

Ref 7

ReF₇

ВФ-VII-1083

1968

3 Д259. Колебательные спектры ReF₇. Claassen Howard H., Selig Henry. Vibrational spectra of ReF₇. «J. Chem. Phys.», 1965, 43, № 1, 103—105 (англ.)

Получены ИК-спектры ReF₇ в парообразном состоянии и спектры комб. рас. в жидком. Найдено, что молекула ReF₇ принадлежит к группе симметрии D_{5h} . Наблюдены пять активных в комб. рас. основных колебаний: 351, 485, 590, 650 и 737 см^{-1} . Из пяти предполагаемых основных колебаний, активных в ИК-области, наблюдались три: 299, 353 и 703 см^{-1} .

4. 1966. ЗН

B90-VII-1083

1965

ReF₇
Cuekpp

Vibrational spectra of ReF₇. Howard H. Claassen and Henry Selig (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). ~~J. Chem. Phys.~~ **43**(1), 103-5(1965)(Eng). The ir spectrum of ReF₇ vapor and the Raman spectrum of liquid ReF₇ suggest that this mol., like IF₇, belongs to symmetry group D_{5h} . The 5 expected Raman-active fundamentals were observed at 351, 485, 590, 650, and 737 cm.⁻¹. Of the 5 expected ir-active fundamentals, 3 were observed at 299, 353, and 703 cm.⁻¹. RCJQ

C.A. 1965-63.3
2533e

Re F₇

VII-2485

268

8 Д290. Колебательные спектры JF₇ и ReF₇. Claassen Howard H., Gasner Earl L., Setig Henry. Vibrational spectra of JF₇ and ReF₇. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 4, 1803—1807 (англ.)

J_i

Исследованы спектры комб. рас., а также ИК-спектры JF₇ и ReF₇ в парообразном состоянии. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что обе молекулы принадлежат к группе симметрии D_{5h}. Библ. 23. Резюме

оп. 1969. 8A

(см. JF₇) III

ReF₇
7

Электро-
фтор. исслед.

4 Б124. Электронографическое исследование фторидов рения. II. Структура, псевдовращение и ангармоническое взаимодействие колебаний различных типов симметрии в ReF₇. Jacob E., Jean, Bartell L. S. Electron diffraction study of rhenium fluorides. II. Structure, pseudorotation, and anharmonic coupling of modes in ReF₇. «J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 6, 2235—2242 (англ.)

Электронографическим методом в газовой фазе изучена молекула ReF₇. Найдены значимые отклонения от структуры пентагональной бипирамиды симметрии D_{5h} . Предложено два варианта интерпретации полученных эксперим. данных. В первом варианте молекула статически искажена до симметрии C_2 или C_s , причем пять атомов фтора в пятичленном кольце совершают колебания, перпендикулярные экваториальной плоскости бипирамиды (максим. отклонение от плоскости $\approx 9^\circ$) в такой фазе, что цикл в целом совершает пульсирующее псевдо-

1970

4565-49

111-158

1971-158

X. 1971. 4

вращение относительно полярной оси бипирамиды. Полярные атомы фтора прецессируют вокруг полярной оси (угол отклонения от оси $\approx 8^\circ$) в фазе, к-рая обеспечивает максим. избегание атомов фтора на координат. сфере атома рения. Другой вариант интерпретации заключается в динамич. псевдовращении молекулы, при к-ром колебательные смещения атомов переводят молекулу из конфигурации симметрии C_2 в конфигурацию симметрии C_s и вновь в конфигурацию симметрии C_2 с небольшим барьером перехода между ними. Между фазами колебаний типов симметрии e_1' (деформация оси) и e_2'' (псевдовращение цикла) имеется взаимодействие благодаря кубич. члену $S^2(e_2'') S(e_1')$ в функции потенциальной энергии. Это приводит к кажущемуся «ангармоническому сокращению» пика кривой радиального распределения, соотв-щему расстоянию между аксиальным и экваториальным атомами фтора. Найденное значение среднего расстояния $\text{Re}-\text{F}$ равно $1,835 \pm 0,005$ А, причем экваториальная связь длиннее полярной на $0,065 \pm 0,02$ А. Сообщ. I см. пред. реферат. В. Спиридонов

ReF₇

BFJ-VII-4944

1970

22464n) Electron diffraction study of rhenium fluorides. 11. Structure, pseudorotation, and anharmonic coupling of modes in rhenium heptafluoride. Jacob, E. Jean; Bartell, Lawrence S. (Dep. of Chem., Univ. of Michigan, Ann Arbor, Mich.). *J. Chem. Phys.* 1970, 53(6), 2235-42 (Eng). Significant departures from D_{5h} symmetry are indicated by the gas-phase electron diffraction data for ReF₇. Obsd. scattered intensities, cor. for heavy-atom effects, are adequately represented by structures with static deformations of either C_2 or C_s symmetry of the following character. A puckering of the ring of 5 F (max. out-of-plane displacement $\approx 9^\circ$) is accompanied by a movement of each axial F from the ref. axis of $\approx 8^\circ$ in the direction which provides max. avoidance of F on the Re coordination sphere. Equally compatible with the data is the much more reasonable dynamic pseudorotation model in which vibrational displacements carry the mol. from C_2 to C_s to C_2 configurations. The

снелет.
ношен.

C. A. 1970 23.18

tenfold character of the hindering potential and modest displacements preclude an appreciable barrier. A pronounced skewing of the envelope of axial-equatorial, $F_a F_e$, distances reveals a coupling in phase of the e_1' axial bend to the e_2'' ring puckering vibration through the $S^2(e_2'')\bar{S}(e_1')$ cubic term in the potential-energy function. The skewing, which moves the max. of the $F_a F_e$ distribution peak inside the distribution center of gravity, results in an apparent "anharmonic shrinkage" of the nonbonded peak by an amt. exceeding the "Bastiansen-Morino" harmonic shrinkage. The equatorial pseudorotation problem closely resembles that for cyclopentane in reduced mass, in displace-

ment, and therefore, presumably, in frequency. The structure itself may be understood in terms of bond-bond repulsions thrusting the equatorial atoms out of plane; the out-of-plane displacement, in turn, induces an axial bend. The actual structure, however, exhibits too large an axial bend to conform to the simple repelling points-on-a-sphere model of Gillespie and too small a deviation from D_{SA} to correspond to the close packing of hard atoms around the Re. RCIO

Ref₆

BP-VII-6432

1970

Ref₇

XeOF₄

38517f Studies of xenon oxide tetrafluoride, rhenium hexafluoride, and rhenium heptafluoride by electron diffraction. Jacob, E. Jean (Univ. Michigan, Ann Arbor, Mich.). 1969, 88 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 70-21,689. From *Diss. Abstr. Int. B* 1970, 31(5), 2604.

(См. также
исследования.)

Электронная дифракция.

Рентген

С. 4. 1972. 76.8

1970

Ref

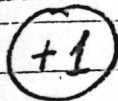
7

1 Д321. Полярные искажения в молекулах ReF_7 и JF_7 .
Kaiser E. W., Muentner J. S., Klemperer W.,
Falconer W. E. Polar distortions in ReF_7 and IF_7 .
«J. Chem. Phys.», 1970, 53, № 1, 53—55 (англ.)

С целью обнаружения дипольного момента молекул ReF_7 и JF_7 исследовалось их отклонение в неоднородных (квадрупольных) электрич. полях в зависимости от т-ры паров в источнике пучка. Использовалась типичная установка, применяемая в экспериментах по электрич. резонансу в молекулярных пучках, без резонансной полости. Установленная на оси пучка проволочка полностью его перекрывала, и только молекулы, проявляющие положительный эффект, двигаясь по криволинейным траекториям, достигали детектора. Из-за фона минимально регистри-

дип.
момент

09. 1977. 12



руемый дипольный момент не превышал 10^{-2} ед. Дебая. С уменьшением т-ры от 298 до 210° K (ReF_7) и до 153° K (JF_7) наблюдалось сильное увеличение фокусировки пучка ReF_7 и более слабое JF_7 . Это позволяет отнести исследованные молекулы к классу нежестких, что также подтверждается спектроскопич. данными. Практически полное отсутствие полярных молекул в пучке при комнатной т-ре, обусловленное, по-видимому, искажением полярной структуры за счет колебаний на верхних уровнях, аналогично поведению молекул типа NH_3 , у которых только верхняя пара уровней инверсионного дублета проявляет положит. штарк-эффект.

Ю. Н. Беляев

IF₇, ReF₇, UF₇³⁻, UO₂F₅³⁻ (even no. cm.) 1971

Wendling E., Mahmoudi S., Cerf C.,
Spectrosc. Lett., 1971, 4, N9, 297-302

G-, F-, and Σ -matrices for
XY₅Z₂ molecules of D_{5h} symmet.
(anal.)
xy.

10



CA, 1972, 76, N6, 29220B

1972

ReF₇

-) 119320p Molecular constants of rhenium heptafluoride (ReF₇) molecule. Bhavsar, G. P.; Sathianandan, K. (Dep. Phys., Poona Univ., Poona, India). *Curr. Sci.* 1972, 41(5), 173-4 (Eng). The equatorial and axial Re-F stretching force consts. for the ReF₇ mol. are 4.0 and 4.56 millidynes/Å, resp. The results are detd. from a vibrational anal. of the ReF₇ mol. by using the Wilson F-G matrix method and a set of potential energy consts. The mode which is inactive in both Raman and ir spectra is 398 cm⁻¹. The thermodynamic quantities for different temps. were calcd. for a harmonic oscillator approxn.

v;

cur. n.

m. eq.

C.A. 1972. 76. 20

1972

Ref 7

20 Б85. Анализ нормальных координат гептафторида рения. Применение метода логарифмических шагов. Wendling Edgar, Mahmoudi Saâd. Analyse en coordonnées normales de l'heptafluorure de rhénium. Application de la méthode des pas logarithmiques. «Rev. chim. minér.», 1972, 9, № 2, 291—308 (франц.; рез. англ.)

Из частот колебаний и структурных параметров методом логарифмич. шагов вычислены силовые постоянные и средние амплитуды колебаний молекулы ReF_7 (точечная группа D_{5h}). Вычислены также термодинамич. функции. Проведен полный анализ колебательного спектра ReF_7 , исправлено отнесение основных частот и дано новое отнесение обертонов и комбинированных тонов.

М. Р. Алиев

М. П.
т. 00.
7

X. 1972. 20

1976

Re F₇

Burgess J, et al.

(vi)

J. Chem. Soc., Dalton Trans,
1976, (14), 1363-4.

(all Re F₇,) I

Re F₇.

1978

Mohan S.

Vi; ced.
nocur.

Acta. Cienc. Indica 1978,
4(1), 31-5 (Eng.)

ed. YF₇ - III

Ref₇

1978

Mohan S.

curr.m.

Acta Cienc. Indica, 1978, 4(3),
264-8.

(curr. JF₇; III)