M = Cr, Mo, W) and Isoelectronic Ions (M = V, Nb, Ta; M = Mn, Re; M = Fe, Ru, Os; M = Co, Rh, Ir; M = Pt; M = Au). Jonas, Volker; Thiel, Walter (Organisch-Chemisches Institut, Universitaet Zuerich, CH-8057 Zurich, Switz.). *Organometallics* 1998, 17(3), 353-360 (Eng), American Chemical Society. The geometries, harmonic force fields, and charge distributions of the title compds. have been calcd. at the level of gradient-cor. d. functional theory (DFT) using effective core potential wave functions in conjunction with polarized double- and triple- ζ basis sets. The DFT results are in very good agreement with the available exptl. data for both the neutral and ionic systems. Theor. predictions are made for highly charged hexacarbonyl cations that are as yet unknown (M = Co, Rh, Pt, Au) to facilitate their spectroscopic detection. Trends in the computational results are discussed in terms of bonding models and electrostatic effects, emphasizing the variation of the calcd. properties with the total charge of the hexacarbonyls.

Mo(CN)₆, W(CN)₆, ujoia. uoia V(CN)₆

C.A. 1998, 128, N8

?

$C_2(CO)_6-n(N_2)_n$ [Om. 40885]

2001

($n=0-6$)

David L. Ledezno, Eric Weitz^{*}
et al.,

J. Phys. Chem., 2001, A105,
3773-87.

Bond Energies and Bonding

Interactions in $\text{Fe}(\text{CO})_{5-n}(\text{N}_2)_n$
($n=0-5$) and $\text{Os}(\text{CO})_{6-n}(\text{N}_2)_n$
($n=0-6$) complexes; Density
Functional Theory Calculations
and Comparisons to Experimental Data.