

Gr-C-H

VI-5610 1967

Vi(Cr(OMe)₂, Co(OMe)₂,
Ni(OMe)₂, Fe(OMe)₂, Zn(OMe)₂,
Mg(OM₂)₂, Cu(OMe)₂, Me=CH₃.

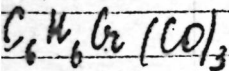
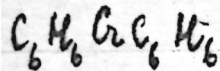
Adams R.W., Martin R.L., Winter G.

Austral J.Chem., 1967, 20, N4, 773-74.

Possible ligand field effects in metal-oxygen
vibrations of some first-row transition
metal alkoxides.

RX., 1968, 7 135 J

1967



(2)

10 Б96. Масс-спектры и потенциал ионизации $\text{C}_6\text{H}_6\text{CrC}_6\text{H}_6$ и $\text{C}_6\text{H}_6\text{Cr}(\text{CO})_3$. Pignataro S., Lossing F., P. Mass spectra and ionization potentials of $\text{C}_6\text{H}_6\text{CrC}_6\text{H}_6$ and $\text{C}_6\text{H}_6\text{Cr}(\text{CO})_3$. «J. Organometallic Chem.», 1967, 10, № 3, 531—534 (англ.)

Потенциалы ионизации $(\text{C}_6\text{H}_6)_2\text{Cr}$ ($5,7 \pm 0,1$ эв) и $\text{C}_6\text{H}_6\text{Cr}(\text{CO})_3$ ($7,39 \pm 0,1$ эв) определены полулогарифмич. методом. Приведены также потенциалы появления (ПП) арильных аннионов (АА) из сендвичевых соединений (СС). Перечисляются $\text{CC} \rightarrow \text{AA}^+$, ПП для АА, кажущаяся энергия диссоциации ионной связи в ккал/моль: $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Fe} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_5\text{Fe}^+$, $12,8 \pm 1$ эв, 134 ± 25 ; $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Ni} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_5\text{Ni}^+$, $11,9 \pm 1$, 119 ± 25 ; $(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Co} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_5\text{Co}^+$, $12,3 \pm 1$, 146 ± 25 ; $(\text{C}_6\text{H}_6)_2\text{Cr} \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6\text{Cr}^+$, $9,2 \pm 0,2$, 81 ± 8 ; $\text{C}_5\text{H}_5\text{Co}(\text{CO})_2 \rightarrow \text{C}_5\text{H}_5\text{Co}^+$, $10,8 \pm 0,2$, —; $\text{C}_6\text{H}_6\text{Cr}(\text{CO})_3 \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6\text{Cr}^+$, $10,8 \pm 0,2$, —. Ю. В. Денисов

X.1968.10

$\text{No}(\text{Cr}^+ - \text{CH}_2)$

1981

Armentrout P B.,
et al.

J. Am. Chem. Soc. 1981,
103 (21), 6501 - 6502.

$\text{Do}(\text{Cr}^+-\text{CH}_3)$

1981

Armentrout P. B.,
et al.

J. Am. Chem. Soc. 1981,
103(21), 6501-6502.

$\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2$

1981

Fisahnick G. J., et al.

сложно-
ионная
компла-
кс

J. Chem. Phys.,
1981, 75, N 11, 5215-
- 5225.

(ср. $\text{Cr}(\text{CO})_6$; III)



1982

Corrêa Mello

Paulo, et al.

расчет

и.и.,

E

J. Amer. Chem. Soc.,
1982, 104, NS, 1440-
● -1442.

(see $\text{Cr}_2\text{Cl}_8^{4-}$; iii)

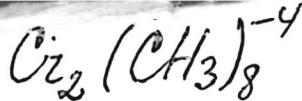
CrCH_2^+

Orimleck 15807

1982

патент.
не менее

Vincent M. A., Yoshiko-
ka Y., et al.,
J. Phys. Chem., 1982,
86, No 20; 3905-3906.



1983

Correa de Mello Paulo,
Edwards W. Daniel, et al.

meop.
paeriu

Int J. Quantum Chem.
1983, 23(2), 425-36.

Cr-Cr ch83u



Cr-C-H комплексы

1983

Marznick D.S., Ahe F.U.,
et al.

Равно-
весные
глицеро-
связей:

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

(ср. Fe-C-N-комплексы; III)



1983



Ziegler Tom.

расчёт
количеств,
структ.,
м.п., Do;

J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N26, 7543-
-7549.

● (ср. CrH_3 ; III)



от. 19465 1984

23 Б1034. Хромметиленовый катион, CrCH_2^+ . The chromium methylydene cation: CrCH_2^+ . Carter Emily A., Goddard William A. «J. Phys. Chem.», 1984, 88, № 8, 1485—1490 (англ.)

Обобщенным методом валентных связей с учетом конфигурац. взаимодействия в базисе валентно-двух-экспонентного типа Cr ($10s8p5d/5s4p2d$), C ($9s5p/3s2p$) и H ($4s/2s$) выполнены расчеты геометрии, электронного строения и колебат. частот катиона CrCH_2^+ в основном 4B_1 и возбужденном 6B_1 состояниях. Найдено, что в основном состоянии 4B_1 связь между Cr^+ и CH_2 образуется вследствие спаривания свободных σ - и π -электронов фрагментов и может рассматриваться как двойная. σ -Компонента этой связи содержит значит. вклад $4s, p$ -АО Cr (47%). Рассчитанные длина R связи Cr—C, ее энергия E и частота вал. кол. ν равны 1,91 Å; 44,0 (48,6) ккал/моль, 542 cm^{-1} , эксперим.

расчет V_i ,
геометр.,
структурн

X. 1984, 19, № 23

$E=65\pm 7$, в скобках дано экстраполированное значение E с учетом разности экспериментальной и рассчитанной в аналогичных приближениях энергии связи $C\equiv C$ в этилене. Высокоспиновое состояние 6B_1 образуется вследствие распаривания π -электронов связи $Cr-C$ и имеет следующие R , E и ν : 2,07 Å, 25,0 ккал/моль, 495 cm^{-1} . Подробно проанализирована хим. связь и влияние обменных взаимодействий K_{dd} и K_{sd} на характер гибридизации и природу основного состояния. А. Багатурьянц

LiCH^+

Com. 22170 /

1985

LiCH_2^+

Alvarado-Swaisgood A.E.,
Allison J., et al,

LiCH_3^+

Электро-
структура,
спект.

J. Phys. Chem., 1985, 89,
N 12, 2517-2525.

CrCH_2^+

1986

7 Л222. Электронные состояния карбеновых ионов хрома исследованные [методом] спектроскопии потерь трансляционной энергии с высоким разрешением. Electronic states of chromium carbene ions characterized by high-resolution translational energy loss spectroscopy. Hanratty M. A., Carter E. A., Beauchamp J. L., Goddard III W. A., Illies A. J., Bowers M. T. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 4, 239—242 (англ.)

Методом спектроскопии потерь трансляционной энергии ионов хрома с высоким разрешением исследована электронная структура карбенового иона хрома CrCH_2^+ (I). Результаты использованы для устранения неопределенности в неэмпирич. расчетах I. Характерная структура при 1,05 эВ в спектре потерь отнесена переходу из основного состояния 4B_1 в состояния 6B_1 либо 6A_1 , которые согласно расчетным данным лежат соответственно на 0,78 и 0,82 эВ выше основного состояния. Подчеркнута перспективность спектроскопии потерь для исследования каталитически важных металлорганич. соединений.

Е. П. Смирнов

(М.П.)

Ф. 1986, 18, № 7.

Gr CH₂⁺

1986

Harratty M.A., Carter E.
et al.,

fn. comm.,
meop.
pamem

Chem. Phys. Lett. 1986,
123(4), 239-42.

CA-1986, 104, N16, 136338Q

LiCH^+

(DM. 24213)

1986

Mavridis A., Alvarado-

Зеленков. Swaisgood A. E.,

Суряков,

Уолленберг,

ab initio

расчет,

потенци-

кривая

Harrison J. F.

J. Phys. Chem., 1986,

90, ● 2584 - 2588.

(см. ScCH^+ ; III)

$\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2$ Hall H.B., 1987
Williamson R.L.
Abstr. Pap., 194th ACS
reunions Nat. Meet. (Amer. Chem.
society Soc.); New Orleans, La.,
Aug. 30-Sept. 4, 1987 -
Washington, D.C., 1987/-C.
679-680. (cr. $\text{Cr}(\text{CO})_6$; III)

C_2CH_3^+

(OM. 27788)

1987

Schilling J. B., Goddard
W. A. III, et al.,

meopem.
porcem.

J. Amer. Chem. Soc.,
1987, 109, N19, 5573-



-5580.

C_2CH_3^+

(DM. 30546)

1988

C_2CH_2^+

Alvarado-Swaisgood A. E.,

C_2CH^+

Harrison J. F.,

ab initio
parcram
cmpykm.,
I Meprern.

J. Mol. Struct. (Theo-
chem) 1988, 169, 155-
-165.

Cr CH_2^+

(Om. 30807)

1988

Cr CH_3^+ Georgiadis R., Armentrout
P. B.,

J. Phys. Chem. 1988, 92,
N 25, 7067-7074.

Translational and Electronic
Energy Dependence of Chromium

Ion Reactions With Methane.



C_2H_3

C_2H_3^+

[om. 32942]

1989

Bauschlicher Ch. W (Jr),
Langhoff S. R., et al.,

all. n.,

meop.

pacrem

J. Chem. Phys., 1989,

91, N4, 2399-2411.

C_2CH_n^+ | Am. 32 237 | 1989

$n = 1 \div 3$

Georgiadis R.,
Armentrout P.B.,

Исправлен
чек

Int. J. Mass Spectrom
and Ion Processes,
1989, 89, 112-3, 227-247

CrCH_2^+

(OM 32428)

1989

Takahara Y., Yamaguchi K.,
et al.,

потенц.
кривые,
кв. мех.
расчет.

Chem. Phys. Lett., 1989,
158, N 1-2, 95-101.

$\text{Cr}(\text{CO})_6$

1991

№ 16 Б1232. Инфракрасная диодная лазерная спектроскопия охлажденных в струе гексакарбониллов хрома, молибдена и вольфрама. Diode laser infrared spectroscopy of jet-cooled hexacarbonyls of chromium, molybdenum, and tungsten / Burie Jean-René, Davies Paul B., Hansford Graeme M., Martin Nicholas A. // Mol. Phys. — 1991. — 74, № 4. — С. 919—922. — Англ.

Впервые, за счет сочетания метода диодной лазерной спектроскопии и процедуры охлаждения молекул в сверхзвуковой струе инертных газов, удалось разрешить вращат. структуру колебат. спектров поглощения гексакарбониллов хрома, молибдена и вольфрама в области полосы колебания $\nu_6(\text{C}-\text{O})$. Выполнен анализ вращат. структуры. Положения начала полосы, максимума Q-ветви и значения вращат. постоянных B_0 и B_6 (в см^{-1}): $\text{Cr}(\text{CO})_6$ — 2002,940; 2002,943; $2,185 \cdot 10^{-2}$; 2,186. $\cdot 10^{-2}$; $\text{Mo}(\text{CO})_6$ — 2005,497; 2005,484; $1,942 \cdot 10^{-2}$; 1,940. $\cdot 10^{-2}$; $\text{W}(\text{CO})_6$ — 2000,362; 2000,363; $1,998 \cdot 10^{-2}$; 2,000. $\cdot 10^{-2}$. Сравнение со спектрами измеренными ранее с бо-

М.П.

17 (72)

Х. 1992, № 16

лее низким разрешением и при комн. т-ре показывает, что центры полос в полученных авторами спектрах лежат на $\sim 2,5 \text{ см}^{-1}$ в более высокочастотной области. Найденные значения вращат. постоянных хорошо согласуются с рассчитанными на базе электронографич. данных. Результаты сопоставлены с данными по молекуле $\text{Ni}(\text{CO})_4$, исследовавшейся авторами ранее по аналогичной методике. В. М. Ковба



RCH_2^+

[CM. 37225]

1992

Baeschliker Ch. W., Jr;
Partridge H.

(De)

J. Chem. Phys., 1992, 97(10),

7471 - 7473.

CrCH_2^+

1992

Curdari T. R.,
Gordon M. S.

meopem.
pacem

J. Phys. Chem. 1992. 96,
N2. c. 631-636.

(cur. ● ScSiH_2^+ ; III)

Gr CH₃

Kang S.K., Tang H., et al., 1993

J. Amer. Chem. Soc., 1993, 115,

M.N. N5, C-1971-1981

P.N.X. N4, 1994,

45-1055



1995

Holtzhausen M.C.,
Mohr M. et al.

мел.
распрем.
спектрел
св. 3.4.

Chem. Phys. Lett. 1995,
240(4), 245-52.



Gr Mc6

1996

Gillespie, Ronald J.
et al.,

meepem
pacem
cmp- μ
u
Hepneru

Inorg. Chem., 1996, 35(3),
3954-63

(all.

$\text{VF}_5; \text{III}$)