Галоненды
щелочных
металлов

No.		
Year	Day	FRANK M
		Trans. Fahrday Sep 1925
	0	21, 326

1935

No K, Rb, Cs
II gr. III

+ II

энергия
дис-ии

Бутков К

Acta Physicochimica URSS,
1935, 3, №2-3, 205-218

Молекулярные спектры
галогенидов щелочных

I (отд. ИГ)

1936

Roderbush H., Minnay L.,
Butler M.
J. Chem. Phys., 1936, 4, 372

диэлектрич. пост. галоидов) [Автори, основываясь на изм. диэл. постоянных галоидов калия, вычислили средние расстояния между ионами в парах]

[обз. МП]

1937

Manneff J.R., Hendricks J.B.,
Mosley V.M.

экспо-
нирован
ный!
исп.

Magnetic, Temperature,
Moment.

Phys. Rev., 1937, 52, 968

Приемы к выводу обстоятельств в теориях ассоциированных молекул

1 (авт. ИС)

1948

Ионов М.И.

ДАН СССР, 1948, 59, №3, 467

диссоц.
паров

[Автор показал с помощью масс-спектрометра, что испарение через. галогенидов происходит с учётом молекул MX, M_2X и M_2X_2]

I (общ. МГ)

Щелочные металлы ВФ-3389-Х 1950

Галлоидные соли. Дукельский В.М.
Занедберг Э.Я.
Иоков Н.И.
Ж. Эксперим. и теорет. физики, 1950, 20 вып 10
877-86

Отрицат. ионы в газ. разрядах в парах...

Риттер 1951

УF
нор

Ritter E.

J. Chim. Phys.,
1951, 19, 1030

$E_{(eV)} = 4,13$ э.в.

Энергии связи и
дипольные моменты
молекул галогенидов
щелочей

1951

Перевод. E. S. Rittner.

Binding Energy and Dipole Moment of Alkali Halide Molecules.

E. S. R. JChPh 19, 8, 1030, 1951.

KF

NaF

KF

RbF

RbCl

RbBr

RbJ

CsCl

CsF

CsJ

пл. №1

1-15-45-1

пр-623

Barnes R., Cantt D.

1953

Proc. Roy. Soc. L. A219, 120

У-ть полосы поглощения некот. галогенидов щел. мет. и энергия диссоц. фотона

Глазнер

Глазнер, Томпкинс | 1953

Li и др.

Glasner A., Tompkins F.C.
J. Chem. Phys.,
1953, 21, 1817-18

[Теплоты ионизации щелочных галогенидов]

we
ze
галогенидов
щелочн.
металлов.

Honig A., Mandel M.,
Stitch M., Townes C.
Phys. Rev. 96, N3, 629

1954

ОТТИСК А-275

Микроволн. спектр галогенидов
щелочных металлов.

См. на обороте

+17

Ve-1

14.81

	We	Wefe	Ye	Re
$Li^{7}Br^{79}$	(480)	(1,7)	30,340	2,1704
$Li^{7}J$	450	1,5	38,048	2,3919
NaCl	380	1,0	77,333	2,3602
$NaBr^{79}$	315	0,15	111,486	2,5621
NaJ	286	0,75	143,138	2,7415
KF	405	1,45		2,55
KCl^{35}	305	0,9	131,089	2,6669
KBr	230	0,7	203,437	2,8207
KJ	200	0,5	274,009	3,0478
RbF	390	1,3		
RbCl	270	0,7	192,4977	2,7[illegible]
RbBr	181	0,35	354,800	2,9448
RbJ	147	0,25	513,588	3,1709
CsF	385	1,23	91,460	2,3453
CsCl	240	0,6	233,9118	2,9062
CsBr	174	0,3	467,5039	3,8729
CsJ	121	0,2	713,6686	3,3150

Газообразные димеры щелочных металлов

1955

C. T. O'Konski, W. T. Miyamoto

J. Ch. Ph., 23, 1175 (L.)

Структура и расчет энергии связи газообразных димеров щелочных галогенидов.

Щелочное (отпуск А-474) 1956

галогенидов Beckel C. L.

(до) J. Chem. Phys.
1956, 24 N 4

923-4

1956

Гр
чел.
шол.

Morris D.F.C., [Morris]

Acta Cryst., 1956, 9, 197

Энергия решеток щелочных галогенов.

I (общ. ИР)

Х-322 1956-1957

~~6736~~ Состав пара

RbCl, KCl, KJ, NaCl, NaJ (энергия диссоциации)

NaF, LiCl, LiBr (энергия ионизации)

Miller R.C., Kusch P.
J.Chem.Phys., 1956, 25, N 5,
860-876
(Errata) 1957, 27, N 4, 981
Molecular composition ...

(см. исп. газы. I)

M, Be, J

1956

Гр.-
исп.

Pauling
Proc. Nat. Acad. Sci India
напр. A, 1956, 26, 1

[Магнитная исп. молекул как ответная реакция поперечно-полосатых мышц]

I (общ. ИГ)

1956

галоиды
щел. металлов

Saksena B.D. Pant L.M.

Z für Physik 1956, 146, 205

спектроскопия

Катодно-люминесцентный спектр галоидов щелочных металлов

Межатомные расстояния в галоидах щелочных элементов.

Изучен катодно-люминесц. спектр 14 щел. металлов и нек-рых смешанных кристаллов NaCl и KCl. Спектр дает широкие бесструкту-

ные полосы. В 10 галоидах возможно найти сильные полосы, чем peak position shifts towards longer wavelengths as the ~~внутр~~ межат. расстояние (interatomic) увеличивается

Выдержка из таблицы/взяты только межат d

	LiCl	LiBr	NaCl	NaBr	KF	KCl	KBr	KJ	RbF	RbCl
d	2,57	2,75	2,81	2,98	2,67	3,14	3,29	3,53	2,82	3,27

R. S. Berry

J. Chem. Phys. 27 n 6, 1288

1957

Предложена полуэмпирич. ф-ла с движением ф-ла в мол-лах ламбен. грун. мет.

LiCl
LiF
и др.

Красов К.С. 1957

Ж. общ. химии 1957, 2, №8, 1725

На химфак нет.

К вопросу о межатомном расстоянии в моно-х кристаллах галогенидов.

$r_{LiCl} = 2{,}021 A^0$ $r_{NaCl} = 1{,}877$

$r_{LiF} = 1{,}510$ $r_{KF} = 2{,}142$

$r_{RbF} = 2{,}251$.

отношение $\left[\frac{\beta_{J-Br}}{\beta_{Br-Cl}}\right]$ разности радиусов ионов иода и брома к разности радиусов хлора и брома сохраняет пост. значение для всех щелоч. метал.

На основании этого найдено

$$r(LiCl) = 2{,}0216\ \text{Å}$$

В предположении, что $\frac{\beta_{Cl-F}}{\beta_{J-Br}}$ сохраняет такое же постоянство как и выше указанное соотношение вычислим след знач. re

LiCl	LiF	NaF	KF	RbF	
2.021	1.510	1.877	2.142	2.251	
2.022	1.527	1.840	2.129	2.246	→ расчет Нонда

R.S. Krishnan, P.S. Narayanan (1957)

J. Indian Inst. Sci A39, N2, 85-92

Раман-спектры галогенидов щелочных металлов.

PA 62, N783
205.

1957.

теплот. обр. и перит диссоц.

Miller R.C., Kusch P. J. Chem. Phys., 1957, 27, 981.

Молекулярный состав паров щелочных металлов (J. Chem. Phys., 1956, 25, 960).

диссоц. паров

I (отд. МР)

галогениды щел. металлов

Rice S. A., Klemperer W.

1957
263

J. Chem. Phys., 27, N2, 573

класич. ионная модель

Спектры щелочных галогенидов. II. ИК-спектры галогенидов Na, K, RbCl и CsCl

(см. CsCl) III

Отписк А-281 1957

Сорокин Varshni Y.P.,

Me.X Trans. Faraday Soc., 1957, 53, 132-7

Классическая теория движения щелочных галогенов

теория

С.Л., 1957, 12576 с

Отдел А-269 1958

Спектры

строение

Berkowitz J.,

J. Chem. Phys., 1958, 29, 1386.

Строение молекул и колебательные спектры димеров щелочных галогенидов

LiX, NaX, KX } X = F, Cl, Br, J

RbCl

CsCl.

1958

Eisenstadt M., Rothberg G. M.,
уел. Kusch P.
ісал. J. Chem. Phys., 29, 4, 797

Молекулярный состав паров диэфиров щелочных
элемр. металлов

1 (общ. 10)

1958.

I

Залоющ. чуг. сталей

Kutzelnigg A.
Monatsh. Chem., 1958,
89, N4-5, 459-468

Точка плавления галоидов щелочных металлов как функция ионных радиусов

х-59-10-34209 1 (общ. МГ)

1958

M_2Cl^+
$M_3Cl_2^+$

Milne Thomas A., Klein H.,
Michael Carlieciotti Daniel
J. Chem. Phys., 1958, 28, N V
448-449

Масс-спектрометрическое изучение состава пара в равновесии с хлоридами щелочных металлов.

D_0 нет

I (общ. ИП)

1959

Краснов К.С.

Докл. АН СССР, 1959, 128, №2, 326-328

Расчёты энергии молекул гелоенов щелочно-земельных металлов на основе ионной модели.

1959

Краснов К. С., Штеин Л. М.
Ж. И. Х., 1959, 4, №5, 963-968

Энергия связи в комплексах галогенидов щелочных металлов

X-59-24-84794

I

Щел.
галогениды

Краснов К. С., 1959

Ж. неорган. химии, 1959,
4, №3, 530-534.

Межъядерные расстояния в молекулах газообразных галогенидов щелочных металлов и система радиусов недеформированных газовых ионов

X- 59-20-70350

1959

M_2X^+

Milne T. A., Cubicciotti D.,

J. Chem. Phys., 1959, 30, 1418.

Энергии и частоты колебаний ионов газообразных галогенидов щелочных металлов M_2X^+. (Вычислены колебательные частоты ионов M_2X^+ для модели, предложенной Паулингом. (линейная модель — (Na-Cl-Na)))

частоты колебаний
силовые постоянные
энергии
молекул.

Шорел

x-60-4-12282

Для мономеров

LiF ω_{cm}^{-1} 1049	NaF 574	KF 413
LiCl 764	NaCl 405	KCl 290

$Li_2Cl^+ = LiCl + Li^+$; $\Delta S_{1000} = -23{,}78$ э.е.

$\Delta H_{1000} = -62{,}2$; $\Delta F_{1000} = -38{,}0$

$K_p = \frac{f_{LiCl^+}}{f_{LiCl} \cdot f_{Li^+}} = 10^{+5{,}3}$, т.е. ион Li_2Cl^+ гораздо более важный, чем Li^+

A-1809 1957

Галогениды щелочных металлов
(D, Есвеи тримеров)

Milne T.A., Cubicciotti D.,
J. Chem. Phys., 1959, 30, 1625-1626

10

Ржх, 1960, N 4, 18341

F. M. Page, T. M. Sugden | 1959

Nature, 183, 1959, № 4676, 1672

Энергии связи в кристаллах фторидных щелочных металлов.

I ал.
I щ. м.

1959.

Li X

Рамбиди Н.Г.

X-F, Cl, Br, J

МГУ, хим. ф-т, 1959.

Электронограф. исследование молекул галогенидов щелочных элементов. (автореф.)

есть автореф.

Галогениды щелочных металлов (структура)

LiCl LiBr, LiF, LiI, NaF, NaCl, NaBr, NaI

8

С.Н. 1961. 55. 21

20568 de

(1960)

Structural study of lithium and sodium halides by electron diffraction. P. A. Akishin and N. G. Rambidi (M. V. Lomonosov State Univ., Moscow). *Zhur. Neorg. Khim.* 5, 23–30(1960).—The materials were evapd. from Mo or graphite effusion cells at temps. required to produce vapor pressures of 5–10 mm. Hg. The diffraction patterns were obtained with accelerating voltages of 40, 60, and 80 kv. The values of $r(M - X)_{effective}$ are as follows: LiF 1.68, LiCl 2.17, LiBr 2.35, LiI 2.54, NaF 2.02, NaCl 2.45, NaBr 2.57, NaI 2.80 A. Av. deviation is 0.01 A. On the basis of earlier considerations (*CA* 53, 15750*g*), the content of M_2X_2 in the vapors of all Li halides and NaF is estd. to be >50%, while for NaCl, NaBr, and NaI, it is 19, 14, and 13%, resp. The amplitudes of peaks corresponding to $r(X - X)$ vibration are calcd. on this basis and compared with exptl. data. It is concluded that Li_2Br_2 and Li_2I_2 have quadrangular planar configurations with $r(Li–Br) = 2.35 \pm 0.02$ A., $r(Br–Br) = 3.85 \pm 0.10$ A.; $r(Li–I) = 2.54 \pm 0.03$, $r(I–I) = 4.30 \pm 0.1$ A. The angle X–Li–X is $110 \pm 4°$ for Li_2Br_2 and $116 \pm 4°$ for Li_2I_2. R. Didchenko

1958

188

Li_2F_2, Li_3F_3, Na_2F_2, K_2F_2, Rb_2F_2,

Cs_2F_2 (Do, Hs)

Eisenstadt M., Rothberg G.M., Kusch P.,
J.Chem.Phys., 1958, 29, N 4,
797-804

J,Be, M

F

Галогениды щелочных металлов.

Afischin P. A., Kambidis N. C. 1960

~~[illegible]~~ Z. Phys. Chem., Leipzig, 213, 111

Использование пленкообразующих структур газообразных галогенидов щел. ~~[illegible]~~ металлов методом диффракции электронов

~~[illegible]~~

2В113. **Колебательные частоты щелочно-галоидных димеров. II. Деформационные, симметричные валентные и B_{1g}-колебания.** Berkowitz Joseph. Vibrational frequencies of alkali halide dimers. II. Bending, symmetric stretch, and B_{1g} modes, «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 5, 1519—1522 (англ.).—Молекула щелочно-галоидного димера образует плоский ромб. Ранее (РЖФиз, 1959, № 11, 24688) были вычислены геометрич. параметры таких молекул, а также была выведена ф-ла, выражающая зависимость потенц. энергии V молекулы димера от расстояний между ионами. Входящие в эту ф-лу коэф. определены из опытных данных, для кристаллов и двухатомных молекул. Для колебаний каждого из типов симметрии $B_{1u} = A_{1g}$ и B_{g1} введены различные колебательные координаты, связанные рядом соотношений с изменениями расстояний между ионами. Эти соотношения позволяют выразить силовые постоянные через параметры, входящие в ф-цию V, и найти их численные значения. Последние использованы для вычисления частот колебаний молекул Me_2X_2 (Me = Li, Na, K; X = F, Cl, Br, J) и Rb_2Cl_2, Cs_2Cl_2. Частоты колебаний всех типов симметрии каждой молекулы довольно близки между собой. Точность вычисления частот 15—20%. М. Ковнер

Галогениды щелочных металлов

1960

7Б83. Строение молекул и колебательные спектры димеров галогенидов щелочных металлов. II. Деформационные, симметричные валентные в B_{1g} колебания. Berkowitz Joseph. Vibrational frequencies of alkali halide dimers. II. Bending, symmetric stretch, and B_{1g} modes. «J. Chem. Phys.», 1960, 32, № 5, 1519—1522 (англ.).—В предположении ромбич. модели димера, состоящей из 4 ионов, произведен расчет неплоскостных (B_{1u}) и плоскостных (B_{1g}) деф. и симм. вал. кол. (A_g) для всех галогенидов Li, Na и K и для хлоридов Rb, Cs. Параметры потенциальной функции (поляризуемость ионов, постоянные отталкивания и ван-дер-ваальсова взаимодействия) оценивались по данным для кристаллов и двухатомных молекул. Результаты расчета показывают (сообщение I, РЖХим, 1959, № 14, 48483), что частоты 6 возможных нормальных колебаний димера близки друг к другу и во всех случаях меньше частоты колебания соответствующего мономера.

В. Коряжкин

ж. 1961·7

Галогениды щелочн. и щел.-зем. металлов

Энергия связей

х. 1962. 3

3Б54. Энергия отталкивания в ионных молекулах. Краснов К. С. «Ж. общ. химии», 1960, 30, № 11, 3344—3345.—Энергия связи в молекулах газообразных галогенидов щел. и щел. зем. металлов может быть вычислена на основе ионной модели. В этом случае энергия отталкивания вычисляется по ф-ле $A \exp(-r/p)$. По эксперим. данным для молекул галогенидов (r_e и k_e) щел. металлов вычислены значения P для катионов щел. металлов и галогенид-ионов. Величины P для M^+ и значения эффективных зарядов щел. и щел.-зем. металлов были использованы далее для расчетов P для катионов M^{2+}. Вычисление энергий связей на основе полученных значений P дает среднее отклонение 2% для 20 молекул галогенидов щел. металлов и 2,5% для 9 молекул галогенидов щел.-зем. металлов. С. Бацанов

(1960

4В39. **Поправка к статье «Расчет энергии молекул галогенидов щелочноземельных металлов на основе ионной модели».** Краснов К. С. «Докл. АН СССР», 1960, **134**, № 5,1000. — Указывается, что в работе Краснова (РЖФиз, 1960, № 4, 8273) в ф-лах (2) и (5) коэф. в выражении для поляризуемости равняется 3, а не 4. По утверждению автора, это не изменяет существа выводов, но повышает среднюю ошибку.

Ф.1961-64

11960

Корешкин В.Я., Тайевский Б.М.

Молекулярные постоянные двухатомных молекул щелочных галогенидов.

XIII совещ. по спектроскопии
Л-д.

1960

7В108. **О межатомном расстоянии в молекулах газообразных галогенидов щелочных металлов.** Карапетьянц М. Х. «Ж. структурн. химии», 1960, 1, № 4, 399—403.—Один из методов сравнительного расчета применяется к вычислению межатомных расстояний d в молекулах газообразных галогенидов щелочных металлов. При расчете использованы эмпирич. соотношения $d_{Me-X} = A_X\, d_{Me-Br} + B_X$ (I) и $d_{Me-X} = A_{Me}\, d_{K-X} + B_{Me}$ (II). Значения коэф. A и B найдены с помощью

см. к/об

90·1961·6

наиболее точных из имеющихся эксперим. данных. Показано, что расчет по (I) воспроизводит эксперим. значения d (11 в-в) со средней погрешностью 0,0023 Å, причем она уменьшается до 0,0009 Å, если ориентироваться на эксперим. значения d_{Rb-F} и d_{Cs-F}. Средняя погрешность расчета по (II) составляет 0,0004 Å, т. е. соизмерима с точностью эксперим. данных (0,0001 Å). Проведена оценка значений d_{Fr-X} (X = F, Cl, Br, J) и d_{Me-At} (Me = Li, Na, K, Rb, Cs). Для вычисления d_{Fr-X} использовалось также соотношение $d_{MeII-X} = Ad_{MeI-X}$, в котором сравниваются межатомные расстояния галогенидов щелочноземельных и щелочных металлов. Приведена таблица рассчитанных значений d.

Е. Пшеничнов

1960

Галогениды щелочн. металлов

5B54. О теории галогенидов щелочных металлов Паулинга. Varshni Y. P., Shukla R. C. On Pauling's theory of alkali halide molecules. «Proc. Phys. Soc.», 1960, 76, № 5, 794—797 (англ.).—Для расчета ангармоничности $\omega_e x_e$ и константы центробежного растяжения α_e галогенидов щелочных металлов использована двучленная потенц. ф-ция типа Паулинга (первый член описывает кулоновское притяжение ионов, второй, пропорциональный r^{-n},— короткодействующее отталкивание), параметры которой определены по эксперим. величинам ω_e, r_e и B_e. Рассчитанные ω_e, x_e и α_e для большинства из 16 галогенидов оказываются больше экспериментальных. При этом использованный потенциал менее точен, чем потенциал с экспоненц. вторым членом.

Е. Никитин

ф·1961·5

5,6,7,10 вв. 1961

A-428 Запрещ. цвет. лист.

Bulewicz E.M., Phillips L.F.,
Sugden T.M.
Trans.Faraday Soc., 1961, 57,
N 6, 921-931
Determination of ...

H,J

РЖ., 1962, 11653 orig.

ΔH_f; Do (LiF, LiCl, LiBr, LiJ, NaF, NaCl, NaBr, NaJ, KF, KCl, KBr, KJ, RbF, RbCl, RbBr, RbJ, CsF, CsCl, CsBr, CsJ, GaCl, GaBr, GaJ, InF, InCl, InBr, InJ, TlF, TlCl, TlBr, TlJ, NiCl, NiBr, NiJ, MnCl, MnBr, MnJ, CrCl, CrBr, CrJ)

Li-compounds 1961

Li X
Na X
K X
Rb X
Cs X
энергия диссоциации.

Brewer L., Brackett R.

Chem. Rev., 1961, 61, №4, 425.

The dissociation energies of gaseous alkali halides

галогены.
щелочн.
металл.

1961

S. Datz, W.T. Smith, E.H. Taylor
J. Chem. Phys. 34, 1961, 558, 12

Молекулярная ассоциация
в парах галогенидов
щелочных металлов.

галог.
щел.
I мет.

1961

I. Daniel C.

J. Phys. Chem., 1961, 65, N6, 1058-1059

66247. Энергия [образования] галогенидов щелочноземельных металлов.

общ. разд., I гр.

I

галогениды щел. металлов

1961

Rothberg G. M.,

J. Chem. Phys., 1961, 34, 2069 (№6).

Энергия связей в молекулах щелочных галогенидов

В рамках теории Томаса-Ферми обсуждается отталкивательная часть энергии взаимодействия щелочного иона и иона галогена.

I

1961

15Б22. Исправление автора к статье «Энергии связей молекул галогенидов щелочных металлов». Rothberg G. M. Erratum. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 3, 1137 (англ.).—К РЖХим, 1962, 5Б64.

х. 1962. 15

1961

I

remarkable

New potential function for alkali halide molecules. Yatendra Pal Varshni (Natl. Research Counctil, Ottawa, Can.) and Ramesh Chandra Shukla. *J. Chem. Phys.* 35, 582–7(1961).—The following potential function was suggested for the alkali halide mols.: $U = (\cdot e^2/r) + P \exp(-kr^2)$, where P and k are consts. Values of α_e, $\omega_e x_e$, and the ionic binding energy D_i were derived for the following 3 functions: simple Born-Mayer potential, Rittner potential, and the potential suggested above. The results obtained with the new function were much better than those obtained with the Born-Mayer potential, but slightly inferior to those obtained with the Rittner potential.

Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1962. 56. 6
5532d

I

гал.

из. м.

1961

6Б95. Новая потенциальная функция для молекул щелочных галогенидов. Varshni Yatendra Pal, Shukla Ramesh Chandra. New potential function for alkali halide molecules. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 2, 582—587 (англ.).—Экспериментальные значения постоянных α_e, $\omega_e x_e$ и D_t (энергия диссоциации на ионы) двухатомных молекул галогенидов щел. металлов сопоставлены с вычисленными на основании функций Борна — Майера, Риттнера и вновь предложенного потенциала $U = -e^2/r + P \exp(-kr^2)$. Показано, что наилучшее совпадение получается для функции Риттнера, наихудшее — для функции Борна — Майера. Для этих двух функций заново вычислены постоянные отталкивания. Экспоненциальный член в предложенной функции удовлетворительно описывает не только отталкивание ионов в молекуле, но одновременно и притяжение, обусловленное индуцированными диполями и ван-дер-ваальсовыми силами. Кратко обсужден вопрос о виде члена, описывающего отталкивание ионов.

В. Коряжкин

х. 1962. 6.

Щелочные галогениды
Вычисл.
Мол. пост.
Получ. впервые
(LiF и др.)

1962

19 Б35. О молекулярных постоянных двухатомных молекул щелочных галогенидов. Коряжкин В. А., Татевский В. М. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1962, № 2, 15—20

При предположении о применимости ионной модели к двухатомным молекулам галогенидов щел. металлов можно получить для них внутренне согласованную систему молекулярных постоянных, удовлетворительно согласующихся с экспериментом (D_0, ω_e, $\omega_e x_e$, r_e и μ_e; РЖХим, 1963, 15Б191). На основе ионной модели произведена оценка колебательных постоянных и коэф. ангармоничности для молекул, не имеющих в литературе эксперим. данных. На основании данных расчетов и удовлетворительного согласия с экспериментом нельзя еще сделать вывода, что связь в молекулах галогенидов щел. металлов является ионной. Как было показано, выражение, использованное Риттнером (Rittner E. S. «J. Chem. Phys.», 1951, 19, 1030), нуждается в поправке, чтобы оно описывало реальную потенциальную кривую. Следовательно, даже учет взаимной поляризации ионов не позволяет полностью согласовать расчет с опытом. С другой стороны, удовлетворительное согласие можно получить, вводя по-

Х. 1963. 19

ункцию Морзе, которая, как известно, удо-
льно описывает потенциальные кривые не-
лекул. По-видимому, реальные потенциаль-
молекул галогенидов щел. металлов нахо-
у кривыми, приведенными ранее (Pittner
m. Phys.», 1951, 19, 1030), и кривыми Мор-
из резюме авторов

Галогениды щел. металлов оценки постоянных

1962

) Molecular constants of diatomic molecules of alkali halides. V. A. Koryazhkin and V. M. Tatevskii. *Vestn. Mosk. Univ., Ser. II, Khim.* 17, No. 2, 15–20(1962). The equation for $W(r)$, applied by Rittner to calc. the dissocn. energy of a diat. mol. into ions, is discussed (*CA* 46, 792*g*). This equation does not represent the real potential curve, since real mols. do not dissoc. into ions but into neutral atoms. Hence, a modified equation is proposed: $U(r) = W(r) + [1 - F(r)](I_1E)$, where I_1 = energy of free ions and E = energy of free neutral atoms. Even taking into account the mutual ionic polarization fails to give full agreement between calcn. and expt. On the other hand, satisfactory agreement is obtained by introducing a correction into the Morse function, which satisfactorily represents the potential curves for nonionic mols. Thus, the potential curves for mols. of alkali halides lie between those for the function $W(r)$ and the Morse one. On the basis of the ionic model of diat. mols. of alkali halides a system of mol. consts. (D_0, ω_e, $\omega_e x_e$, r_e, and μ_e) is calcd. and exptl. confirmed. In the case of mols. with no literature data ω_e and $\omega_e x_e$ are estd. on the basis of the ionic model. 19 references.

Z. T. Bleszynski

C.A. 1962. 57. 9
10540 gh

1962

7 Д67. Молекулярные постоянные двухатомных молекул щелочных галогенидов. Коряжкин В. А., Татевский В. М. В сб. «Физ. пробл. спектроскопии. Т. I». М., АН СССР, 1962, 190—191

См. РЖФиз, 1962, 11В63.

ф-1963-7

1962

7 Д68. **Применение ионной модели для расчета колебаний молекул галогенидов щелочноземельных металлов.** Краснов К. С., Максимов А. И. «Ж. структурн. химии», 1962, 3, № 6, 703—706

На основании ионной модели произведен расчет силовых постоянных и частот валентных колебаний для молекул галогенидов II*a* группы. Необходимые для расчета коэф. отталкивания найдены независимым методом на основании правила аддитивности. Рассмотрены возможные причины отклонения от правила аддитивности в случае молекул с очень малыми межатомными расстояниями.

ф-1963-7

1962

Paramagnetic resonance spectroscopy

The molecular beam electric resonance spectra of some alkali halides. Lewis Peter Gold (Harvard Univ.). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), *Order No.* 62-3538, 93 pp.; *Dissertation Abstr.* 23, 1204(1962). CA

Concepts

C.A. 1963 · 58 · 7
6351 b

10 10 10

X505 1962

$Li^{7}Br^{79}$, $Li^{7}Br^{81}$, $Li^{7}J^{127}$
10 10 10
$Na^{23}Br^{79}$, $Na^{23}Br^{81}$, $Na^{23}J^{127}$
10
$K^{39}Br^{79}$, $K^{39}Br^{81}$, $K^{39}J^{127}$
$Rb^{85}Br^{79}$, $Rb^{85}Br^{81}$, $Rb^{85}J^{127}$
$Rb^{87}Br^{79}$, $Rb^{87}Br^{81}$, $Rb^{87}J^{127}$
$Cs^{133}Br^{79}$, $Cs^{133}Br^{81}$, $Cs^{133}J^{127}$

$(B_e, \alpha_e, \gamma_e, D_e, \beta_e, \omega_e, \omega_e x_e, r_e, a_0, a_1)$

Rusk J. R., Gordy W.

Phys. Rev., 1962, 127, № 3, 817-830 (англ.).

Millimeter wave molecular beam spectroscopy: alkali bromides and iodides.

Рж Хим, 1963, 18Б127

галогениды щелочных металлов.

1963

Millimeter wave spectroscopy of the alkali halides in high-temperature molecular beams. James Rogers Rusk (Duke Univ., Durham, N. Car.). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), *Order No.* 63-3605, 120 pp.; *Dissertation Abstr.* 24, 2097–8(1963).

SNDC

С. А. 1964. 60 N10 11509 h.

LiHal? Norris W. G. 1963

Diss. Absts, 1964, 25, N 3, 1604

ИК-спектр галогенида лития

Спект при выс. и малом разреш. объяснение не дано.

Вр — 4380 — Х 1964

Li

Slingham H.

средство к эл-ну

D. Nahr forsch., 1964, 19a, №6, 724

Определение ионов алкилалюминиев и средство к электрону щелочных металлов и алкилфениллитиев

I (Li)

галогениды щелочных металлов

Lide D.R. и др.

1964

265

J. Chem. Phys.,
40, N1, 156

таблица мол. пост. всех щел. галогенидов.

Микроволновый спектр LiCl

(См. LiCl) III

Lithium Li 1964

U.K.

The infrared spectra of the lithium halides. Wilfred Glen Norris (Harvard Univ.). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), *Order No.* 63-7834, 177 pp.; *Dissertation Abstr.* 25(3), 1604 (1964)(Eng). SNDC

C.A. 1965 · 62 · 6

6016 b

LiCl

NaCl
NaBr
NaI
KCl
KBr
KI
RbBr
CsBr
CsI

1965

Raman spectra of alkali halides. R. S. Krishnan (Indian Inst. Sci., Bangalore). *Lattice Dyn., Proc. Intern. Conf., Copenhagen*, 1963, 429–31(Pub. 1965)(Eng). The 2nd-order Raman spectra of LiCl, NaCl, NaBr, NaI, KCl, KBr, KI, RbBr, CsBr, and CsI are discussed. M. Elmslie

CA 1966, 64, 3
2883 h

5

X - 6046

1965

M^+, MJ^+, M_2J^+, $M_3J_2^+$, J^+, HJ^+,

M = ~~Li~~, ~~Na~~, K, Rb, Cs;

~~LiNaJ~~$^+$, $LiKJ^+$, $LiRbJ^+$, $LiCsJ^+$

(A.P.)

Platel G.,

разн

J. chim. phys. et phys.-chim. biol.,

1965, 62, №10, 1176-1180

CA, 1966, 64, №10, 13397

10

Есть ф. м.

Фториды щелочных металлов

1965

Rotational spectroscopy of the alkali fluorides. Sidney Edwin Veazey (Duke Univ., Durham, N. Car.). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), *Order No.* 65-6668, 90 pp.; *Dissertation Abstr.* 25(12), 7326(1965)(Eng). SNDC

C. A. 1965. 63. 9
10867 cd

Галогениды щелочных металлов.

Функция потенц. энергии

3 Б25. **Функция потенциальной энергии молекул галогенидов щелочных металлов.** Varshni Y. P., Shukla R. C. Potential energy functions for alkali halide molecules. «J. Molec. Spectrosc.», 1965, 16, № 1, 63—83 (англ.) 1965

Для вычисления спектроскопич. постоянных α_e, γ_e, β_e, ω_{exe} и D_i галогенидов щел. металлов по ф-лам Данхема (Dunham J. L. «Phys. Rev.», 1932, 41, 721) применяются 4 разных потенциала: потенциал Риттнера (Rittner E. S. «J. Chem. Phys.», 1951, 19, 1030), две общие потенциальные функции $U=-e^2/r+Ar^n\exp(-ar)$ и $U=-e^2/r+$ $+B\exp(-kr^p)$, предложенные авторами, и потенциал Риттнера с учетом гиперполяризуемости. Сопоставлены таблицы значений α_e, γ_e, β_e, $\omega_e x_e$ и D_i, вычисленных с разными потенциалами для всех галогенидов щел. металлов. Показано, что потенциал Риттнера дает неправильные значения для γ_e и β_e; учет гиперполяризуемости не приводит к улучшению, а два остальных потенциала приводят к лучшим значениям α_e, γ_e, $\omega_e x_e$ и D_i и к немного лучшему значению для β_e. М. Алиев

Х · 1966 · 3

галогениды
щелочных металлов

для нахожд
энергии

1965

Potential energy functions for alkali [metal] halide molecules. Y. P. Varshni and R. C. Shukla (Univ. Ottawa, Can.). *J. Mol. Spectry.* 16(1), 63-83(1965)(Eng). The following 4 potential energy functions were examd. for alkali metal halide mols.: 2 general functions proposed here, the Rittner potential, and a modification of the Rittner potential by including a hyperpolarizability term. The Rittner potential gives poor results for γ_e and β_e, and the inclusion of the hyperpolarizability term makes the disagreement with the exptl. values greater. RCKP

C. A. 1965. 63. 3
2403 g

галогениды щелочн. мет-лов (кристаллы) KBr NaJ

1966

4 Б499. Ангармонические взаимодействия в галогенидах щелочных металлов. II. Cowley E. R., Cowley R. A. Anharmonic interactions in alkali halides II. «Proc. Roy. Soc.», 1966, 292, № 1429, 209—223 (англ.)

Методом работы (РЖФиз, 1964, 10Е133) на основе силовой модели VI работы (РЖХим, 1965, 5Б392) получены функции распределения частот $g(\nu)$ для кристаллов KBr и NaJ, причем параметры этой модели подбирались так, чтобы удовлетворить нейтронографич. данным по дисперсионным кривым и векторам поляризации фононов (РЖХим, 1965, 5Б392). Найдены моменты $g(\nu)$ порядка $n=-3, 0, 3, 6$. Расхождение с опытом (РЖХим, 1961, 6Б376), особенно заметное для $n=3, 6$, объясняется тем, что в последнем моменты $g(\nu)$ получены из данных по теплоемкости для всех т-р, в то время как авторы для нахождения $g(\nu)$ использовали нейтронографич. данные при одной т-ре. По $g(\nu)$ вычислены гармонич. вклады в свободную энер-

2·197·4

гию (F), энтропию (S) и теплоемкость (C_v) при $0<T<400°$ К. Найдены сдвиги $\Delta(\lambda)$ частот фононов $\omega(\lambda)$ (где $\omega(\lambda)+\Delta(\lambda)$ — полюс однофононной функции Грина), связанные с изменением параметра решетки при тепловом расширении и — в 1-м неисчезающем приближении — с ангармонизмом 3-го и 4-го порядков. При вычислении последних вкладов использовалось приближение соседей с экспоненциальным межатомным потенциалом, параметры к-рого выбирались так, чтобы удовлетворить опытным данным по гармонич. упругим постоянным. Кроме того, в $\Delta_3(\lambda)$ учитывалась лишь 3-я производная этого потенциала. Вычислены линейные по $\Delta(\lambda)$ вклады ΔF, ΔS, ΔC_p, ΔC_v и ΔW ($\exp(-W)$ — фактор Дебая — Валлера (анизотропные ангармонич. вклады в W не рассматривались) как функции т-ры, причем учтено то, что в нейтронографич. $\omega(\lambda)$ уже содержится эффект ангармонизма. Сравнение с экспериментом проведено для дебаевской т-ры ($0<T\leqslant 100°$ К), $C_p+\Delta C_p$ ($100°$ К$\leqslant T<300°$ К; РЖХим, 1958, № 18, 60121) и $W+\Delta W$ ($100°$ К$\leqslant T\leqslant 400°$ К; РЖХим, 1965, 19Б402), причем оказалось, что теоретич. кривые при высоких т-рах лучше ложатся на опытные, если не учитывать ангармонизма (величина $\lambda F/F$ очень мала даже при $400°$ К, а $\Delta S/S$ достигает 4%). Основной причиной этого расхождения, по мнению авторов, является грубый выбор межатомного потенциала при расчете $\Delta(\lambda)$.

Сообщение I см. РЖХим, 1966, 6Б144. В. Кащеев

1966

2 Д255. Исправление к статье «Длинноволновые ИК-спектры щелочных солей галогенидных комплексов металлов.» Fertel J. H., Perry C. H., Sabatini A., Sacconi L., Schettino V. Correction to paper «Long-wave infrared spectra of alkali salts of platinum halide complexes». «J. Phys. and Chem. Solids», 1966, 27, № 9, 1551 (англ.)

К РЖФиз, 1966, 5Д485.

Ф. 1967. 2Д

Заголовок Khaimenov A. P., 1966
изд. медиатеки Smirnov M. V.

Tr. Inst. Elektrokhim., AN SSSR, Ural. Filial, N 9, 3-7.

Structure of molten alkali metal halides.

C. A. 1967. 67. 18
85573 v.

Все галогениды Li, Na, K, Rb и Cs.	Jandon S.P., Jandon R.	1966
	Z Phys Chem., (Leipzig), 1966, 231, 26	

Новое соотношение между энергией диссоциации и молекулярными константами галогенидов щелочных металлов

Из потенциальной функции Сатерлэнда найдено соотношение:

$$D_0 = \varkappa_e (A + B r_e + C r_e^2)$$

Галоидные щелочных металлов

1966

Rotational magnetic moments of alkali halide molecules. F. Mehran, R. A. Brooks, and N. F. Ramsey (Harvard Univ.). *Phys. Rev.* 141(1), 93–104(1966)(Eng). The rotational magnetic moments of a number of alkali-halide molecules were measured by the molecular-beam magnetic-resonance technique. The gyromagnetic ratios in units of nuclear magnetons are $^{7}Li^{19}F$ (+)0.07367 ± 0.00050, $^{39}K^{19}F$ (−)0.0364 ± 0.0012, $^{7}Li^{35}Cl$ (+) 0.0848 ± 0.0032, $^{85}Rb^{19}F$ (−)0.0441 ± 0.0028, $^{6}Li^{35}Cl$ (+)0.1042 ± 0.0033, $^{85}Rb^{35}Cl$ (−)0.0183 ± 0.0018, $^{7}LiBr$ (+)0.0911 ± 0.0089, $^{133}Cs^{19}F$ (−)0.0621 ± 0.0055, $^{23}Na^{127}I$ (+)0.0268 ±

C.A. 1966. 64. 6
7508h - 7508a

0.0047, $^{133}Cs^{35}Cl$ (−)0.0212 ± 0.0011. Only the abs. values were detd. exptl. However, the abs. values are reasonably consistent with the theoretical ones, so signs from the theory are listed in parentheses. For weak fields the mol. rotational magnetic moments do not correspond directly to the peaks of the resonance curves. A statistical analysis was carried out to det. the rotational *g* values from the peaks of the observed resonances. Since the correction is large (up to 50%), these results would be wrong by an amt. beyond the indicated exptl. error if the interpretation of the correction is not valid. No such uncertainty arises in the LiF measurements or in other rotational-moment measurements where the correction does not need to be made. The measured values detd. in accordance with this analysis are in good agreement with the predictions from a theory of Foley (*CA* **41**, 7262*e*). The spin-rotational interaction const. of ^{19}F in $^{133}Cs^{19}F$ was measured by a new method as 13.5 ± 2.5 kc./sec.

RCPI

Галочкин
изл. лет

ВФ-$\overline{\underline{X}}$-5219

1966-
-1967

Baba A.,
Acta Univ. Debrecen. Ludovico
Kossuth. Nom. Ser. Phys. Chem.
1966, 12, 9-20 (Publ. 1967)

Te,
De.

C.A. 1967, 67, N 25709

Галогениды щелочных металлов

1964

расчет м.п.

25709j Semistatistical calculation of the constants of alkali halide molecules. Agoston Baba (Kossuth L. Tud. Egyet. Elm. Fiz. Int., Debrecen, Hung.). *Acta Univ. Debrecen. Ludovico Kossuth Nom., Ser. Phys. Chim.* 12, 9–20(1966)(Pub. 1967) (Eng). The interaction potential between alkali and halide ions was detd. in the 1st approxn. of the Lenz-Jensen-Gombas (L. and J., *CA* 26: 5808) perturbation theory. The ds. employed were calcd. from the Slater (*CA* 24: 5604) and the Slater-Angus (A., *CA* 26: 4218) 1-electron wavefunctions. The model takes into consideration only the Coulomb-type interaction of nuclei and electron clouds and the kinetic energy of the electron cloud.

C.A. 1967. 67. 6

The equil. internuclear distance and the dissocn. energy were calcd. by the help of the potential. Except for the case of some alkali halides the value of dissocn. energy approximates the exptl. values with an accuracy of 1–10%, while accuracy is within 4% for the majority of mols. Internuclear distance falls within 1–8% of the exptl. values in this model. The values for dissocn. energy are generally lower than the exptl. data, while the equil. internuclear distance surpasses the observed values.

L. Somogyi

1967

9 Д231. ИК-спектры гексагалогенметаллатов (IV). Brown D. H., Dixon K. R., Livingston C. M., Nuttall R. H., Sharp D. W. A. The infrared spectra of hexahalogenometallates (IV). «J. Chem. Soc.», 1967, A, № 1, 100—104 (англ.)

Получены ИК-спектры (4000—250 *см*$^{-1}$) ряда гексахлорметаллатов четырехвалентных металлов M_2MeCl_6, где M—K, Rb, Cs, Me—Ti, Sn, Pb, Pd, Os, Pt гексабромметаллатов M_2MeBr_6, где M—K, Rb, Cs, Me—Sn, Pd, Os, Ir, Pt и для гексафторметаллатов K_2TiF_6, Cs_2TiF_6, Rb_2TiF_6, K_2GeF_6, Rb_2GeF_6. Для всех соединений проведен рентгеноструктурный анализ. Все хлоро- и бромокомплексы имеют кубич. структуру K_2PtCl_6, исключая гексабромстаннат калия, который имеет тетрагональные искажения в структуре. Наблюдаемые в спектрах некоторых комплексов расщепления полос, относящихся к фундаментальным колебаниям, обсуждены с учетом точечной симметрии анионов. Б. Жаданов

09.1967.9Д

Галогениды щелочн. металлов

1967

24 Б26. Ван-дер-ваальсова энергия взаимодействия галоидных соединений щелочных металлов. Chandra M., Sharan B. Van der Waals interaction energy for alkali halides. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 91, № 1, 257—258 (англ.)

На основе новых данных по коэф. Ван-дер-Ваальса (РЖФиз, 1967, 2Д61) рассчитана энергия диполь-дипольного взаимодействия для всех галогенидов щелочных металлов. Результаты сильно отличаются от данных, полученных ранее. А. Ш.

х · 1967 · 24

Щелочные галоиды

1967

12 Д267. **Сечения УФ-поглощения для паров щелочных галоидов.** Davidovits P., Brodhead D. C. Ultraviolet absorption cross sections for the alkali halide vapors. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 8, 2968—2973 (англ.)

Измерены сечения УФ-поглощения (2000—4000 Å) для паров щелочных галоидов; из полученных эксперим. данных построены потенц. кривые. Рассчитанные времена жизни возбужденных молекулярных состояний равны $\sim 10^{-8}$ сек.

Ф. 1967. 12Д

Галогениды щел. мет.

Fajans K. 1967

Struct. and. Bond.,

3, 88-105

Степень полярности и взаимная поляризуемость ионов в молекулах галогенидов щелочных металлов, BeO и BaO.

(См. BeO) III

RbF, RbCl, ~~CsF~~, CsCl, NaJ (u.h.) 1967

14

Lavas F.J.

X 3981

Dissert. Abstr. 1968, B29(1), 315

Radio-frequency Stark spectra: rubidium fluoride, rubidium chloride, cesium fluoride, cesium chloride, and sodium iodide

Cesium 137

CA, 1968, 69, 126, 111496k

1967

Галогениды щел. металлов

18 Б32. Коэффициенты ван-дер-Ваальса диполь-дипольного взаимодействия в галогенидах щелочных металлов. Lynch David W. On van der Walls dipole-dipole coefficients in alkali halides. «J. Phys. and Chem. Solids», 1967, 28, № 10, 1941—1946 (англ.)

х · 1968 · 18

Unknown. Unknown.

LiCl (we, wexe, Be, re) ro

1967

Madcha R.L.,

J. Chem. Phys., 1967, 47 (11), 4595-606

Theoretical analysis of the electronic structure and molecular properties of the alkali halides.

I. Lithium chloride

CA, 1968, 68, w12, 53428 x

галогенид щелочных металлов

1967

(Обзор хим. св-ва спектры)

35377j Fluorohalides of alkali metals. A. A. Opalovskii (Inst. Neorg. Khim., Irkutsk). *Usp. Khim.* 36(10), 1673-700 (1967)(Russ). Alkali metal halide di-, hexa-, and tetrafluorides, their chemistry, properties, and spectral characteristics are reviewed. 154 references. G. M. Kosolapoff

C.A. 1968. 68. 8

Диффузия щелочных металлов

М.Н., De

Отдел А-1951

Patel M. N.

et all

Indian J. Phys,

1967, 41, N 4, 235-240

1967

1967

галогениды щел. мет-лов

6 Б31. Теория полярных молекул на основе ионной модели. Tosi M. P., Doyama M. Ionic-model theory of polar molecules. «Phys. Rev.», 1967, **160**, № 3, 716—718 (англ.)

Полуэмпирическая ионная модель, часто применяемая в динамич. теории кристаллов галогенидов щел. металлов, перенесена на двухатомные молекулы этих же элементов. Потенциальная энергия взаимодействия ионов в двухатомной молекуле принята в виде $U(r) = -(e^2/r) - [m_+(r) + m_-(r)]\, e/2r^2 + (m_-(r)\, B(r)/2) + \varphi(r)$, где $m_-(r)$ и $m_+(r)$ суть дипольные моменты аниона и катиона: $m_-(r) = \alpha_-[-B(r) + e/r^2 + 2m_+(r)/r^3]$, $m_+(r) = \alpha_+[e/r^2 + 2m_-(r)/r^3]$, α_- и α_+ — поляризуемости аниона и катиона; $\varphi(r)$ — короткодействующий потенциал отталкивания; $B(r)$ — поправка на неточность, введенная только в случае аниона; функция $B(r)$ связана с функцией $\varphi(r)$ соотношением

М. П. Доклад

X·1968·6

$$B(r) = (e^*/e - 1)\, e\varphi(r)/2\alpha_- [\varphi'(r_0) + 2\varphi(r_0)/r_0],$$

где e^* есть эффективный заряд аниона и r_0 — параметр решетки. Рассчитаны равновесные межъядерные расстояния, дипольные моменты, энергии связи и частоты колебаний 16 двухатомных молекул галогенидов щел. металлов при использовании значений параметров модели, принятых для соответствующих кристаллов. Результаты находятся в достаточно хорошем согласии с опытом (за исключением случая LiJ, для кристалла которого неизвестны эффективные заряды e^* ионов).

Т. К. Ребане

А-940 1967

5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14 вып.

Галогениды Nd, Y, Sc, La (межедер. расст.)

Галогениды Be, Mg, Ca, Sr, Ba; Li Na, K, Rb, Cs, Mo, W, V, Nb, Zr, Hf (r мет < r мет)

Окислы и сульфиды Li, B, Ga, In, P, Sb, N, Cl

$LiNO_3$, $NaNO_3$, Na_2CrO_4, K_2CrO_4, $CsSO_4$, $KReO_4$, KOH, CsOH (межат. расст.)

Вилков Л.В., Рамбиди Н.Г., Стрижонов В.П.; Ж. структурн. химии, 1967, 8, 786-812

10

Галогениды и гидриды щелочных металлов

ВФ-3982-Х 1968

11 Д118. **Межатомный потенциал и некоторые свойства галогенидов щелочных металлов и молекул гидридов.** Dass Lachhman, Saxena S. C. Interatomic potential and certain properties of alkali halide and hydride molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 2, 102—104 (англ.)

По ф-ле для потенц. энергии, учитывающей электростатическое, ван-фер-ваальсово и поляризационное взаимодействия, а также отталкивание атомов, описываемое гауссовой кривой, вычислены энергии связи, вращательные и колебательные постоянные некоторых галогенидов щелочных металлов и некоторых молекул гидридов (все-

Ф. 1968. 11Д

го 2 ~~молекулы~~. Результаты расчетов, а также доступные соответствующие эксперим. величины, взятые из литературы, приводятся в таблице. Согласие вычисленных величин с экспериментальными плохое. Сопоставление полученных результатов с результатами расчета по ф-ле, в которой отталкивание описывается простой экспонентой, показывает, что в случае двухатомных молекул простая экспонента лучше описывает потенциал отталкивания атомов, чем кривая Гаусса. В. А. Морозов

Галогениды щел. металлов

1968

ВФ-3982-Х

(м.н)

расч.

13066a Interatomic potential and certain properties of alkali halide and hydride molecules. Dass, Lachhman; Saxena, S. C. (Rajasthan Univ., Jaipur, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1968, 6 (2), 102–4 (Eng). Binding energy, rotational, and vibrational consts. of alkali halides and hydride mols. were computed on a potential function consisting of electrostatic, van der Waals, polarization, and Gaussian type of overlap, and compared with the available exptl. data. Exponential function is more appropriate than the Gaussian function to represent the overlap part of the interat. potential. RCXZ

C.A. 1968. 69. 4

Галогениды и гидриды щел. металлов

ВФ-3982-Х 1968

22 Б27. **Межатомный потенциал и некоторые свойства молекул галогенидов и гидридов щелочных металлов.** Dass Lachhman, Saxena S. C. Interatomic potential and certain properties of alkali halide and hydride molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 2, 102—104 (англ.)

Для галогенидов и гидридов щел. металлов рассчитаны энергии связи, вращательные и колебательные постоянные с потенциальной функцией, содержащей электростатич., ван-дер-ваальсовый, поляризационный члены и гауссовый тип перекрывания. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. данными. Авторы приходят к выводу, что с гауссовыми функциями получаются гораздо более плохие результаты, чем с применяемыми обычно экспоненциальными функциями.

Резюме

Х · 1968 · 22

+1

Галогениды щел. мет. 1968

Расчёт D_0; $\omega_e x_e$; α_e;

12 Д139. Применимость потенциальной функции Васастьерна для вычисления физических параметров. Gohel V. B. Applicability of the Wasastjerna potential function for evaluating physical parameters. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 4, 171—173 (англ.)

Для вычисления таких величин, как энергия диссоциации D_i, колебательная постоянная $\omega_e x_e$ и вращательная постоянная α_e двухатомных соединений щелочных металлов с галогенами, применена приближенная потенц. ф-ция Васастьерна (Wasastjerna J. A. «Phil. Trans.», 1938, 237, 105)

Ф. 1968. 12Д

$$\Phi = -\frac{e^2}{r} + Cr^7 e^{-\beta r},$$

где C и β — параметры. Вычислены указанные величины для 18 молекул. Полученные результаты сравниваются с эксперим. значениями и величинами, вычисленными с использованием других потенц. ф-ций (Риттнера и Варшни — Шукла). Приводятся ф-лы для вычисления D_i, $\omega_e \varkappa_e$ и α_e. Для α_e результаты лучше, чем с другими ф-циями, для $\omega_e \varkappa_e$ несколько хуже, а для D_i равнозначны. Обсуждается применимость той или иной ф-ции в различных случаях. Е. И. Креденцер

Галогениды щел. металлов (потенц. ф-ция) (М.Н.)

оттиск А-1050 1968

3 Б41. Новая потенциальная функция для двухатомных молекул галогенидов щелочных металлов. Gohel V. B., Trivedi M. D. A new potential function for alkali halide diatomic molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 4, 173—175 (англ.)

Для двухатомных молекул галогенидов щел. металлов предложена потенциальная функция вида $\Phi = -e^2/r + P/r\ exp(-kr^2)$ (P и k — параметры) с учитывающим отталкивание членом нового типа, к-рый, как утверждается, должен более удовлетворительно учитывать поляризацию и ван-дер-ваальсово взаимодействие. Рассчитанные с помощью предложенного потенциала колебательные и вращательные постоянные, а также энергии ионных связей находятся в лучшем соответствии с наблюдаемыми (или вычисленными) величинами, чем найденные с использованием других потенциальных функций.

Г. И. Каган

Х · 1969 · 3

Галогенид + щелочных металл.

(2 хл.) опишем А-1050

1968

Ф-ия потенц. энерг.

46231d A new potential function for alkali halide diatomic molecules. Gohel, V. B.; Trivedi, M. D. (Sheth M. N. Sci. Coll., Patan, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1968, 6(4), 173–5 (Eng). A new potential function has been suggested for alkali halide diat. mols. and is of the form $\varphi = -(e^2/r) + (P/r)\exp[-kr^2]$, where P and k are the potential parameters. Values of the rotational consts. α_e, vibrational consts. $\omega_e\alpha_e$, and the ionic binding energy D_i, derived by using the new potential function as well as the Rittner and the Varshni-Shukla potential functions have been compared with the observed values. The parameter values calcd. by using the new potential function are in closer agreement with the observed (or estd.) values as compared to values calcd. by using the other potential functions. 16 references. RCXZ

C.A. 1968. 69. 12

галогениды щелочных металлов

потенц. ф-ция м. н.; Д₀

4 Д102. Новая потенциальная функция для двухатомных молекул галогенидов щелочных металлов. Gohel V. B., Trivedi M. D. A new potential function for alkali halide diatomic melecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 4, 173—175 (англ.)

Для двухатомных молекул галогенидов щелочных металлов предложена новая потенц. ф-ция вида $\varphi = -e^2/r + (P/r) \exp(-kr^2)$, где P и k — параметры. С помощью этой ф-ции для восемнадцати различных молекул вычислены вращательные постоянные α_e, колебательные постоянные $\omega_e x_e$ и ионная энергия связи D_i. Полученные значения α_e, $\omega_e x_e$, D_i сравниваются с эксперим. данными, а также со значениями этих же величин, полученных с помощью потенциалов Риттнера и Варшни—Шакла. Показано, что величины α_e, $\omega_e x_e$, D_i вычисленные с помощью новой ф-ции, находятся в лучшем согласии с экспериментом, чем величины α_e, $\omega_e x_e$, D_i, вычисленные с помощью потенциалов Риттнера и Варшни—Шакла.

Е. В. Самуйлов

1968

отнесн А-1950

9.1969 4Д

галогениды щелочных металлов

1968

3 Д182. Дипольные моменты и эффективные заряды двухатомных ионных молекул. Kachhava C. M. Dipole moment and effective charge of diatomic ionic molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 3, 152—154 (англ.)

В предположении, что число поляризуемых электронов во всех родственных молекулах одинаково, рассчитаны величины дипольных моментов и эффективные заряды для всех галогенидов щелочных металлов.

В. Л. Лебедев

Ф. 1969. 3Д

Димеры галогенидов щел. мет-лов

отчет А-1307 1968

(105438t) Molecular constants of dimer molecules of alkali metal halides. Krasnov, K. S.; Morozov, E. V.; Timoshinin, V. S.; Danilova, T. G. (USSR). *Tr. Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst.* 1968, 36–47 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1969, Abstr. No. 5B16. The binding energy and geometrical parameters of dimer mols. of alkali metal halogens were calcd. on the basis of the ionic model of a mol. with a variable repulsion coeff. ρ. Use of a variable ρ eliminated a series of contradictions, taking place as a result of calcn. with a const. ρ value. A simple ordinary valence system was used for evaluating the oscillation frequencies of dimer mols. Mol. consts. of all dimers of alkali metal halogens are recommended for calcg. thermodynamic functions.

NBRK

(D₂ колебрем)

C.A. 1969. 71. 22

отдел А-1307 1968

Димеры галог. щел. метал-лов

5 Б16. Молекулярные постоянные димерных молекул галогенидов щелочных металлов. Краснов К. С., Морозов Е. В., Тимошинин В. С., Данилова Т. Г. «Тр. Ивановск. хим.-технол. ин-та», 1968, юбилейн. вып., 36—47

На основе ионной модели молекулы с использованием переменного коэф. отталкивания ρ рассчитаны энергия связи и геометрич. параметры молекул димеров галогенидов щел. металлов. Применение переменного ρ устраняет ряд противоречий, имеющих место в результатах расчета с постоянным значением ρ. Простая валентная схема использована для оценки частот колебаний молекул димеров. Рекомендованы значения молек. постоянных всех димеров галогенидов щел. металлов для расчета термодинамич. функций. Резюме

X·1969·5

галогениды щелочных металлов

1968

47632j Rittner's theory of alkali halide molecules. Pandey, Jata D.; Gupta, Satya P. (Univ. Allahabad, Allahabad, India). *Univ. Allahabad Stud.* (*Chem. Sect.*) 1968, 7–16 (Eng). Calcns. are described for detg. the binding energy *Di* and the vibrational const. $\omega_e X_e$ of alkali halide mols. by using the Gaussian form of the repulsive term in the Ritner potential. The binding energy was also calcd. for inverse term Rittner potential. The results are compared with the exponential type of potential. The agreement between obsd. and calcd. values are fairly good for the new potential (Gaussian term Rittner potential). Peter Coad

D_0
$\omega_e X_e$
расчет

C.A. 1970. 72. 10

галогениды щелочных металлов

А-1301

1968

61059t Potential energy functions of diatomic molecules (halides and hydrides of the Groups IA and IIA). Szoke, S.; Baitz, E. (Hung. Acad. Sci., Budapest, Hung.). *Acta Chim. (Budapest)* 1968, 57(2), 129–40 (Eng). Values of the proportionality const. $d = k_e r_e/(e_1 e_2 D_e)^{1/2}$, where k_e = force const., r_e = interat. distance, e_1 and e_2 are the electronegativities of the individual atoms, D_e = dissocn. energy, were calcd. for alkali and alk. earth hydride and halide mols. The anal. deals with mols. in the gaseous state, which have predominantly ionic character. The interat. distances and dissocn. energies of the diat. mols. studied are generally large. The mean electronegativities and the force consts. have the lowest values in the diat. cases. The d values are independent of the ionic-covalent character, and are const. for certain groups of mols. Though the

ф-ции потенц. энергии

+2

С.А. 1969. 70. 1

Y

different mol. properties change gradually in accordance with a loosely defined relation of the periodic system, the ratio seems to remain const., depending only on the electrons participating in the bond. In the halide and hydride groups treated, the metal takes part with *s* or *sp* hybrid electrons in the bond, giving rise to linkages of *s-p* or *sp-p* and *s-s* or *sp-s* character. The *d* values depend preponderantly on the metal component, and it is nearly indifferent whether the partner is taking part in the bond with an *s* or *p* electron. The Lennard-Jones parameters, *a* and *ab*, are given. The assumption that the parameter *b* is a const. independent of bond type, was justified. Potential energy functions arising from different principles were compared. The E. R. Lippincott type functions (1953) are satisfactory in the ionic as well as in the covalent area. JDJN

Галогениды щел. мет-лов

1968

(дип. мом.)

126204z Dipole moments of alkali halides by the electric deflection method. Story, Troy L., Jr. (Univ. of California, Berkeley, Calif.). 1968, 143 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 69-15,008. From *Diss. Abstr. Int. B* 1969, 30(4), 1633.
SNDC

C. A. 1970. 72. 24

Галогениды щелочных металлов

1969

12 Д232. **Перезаселение в ходе химической реакции. Термическая диссоциация молекул галогенидов щелочных металлов.** Coplan M., Cernoch T., Berry R. S. Chemical overshoot thermal dissociation of alkali halide molecules. «Phys. Fluids», 1969, **12**, № 5, Part 2, 118—119 (англ.)

спектр

Излагаются результаты исследования механизма термич. диссоциации двухатомных молекул галогенидов щелочных металлов в атмосфере аргона за фронтом отраженной ударной волны методом абсорбционной спектроскопии. Снимались развертки спектров поглощения продуктов реакции при $T \sim 2800°$ К. Анализ этих спектров, содержащих главную серию линий нейтрального цезия и континуум фотоотрыва Br^- показал, что первичными продуктами диссоциации, в основном, являются ионы Cs^+

(+1) I

Ф. 1969 · 12Д

и Br^-. Отмечено, что поглощение в континууме Br^- сначала быстро достигает максимума, а затем спадает, приближаясь к равновесной величине, тогда как поглощение в линиях нейтрального атома цезия растет медленно и монотонно. Наблюдалось трехкратное превышение конц-ии ионов Br^- над равновесным значением. Время ион-атомной редаксации составляет примерно 15 μсек.

Н. А. Генералов

галогениды щел. мет. 1969

Межъядерные расстояния

9 Б862. Температурные коэффициенты и изменения межъядерных расстояний газообразных галогенидов щелочных металлов при различных температурах. Крестов Г. А., Клопов В. И. «Тр. Ивановск. хим.-технол. ин-та», 1969, вып. 11, 58—62

Разработан метод определения т-рных коэф. и изменений межъядерных расстояний газ. молекул, при помощи к-рого рассчитаны $(\partial r_T/\partial T)_p$ и Δr_T для 20 галогенидов щел. металлов в интервале т-р 298,15—3000° К. Обсуждена зависимость этих величин от т-ры, а также проведена сравнительная характеристика зависимостей $(\partial r_T/\partial T)_p = f(T)$ и $\Delta r_T = f(T)$ для одних и тех же соединений в кристаллич. и газ. состояниях. Резюме

X·1970·9

1969

10471s Temperature coefficients and internuclear distances changes of gaseous alkali metal halides at various temperatures. Krestov, G. A.; Klopov, V. I. (USSR). *Tr. Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst.* 1969, No. 11, 58–62 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1970, Abstr. No. 9B862. A method for detn. of temp. coeffs. and internuclear distance changes of gaseous mols. was developed with which $(\partial r_T/\partial T)_p$ and Δr_T (r = internuclear distance) were calcd. for 20 alkali metal halides at 298.15–3000°K. The dependence of these values on temp. was studied, and $(\partial r_T/\partial T)_p = f(T)$ and $\Delta r_T = F(T)$ dependences were comparatively characterized for the same compds. in cryst. and gaseous states.

C.A. 1971. 75. 2.

1969

Галогениды
щел. металлов

Структура

Лебедев В.И.

Ж. структ. химии,

1969, 10, № 2, 324.

(См. Гидриды щел. металлов) III

Галогениды щел. металлов

1969

(Do)

масс-спектр

72190w Mass spectra of ionic diatomic molecules. Nikolaev, E. N. (Nauch.-Issled. Khim. Inst., Leningrad, USSR). *Khim. Vys. Energ.* 1969, 3(6), 491–4 (Russ). The Franck-Condon principle was used to make a semiempirical calcn. of the relative intensity of the mol. ions in the mass spectra of alkali halide mols. Quant. ests. can be found for the temp. dependence of this intensity. The energies of dissocn. are calcd. for these mol. ions, and these are tabulated along with exptl. data.

GLJR

C.A. 1970. 72. 14

М Hal

Вр-4198-Х

1969

118261j Binding energy of diatomic alkali halide molecules. Pandey, Jata D. (Univ. Allahabad, Allahabad, India). *Indian J. Chem.* 1969, 7(3), 251–3 (Eng). Three different potential functions, viz (*1*) Gaussian, (*2*) Born and (*3*) Born-Mayer, in which the repulsion term is of the inverse power or exponential or Gaussian type, were employed for the calcn. of binding energy of alkali halide diat. mols. The Gaussian potential appears to be generally superior to the other 2 functions for these mols.

RCDR

М-щелочн. металл

энергия связи

С.А. 1969. 70. 26

Галогениды
щелочноземельных металлов (структура)
Окислы щелочн. металлов
Рамбиди Н.Г., А-1358
Ж. Физика. Структ. Химии, 1969, 10(1), 131

Молекулярная структура галогенидов щелочно-земельных металлов и окислов щелочных металлов

10 ТО 9 СА, 1969, 70, №22, 99777

хлориды щелочных металлов (расплав) спектр поглощ.

1969

11 Б230. Спектры поглощения и структура расплавленных хлоридов щелочных металлов. Смирнов М. В., Ченцова Г. В. В сб. «Физ. химия и электрохимия расплавл. солей и шлаков. Ч. 1». Киев, «Наук. думка», 1969, 45—49

В т-рном интервале 800—1000° измерены спектры поглощения (270—300 *нм*) бинарных расплавов смесей хлоридов щел. металлов (Na, K, Rb, Cs). Установлено, что длинноволновый край полос поглощения смещается с изменением т-ры, а также с изменением соотношения компонентов. Обнаруженные особенности спектров интерпретируется в предположении образования комплексных анионов MCl_4^{3-}, прочность к-рых уменьшается в ряду от $NaCl_4^{3-}$ до $CsCl_4^{3-}$. В. Т. Калинников

Х. 1970. 11

галогениды щелочных металлов

Вр-4856-Х 1970

20 Б68. Классическая модель для колебательно возбужденных галогенидов щелочных металлов. Grice R. Classical model for vibrationally excited alkali halides. «Molec. Phys.», 1970, 18, № 4, 545-552 (англ.)

Для предсказания дипольных моментов (μ) и вращательных постоянных (B) колебательно возбужденных галогенидов щел. металлов применяется классич. модель с использованием правила квантования Бора. Результаты расчета (вплоть до $V=25—100$) приведены на графиках для всех возможных молекул. Аналитич. аппроксимацию функций $\mu(v)$ и $B(v)$ дают след. выражения: $\mu-\mu_e=\mu_I(v+1/2)+\mu_{II}(v+1/2)^2$, $B-B_e=\alpha(v+1/2)-\gamma(v+1/2)$. Получено хорошее согласие между рассчитанными величинами μ_I, μ_{II}, α, γ и имеющимися (для $v<5$) их эксперим. значениями. Е. Андреев

м. р. диполь. мом.

X. 1970. 20

Галогениды щел. мет-лов ВФ-4856-Х 1970

колеб. мол.

Classical model for vibrationally excited alkali halides. Grice, Roger (Dep. Theor. Chem., Cambridge Univ., Cambridge, Engl.). *Mol. Phys.* 1970, 18(4), 545–52 (Eng). A simple classical model is employed to predict the expectation dipole moments and rotational consts. of vibrationally excited alkali halides. Results are given for all the alkali halides, and comparison with quantum calcns. (in the KX and CsX cases) and exptl. data show excellent agreement even down to low quantum nos. ($v < 5$). RCFS

вращ. мол.

C.A. 1970 · 72 · 24

1970

11 Д355. Видоизмененная форма потенциальной функции Риттнера для молекул галогенидов щелочных металлов. Gohel V. B. Modified form of Rittner's potential function for alkali hydride molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1970, 8, № 3, 139—141 (англ.)

Обсуждается точность простой потенциальной ф-ции Риттнера для молекулы галогенидов щелочных металлов. Ф-ция записана в виде суперпозиции кулоновского потенциала (ионная составляющая), экспоненциального потенциала отталкивания (эффект перекрывания) и поляризационного члена. Постоянные в двух последних членах рассматриваются как свободные параметры, определяемые по равновесному расстоянию, силовой константе и вращательной константе молекулы. Найденные таким путем ф-ции использованы для расчета констант ангармоничности ряда молекул. Расхождение между расчетом и экспериментом составляет менее 8%.

Е. Никитин

расчет м.м.

9. 1970. 11D

Щелочные металлы — галогениды.

1870

3 Б75. Электронное строение и динамический эффект Яна—Теллера R'-центров в галогенидах щелочных металлов. Inoue M., Sati R., Wang S. Electronic structure and the dynamic Jahn—Teller effect on R′ centers in alkali halides. «Can. J. Phys.», 1970, 48, № 14, 1694—1707 (англ.)

Эл. строение

Рассчитаны энергии основного и нескольких возбужденных состояний R'-центров в галогенидах щел. металлов типа NaCl. Использовалась модель, в к-рой R'-центр представлялся квазинепрерывной совокупностью F-центров. Установлено, что основное состояние обладает симметрией $^3A_2$, а первым возбужденным состоянием, в к-рое разрешен оптич. переход, является дважды вырожденное состояние ^3E. Общая форма полосы R'-центра объяснена динамич. эффектом Яна — Теллера в состоянии ^3E.

А. А. Зембеков

Х. 1971. 3

1970

MeHal
(Me = щел.
мет.)

межат.
взаимод.

6 Д157. Потенциальные функции межатомного взаимодействия для галогенидов щелочных металлов. Redington Richard L. Internuclear potential energy functions for alkali halide molecules. «J. Phys. Chem.», 1970, 74, № 1, 181—186 (англ.)

Приближенная межъядерная потенц. ф-ция для ионных двухатомных молекул имеет вид:

$$V = A\exp(-r/\rho) - e^2\left[\frac{1}{r} + \frac{\alpha_1+\alpha_2}{2r^4} + \frac{2\alpha_1\alpha_2}{r^7}\right] - \frac{C}{r^6}.$$

газе.

09. 1970. 6Д

Она содержит электростатич. и ван-дер-ваальсовское притяжение и борн-майеровский отталкивательный потенциал. Хафмейстер и Захрт (РЖФиз, 1968, 3Е14) получили значения ρ для двадцати галогенидов щелочных металлов из ур-ния $A\exp(-r/\rho)=K\Sigma S^2/r$, где S— интеграл перекрытия наружных электронов, вычисленный с волн. ф-циями свободных ионов. В работе показано, что эти значения ρ очень хорошо воспроизводят спектроскопич. данные, когда они используются в потенц. ф-ции $V_r=A_1\exp(-r/\rho)+A_2\exp(-r/2\rho)+A_3\times\times\exp(-r/3\rho)$. Коэф. A_i связаны простым соотношением с эффективным зарядом и эффективным расстоянием. Эти соотношения включают четыре параметра для двадцати молекул. Полученные с помощью этих соотношений спектроскопич. константы имеют следующие средние ошибки: r_e (2%), D_e (3%), ω_e (6%). Борн-майеровский потенциал наиболее хорошо описывает молекулы, в которых ионы имеют сходные размеры и атомные числа, т. е. NaF или KCl, но плохо описывает молекулы, в которых ионы сильно отличаются по размерам и атомным числам, т. е. LiJ или CsF. А. П. Калинин

Молекулы щелочных металлов

59258e Internuclear potential energy functions for alkali halide molecules. Redington, Richard L. (Dep. of Chem., Texas Tech. Univ., Lubbock, Tex.). *J. Phys. Chem.* 1970, 74(1), 181–6 (Eng). Hafemeister and Zahrt have obtained values for ρ for 20 diat. alkali halide mols. by fitting the equation $A \exp(-r/\rho) = K\Sigma S^2/r$, where S is the overlap of the outer shell free ion wave functions. These ρ values reproduce the spectroscopic data very well when used in an overlap potential energy function of the form $V_r = A_1 \exp(-r/\rho) + A_2 \exp(-r/2\rho) + A_3 \exp(-r/3\rho)$. The coeffs., A_1, correlate simply with effective charge and effective distance parameters that are independent of the data. The correlation requires 4 parameters for the 20 mols. and returns 60 spectroscopic consts. with approx. the following av. errors: r_e (2%), D_e (3%), ω_e (6%). The overlap potential function suggests that the simple Born-Mayer expression holds best with ions of similar size and at. no., e.g., NaF or KCl, but is poor for dissimilar ions, e.g., LiI or CsF.

RCKG

хим. св-ва

C.A. 1970 72, 12

галогениды щелочных металлов

потенц. кривые

1970

13 Б41. Потенциальные кривые для молекул галогенидов щелочных металлов. Redington Richard L. Internuclear potential energy functions for alkali halide molecules. «J. Phys. Chem.», 1970, 74, № 1, 181—186 (англ.)

Предложено четырехпараметрич. выражение для обменной части потенциала взаимодействия галоидов с атомами щел. металлов. При этом спектроскопич. св-ва двадцати молекул описываются с точностью 2—6%.

С. Я. Уманский

X. 1970. 13

LiF Saito H., Saito S. 1970

J. Phys. Soc. Jap., 1970, 28[3], 699

Спектры поглощения ~~[illegible]~~ ~~[illegible]~~ фторидов щел. металлов в электронной области спектра. Определены спектры поглощ. LiF, NaF, KF, RbF и CsF при комн. т-ре в обл. 500 - 1000 Å.

Галогениды щелочных металлов.

1971

8 Д310. Пересечение потенциальных кривых при диссоциации галогенидов щелочных металлов, обусловленной столкновением. Ewing J. J., Milstein Richard, Berry R. Stephen. Curve crossing in collisional dissociation of alkali halide molecules. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 4, 1752—1760 (англ.)

Изучен процесс диссоциации галогенидов щелочных металлов в аргоне с целью выяснений, приводит ли диссоциация, обусловленная столкновением, к возникновению ионов и атомов или смеси обоих видов продуктов. Метод измерения основан на изучении временного спектра поглощения паров, нагретых с помощью ударной волны (падающая ударная волна обеспечивает получение паров галогенидов щелочных металлов, а в отраженной волне происходит диссоциация). Представлены эксперим. данные, показывающие, что галогениды

Диссоциация

Ф. 1971. 8Д

(+1) I

Cs, Rb и K, за исключением двух соединений с йодом диссоциируют в основном с образованием ионов; соли лития, а также NaJ и NaBr диссоциируют в основном с образованием атомов; другие галогениды (KJ, RbJ, NaCl и возможно NaF) диссоциируют с образованием смеси ионов и атомов. Отношение числа пар атомов к числу пар ионов интерпретируется в зависимости от эффективной ширины адиабатич. канала диссоциации. Измерения были выполнены для нескольких величин давлений и т-р для большинства из вышеупомянутых солей. Первичный механизм диссоциации не зависел от величины давления и т-ры (исключением является NaCl).

А. П. Калинин

Галогениды щелочных металлов

от. А-1747 1971

5 Б79. Энергии основного колебательного уровня в молекулах галогенидов щелочных металлов. Tantti-la W. H. Fundamental vibration energies in alkali halide molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 39, № 1, 168—170 (англ.)

Предложен приближенный метод расчета основных частот колебаний молекул галогенидов щел. металлов, потенциал взаимодействия к-рых состоит из кулоновского притяжения и короткодействующего отталкивания; последнее в рамках предлагаемой модели заменяется потенциалом жесткой стенки при равновесном расстоянии r_e. Строя касательную к кулоновской части потенциала в точке r_e и отражая ее в вертикальной прямой, проходящей через r_e, получают модельный потенциал, составленный из этих двух пересекающих прямых. Полученный потенциал аппроксимируется параболой, определяющей частоту ω_e осциллятора. Найденные величины ω_e сравниваются с лит. данными. А. Зембеков

ир

X-1972-5

Галогениды щелочных металлов

отчет А-1747 1971

энергии колеб. сост.

65962u Fundamental vibration energies in alkali halide molecules. Tanttila, W. H. (Dep. Phys. Astrophys., Univ. Colorado, Boulder, Colo.). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 39(1), 168–70 (Eng). Energies of the low-lying vibrational states of ionic alkali halides mols. are well predicted by using an harmonic potential not fitted to the Morse potential. The model approximates the form of the repulsive potential as an infinite potential barrier and enables one to calc. simple the force consts. or energies of the 1st excited vibrational states of the mol. The model assumes that, for an object trapped by a short-range and a long-range potential, the oscillation frequency is detd. primarily by the long-range potential.

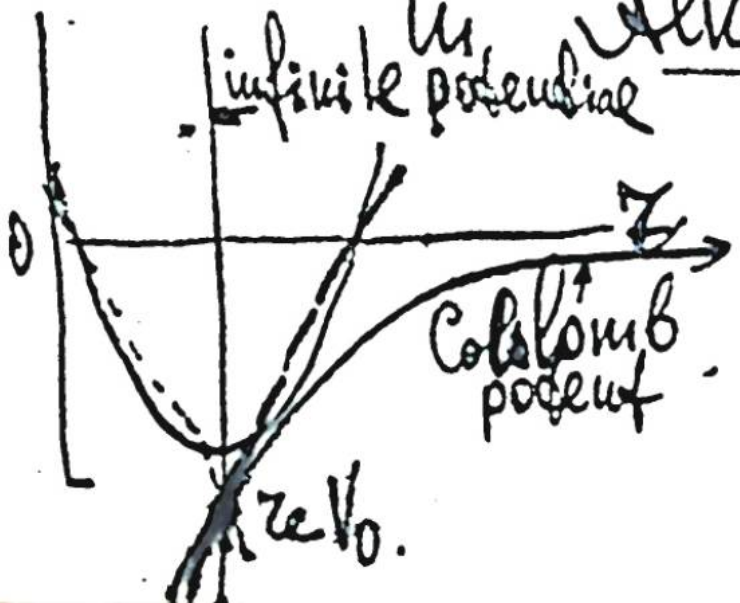
С.А. 1971. 75 8

Пех
Молекул.эн.
Х-галоген.

Tandtila W.H. 1971

J. Mol. Spectr. 1971, 39 (1), 168-170

Fundamental Vibration Energies in Alkali Halide Molecules.



$$\omega_e = \frac{6260{,}4}{\sqrt{r_e^3 \mu}}$$

r_e [Å]

μ - приведенная масса

для ионных молекул, ^{12}C

Курс показал, что низкие колеб. сод. мол-л могут быть приведены
с хорошей точностью при использовании гармонического
осциллятора на язе. Колебательном модуле. Модель имеет
то преимущество, что она будет приближенно для образования
потенциала как infinite почеш. бувер и позволяет посчитать
сих. нач. или энергии первых колеб. содержит мол.

Приведены -- расч. и измер. значения на Dal

RbBr
RbCl
RbJ
NaBr
NaJ
NaCl
KCl
KBr
KF
KJ

TlBr
TlCl
TlF
TlJ
CsBr
CsCl
CsF
HBr
HCl
HJ
LiBr LiJ

Галогениды щел. металлов

1971

Диссоциация

16 Б96. **Исследование диссоциации галогенидов щелочных металлов при столкновениях в скрещенных молекулярных пучках.** Tully F. P., Lee Y. T., Berry R. S. Crossed molecular beam study of collision—induced dissociation of alkali halides. «Chem. Phys. Lett.», 1971, 9, № 1, 80—84 (англ.)

Методом скрещенных молек. пучков исследована энергетич. зависимость сечения диссоциации молекул CsJ, CsBr и RbJ на ионы при столкновениях с атомами Xe. Т-ра термич. пучка молекул варьировалась в интервале 1160—1650° K, а энергия атомов Xe в сверхзвуковом пучке достигала 11 *эв*. Сечения диссоциации резко возраста-

X. 1971. 16

ют от порогов, равных энергиям образования ионных продуктов, и достигают величины ≈ 10 А^2 при избытке энергии над порогом 1 *эв*. При фиксированной энергии налетающих атомов Хе сечение резко зависит от т-ры, если относит. энергия близка к пороговой. Обращение приблизительно экспоненциальной т-рной зависимости сечения позволяет построить энергетич. зависимость сечения диссоциации от внутренней энергии молекулы. Эта зависимость оказывается более крутой по сравнению с моделью жестких сфер. Приближенный анализ фрагмен-

---

тов диссоциации по энергиям показывает, что в диссоциацию большой вклад вносят неколинеарные столкновения, причем удар со стороны легкого атома молекулы более эффективен в индуцировании диссоциации.

Е. Никитин

ΔH, Do (изомеризация) 10б. 1972

Н-2071

Bhattacharyya S., Bhaumik A.,
Int. J. Quantum Chem., 1972, 6,
N5, 935-48 (англ.)

Theoretical calculations on sigma-systems. III. Alkyl halides and alkanes. 6

10, 11 (Ф)

(см. оригинал) CA, 1972, 77, N20, 130910x

щелочные, галогениды. 1972.

158264p Thermodynamic functions and molecular parameters of orthorhombic dimeric molecules of alkali metal halides. Krasnov, K. S.; Solomonik, V. G.; Morozov, E. V. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Teplofiz. Vys. Temp.* 1972, 10(4), 760–4 (Russ). The mol. parameters of orthorhombic alkali halides M_2X_2 were detd. and the thermodynamic functions of the gaseous phases were calcd. at 298–5000°K. Internuclear distances r_{MX} were calcd. by $r_{MX} = 1.075r_e$ (internuclear distance in diat. mol.) which is true for Li_2X_2. Vibrational frequencies were evaluated by the model of valence forces. The frequency of normal vibrations of 20 M_2X_2 mols. were calcd.

молек. парам.

Т.д.ф.

(+1)

С.А. 1972. 77. N 24.

Щелочн. галоген.

1972

9 Б152. Линейная экстраполяция уровней колебательной энергии ионных молекул. Patel M. M., Gohel V. B. Linear extrapolation of the vibrational energy levels of ionic molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1972, 10, № 6, 476—477 (англ.)

Для ряда двухатомных молекул галогенидов щел. металлов вычислено отношение D_i/D_{lin}, где D_i — энергия диссоциации на ионы $D_i = D_0 + I - E$ (D_0 — энергия диссоциации молекулы на нейтр. атомы, I — потенциал ионизации атома металла, E — сродство к электрону атома галогена), $D_{lin} = \omega_e^2/4\,\omega_e x_e - {}^1/_2\,\omega_e$ — величина энергии диссоциации молекулы, вычисленная путем линейной экстраполяции колебательных уровней энергии. Для большинства молекул галогенидов щел. металлов, кроме RbF (I) и CsF (II), отношение D_i/D_{lin} найдено равным ~2,4. Для I и II это отношение равно 1,0. Предположено, что небольшие отклонения для отношения D_i/D_{lin} от величины 2,4 связаны с неопределенностями в эксперим. значениях D_e и E, а большие отклонения для I и II связаны, по-видимому, с ошибками в эксперим. значениях ω_e и $\omega_e x_e$. А. П. Александров

X. 1973. № 9

ВР-7592-Х

2х ат. щелочн. галогениды

1972

NaCl

кривые потенц. энерг.

4 Д143. Кривые потенциальной энергии для двухатомных галогенидов щелочных металлов. Patel M. M., Gohel V. B. Potential energy curves of alkali halide diatomic molecules. «Z. Naturforsch.», 1972, 27a, № 8-9, 1227—1228 (англ.)

По методу Ридберга—Клейна—Риса с использованием известных спектроскопич. данных сконструированы кривые потенц. энергии для молекулы NaCl и других двухатомных галогенидов щелочных металлов. Эти потенциалы сравниваются с шестью различными эмпирическими потенц. ф-циями, наиболее часто используемыми в практике. Найдено, что наилучшим образом сконструированные потенциалы совпадают с модифицированным потенциалом Ритнера $(-e^2/r)+A\exp(-r/\rho)-(\alpha/r^4)$.

Б. Ф. Горднец

Ф. 1973 N 4

Щелочн., фториды 1972.

10 В16. О линейных димерах фторидов щелочных металлов. (Энергетика и строение). Морозов Е. В., Соломоник В. Г., Краснов К. С. В сб. «III Всес. симпоз. по химии неорган. фторидов, Одесса, 1972». Б. м., 1972, 30—32

X. 1973. N 10

Вычисление ионизац. пот. 2-х ат. молекул

Do, Vi, см. п. разём

Sarma C.R., (R-1980) 10

J. Phys. B: Atom and Mol. Phys., 1972, 5, N4, 761-765 (англ.)

Semiempirical evaluation of single bond properties in diatomic molecules.

Рис Хим, 1972, 19527 (см. оригинал) 10

1972

Щелочные галогены.

1973.

L. Andrews.
R. Smardzewski

(Ionic dipol. mom.)

„J. Chem. Phys." 1973, 58, N 6, 2258-61.

30717.8866
TE,Ch

Щелочные галог.

(М.Н) 40.92

Ц-1052

Brumer P., Karplus M.

Perturbation theory and ionic models for alkali halide systems. I. Diatomics. "J.Chem.Phys.",1973,58,N 9, 3903-3918

(англ.)

0917 ПИК

895 896 9 1 0

ВИНИТИ

Молекулы хим. свя., галогенов и H_2 (м.м. Te, Do)

A-2588

Hooydonk G. van,
Z. Naturforsch., 1973, 28a,
N 11, 1836-42

по оригинал

1973

Фториды щелочных металлов.

Kushawana V.S.

„Indian J. Pure and Appl. Phys."

оптические свойства

1973, 11, N1, 63-66.

(см. F; III);

M_2X^+, M_2X (I, потенц. кривые) 1973

M – щелочн. металл

X – галоген

А-223

Lin S.M., Whanton J.G., Grice R.,

есть ф.к

Mol. Phys., 1973, 26, N2, 317-328 (англ.)

10

Potential energy surface for the M_2X^+ ion and the ionization potentials of M_2X.

РжХим, 1974, 4Б23 10 (ан. оригинал)

Самосогласованные щелочных металлов (функция потенц. энергии) 1973

Misra K.D., Sharma M.N., A-2156

Z. Phys. Chem. (Frankfurt am Main), 1973, 83, N1-4, 188-99 (англ.)

Ionic Rydberg function for alkali halides.

ЕСТЬ Ф. Н.

10 Ф (см. LiF, ш)

(см. оригинал) CA, 1973, 78, N22, 141315d

Моногалогениды и моно-
гидриды IA и IIIA групп (М.п, библиогр.) 10,15 б. 197

Miller C.E., Finney A.A., Inman F.W.,

Atom. Data, 1973, 5, N1, 1-49 (англ.)

Rotational and hyperfine structure constants for groups IA and IIIA monohalide and monohydride molecules

10 (ф)

Рж Хим, 1973, 18Б231 (см. оригинал,

14-2091

Галогениды щел. эл-тов (ф-ции потенц. энерг.) 1973

А-2240 Ку-1731

10 вып

Patel M.M., Gohel V.B., A-2240

Indian J. Pure Appl. Phys., 1973, 11, N1, 60-1 (англ.)

Varshni and Shukla's potential energy functions for alkali halide diatomic molecules.

по Ренду

Ю Ф (см. оригинал) ЕРТ CA, 1973, 79, N8, 46027y

Галогениды щелочн. металлов

1973

36917z Covalent character of alkali metal halides from x-ray photoelectron [XPS] spectroscopy. Parry, D. E.; Tricker, M. J. (Edward Davies Chem. Lab., Univ. Coll. Wales, Aberystwyth, Wales). *Chem. Phys. Lett.* **1973**, 20(1), 124–6 (Eng). A simple anal. of XPS data yields partial charges on atoms within a solid sample. A knowledge of abs. binding energies is unnecessary. Results for some alkali metal halides are presented.

9-1169

*

С.А. 1973. 79 N 6

Щелочные, галогениды 1973

расчет

12 Б18. Расчет галогенидов щелочных металлов с помощью модели зарядов связей. Ram R. S., Upadhya K. N., Mishra P. C. Bond-charge model calculations on the alkali halides. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1973, 11, № 5, 351—353 (англ.)

Исследована предложенная ранее модель эффективных зарядов связей (см. РЖХим, 1969, 9Б20), позволяющая определить эффективные значения заряда связа q и спец. параметра ν, характеризующего длину связи, на основе теоремы вириала и простых электростатич. соображений. Параметры q и ν, однозначно определяемые по значениям равновесных межъядерных расстояний, частот основных колебаний и дипольных моментов, рассчитаны для двухатомных молекул галогенидов щел. металлов. Отмечено, что при фиксированном атоме металла имеется линейная зависимость между дипольным моментом и величиной q. Кроме того отмечена закономерность изменения q с ростом ионного характера связи.

В. И. Пупышев

Х. 1974 №12

Li_3Cl_3; Li_3Br_3;
Na_3F_3; Na_3Cl_3; Na_3Br_3;
Na_3I_3; Tl_3F_3; Tl_3Cl_3; Tl_3Br_3; Tl_3I_3

(Vi₂ терм. ф-ции)

1973

I 790

Соломоник В. Г., Данилова Т. Г.,

Ж. общ. хим., 1973, 43, N4, 1063 (русск.)

Колебательные постоянные и термодинамические функции неорганических трансферов типа M_3X_3 (M = литий, натрий, ..., таллий, X = галоген).

ЕА, 1973, 79, N6, 35Ф43с

10

(3)

Li_2F; Na_2Cl; RbKCl; LiKBr (потенц. поверх.) 1973

Struve W.S., ; 8232

Mol. Phys., 1973, 25, N4, 777-803 (англ.)

Semiempirical pseudopotential surfaces for chemical reactions. $(AB)^+X^-$ dialkali halide systems.

10 Ф (~~лег. примеч.~~) CA, 1973, 79, N20, 118461k

Галогениды щелочн. металлов. 1973

8 Д161. **Новый потенциал взаимодействия для двухатомных молекул галогенидов щелочных металлов.** Thakur K. P. New interaction potential for diatomic alkali halide molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1973, 11, № 8, 549—551 (англ.)

потенциал взаимод.

Показано, что предложенный ранее потенциал (M. M. Patel, V. B. Cohel, M. D. Trivedi, «Chem. Abstr.», 1968, 68, 6411) неправильно описывает внутримолекулярное взаимодействие для молекул галогенидов щелочных металлов. Для описания этого взаимодействия предложен новый потенциал

$$U = \frac{e^2}{r} + C \ln\left(1 + \frac{P}{r^4}\right),$$

где r — расстояние между взаимодействующими ионами, C и P — константы. Величины энергии связи и сродства к электрону атомов галогенов, вычисленные с использованием этого потенциала, находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Б. Ф. Гордиец

Ф. 1974. N 8

галогениды щелочн. металлов 1973

ф-ции потенц. энергии

74481f New interaction potential for diatomic alkali halide molecules. Thakur, K. P. (Chem. Dep., Allahabad Univ., Allahabad, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1973, 11(8), 549-51 (Eng). The modified Gaussian potential function given by M.M. Patel, et. al, (1968) leads to variations of the potential energy, and the force between 2 unlike ions as functions of the internuclear distance that are unacceptable for the alkali halide molecules. As an alternative to this function, a new repulsive term, $C\ln[1 + (p/r^4)]$ (C and p are consts.), is proposed to describe the repulsion of the nuclei in diat. alkali halide molecules. This new function leads to potential-energy and force curves that are acceptable for the alkali halides. The values of the binding energies of the alkali halide molecules and the electron affinities of the halogen atoms calculated with this new potential agree satisfactorily with the experimental values.

С.А. 1974. 80. N14 оригин.

A-2583 1973

Do (расчёт для галогенидов щел. металлов)

Гиоу I.J. по всем !!

Phys, Rev. A: Gen. Phys, 1973
8, N2, 612-20

10
сеть ф.л.

Галогениды 2х атомн. щелочн. металлов 1974

159151u **Combination rules and correlations in repulsive potential parameters for alkali halide diatomics.** Brumer, Paul (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *Phys. Rev. A* 1974, 10(1), 1-8 (Eng). The repulsive-interaction parameters, of the 2 previously described (B. and M. Karplus, 1973) model potentials for diat. alkali halide mols. (MX), were formulated in terms of the contributions (ρ_i) of the individual ions. The ρ_i values correlate linearly with the position of the outermost peak of the electron-d. distribution of the ion. A similar trend is observed in the single-ion contributions to the range parameter for the square of the M-X overlap. The ρ_i values differ for the 2 models, although the combination rules are equally well obeyed. Single-ion contributions to the preexponential factors, soft-sphere radii, and repulsive interaction potentials for M-M and X-X are briefly discussed.

C.A. 1974 81 N 24

Галогениды щелочных металлов 1974

4 Б79. Комбинационные правила и корреляции для параметров отталкивательных потенциалов галогенидов щелочных металлов. Brumer Paul. Combination rules and correlations in repulsive potential parameters for

ж. 1975. N 4

alkali halide diatomics. «Phys. Rev. A: Gen. Phys.», 1974, 10, № 1, 1—8 (англ.)

Рассмотрены возможности комбинац. представления параметров отталкивательной части потенциалов взаимодействия галогенидов (X) щел. металлов (M) для двух типов потенциалов $V_{MX}^{T\text{-Ritt}}(R) = A_{MX}\exp(-R/\rho_{MX}) - 1/R - (\alpha_M + \alpha_X)/2R^4 - C_{MX}/R^6$ и $V_{MX}^{DD}(R) = [A'_{MX} + B_{MX}(\alpha_X - \alpha_M)/2R^2]\exp(-R/\rho'_{MX}) - 1/R - (\alpha_M + \alpha_X)/2R^4 - C_{MX}/R^6$. В обоих случаях можно представить параметр в экспоненте ρ_{MX} (или ρ'_{MX}) в виде суммы членов, относящихся к индивидуальным ионам $\rho_M + \rho_X$, причем каждое слагаемое коррелирует с величиной ионного радиуса. Предэкспоненциальный параметр A_{MX} (или A'_{MX}) можно представить в виде $A_{MX} = \sqrt{A_{MM}A_{XX}}$. Представить столь же простым образом. коэф. B_{MX} не удается.

А. В. Немухин

(фотоэлектр. спектр) 1974.

Щелочные галогениды A-2683

Berkowitz J., Dehmer J.L.,
Walker T.E.H.,
J. Electron. Spectrosc. Relat.
Phenomena, 1974, 3 (4), 323-5.
Photoelectron spectra of alkali
halide vapors.

есть ф.к

(см. оригинал)

C.A. 1974. 80. N24. 139213s Ю Ф

Ионные молекулы щел. галоген. 1974

потенц. кривые

2 Д95. Использование аппроксимант Паде для построения диабатических кривых потенциальной энергии ионных молекул. Jordan K. D., Kinsey J. L., Silbey R. Use of Pade approximants in the construction of diabatic potential energy curves for ionic molecules. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 3, 911—917 (англ.)

Описан метод построения диабатических потенц. кривых ионных молекул (галогенидов щелочного металла), использующий аппроксиманты Паде и ограниченное число первых коэф. разложения потенциала по Данхэму. Анализ пересечений термов не проводится, продуктами диссоциации молекул считаются ионы. Проведено сравнение результатов вычислений следующих коэф. Данхэма и энергий диссоциации ионных молекул с аппроксимантами Паде разных порядков и с результатами экспериментов и других модельных расчетов. Предложенный метод сопоставлен с имеющимися методами построения потенц. кривых ионных молекул. А. Радциг

Ф. 1975. N2

Щелочные галогениды 1974

11 Д724. Спектры хемилюминесценции в реакции щелочных металлов с галогенами. Oldenborg R. C., Gole J. L., Zare R. N. Chemiluminescent spectra of alkali-halogen reactions. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 10, 4032—4042 (англ.)

спектры хемилюминесценции

(см. на обороте)

9. 1974. N 11

С высоким разрешением (<5 А) получены спектры хемилюминесценции (ХЛ) реакций типа M_2+X_2 (или XY)$\rightarrow MX^*+MX$ (или MY), где M=K, Rb, Cs; X_2(XY)= $=Cl_2$, Br_2, J_2, JBr, JCl, ClF; при этом пучок атомов M (содержащий и молекулы M_2) проходил сквозь газообразный галоген при давлении $\sim 10^{-3}$ мм. Спектры (в видимой области) интерпретированы как переходы между связанными или квазисвязанными колебательными уровнями гомеополярного верхнего состояния, имеющего неглубокую потенц. яму, и верхними колебательными уровнями ионного основного состояния. Обсуждается четырехцентровый механизм данных реакций. Наблюдается также испускание атомов M, механизм возбуждения которого скорее всего отличается от такового для молекулярной ХЛ. И атомная, и молекулярная ХЛ согласуются с механизмами, включающими перескок электрона.

Резюме

40906.1870
Ph, TC, Ch

Щелочные галогениды 40892 02

1974
2365

Ormerod R.C., Powers T.R., Rose T.L. Molecular-beam photodissociation studies of alkali iodides.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 12, 5109-5111

(англ.)

0186

ВИНИТИ

152 156

2х атомн. мол-лы 8540-Х 1974

межатомные потенциалы

потенциал взаимодействия

168765r Interaction potential for diatomic molecules. Thakur, Kailash P.; Pandey, Jata D. (Dep. Phys. Chem., Univ. Allahabad, Allahabad, India). *J. Chim. Phys. Physicochim. Biol.* 1974, 71(6), 850-3 (Eng). The proposed new potential-energy function, $U(r) = -(e^2r) + C \log[r/(4r - p)]$ (r = internuclear sepn., e = electronic charge, C and p are consts.), satisfactorily describes the potential-energy and force curves of the alkali halide mols. The binding energies, electron affinities, Grueneisen parameters, and Anderson-Grueneisen parameters of the alkali halides that were calcd. by using the relation agreed satisfactorily with the available exptl. data.

Вр-8540-Х

C.A. 1975. 83 N20

Галогениды щелочных металлов 1974

пар. потенц.

V35223v Interionic pair potentials in the alkali metal halides. Woodcock, Leslie V. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1974, 70(8), 1405–11 (Eng). A generalized 3-term pair potential, corresponding to a simple polarizable-ion mode, was used to parametrize exptl. data for gaseous alkali metal halide ion pairs. The repulsive core potential was much harder than that normally used in semiempirical effective pair potentials from crystal data. The derived lattice potential energies and their 1st 2 derivs. with respect to vol. agreed with exptl. results.

С.Х. 1975, 22, 16

Дигалоген. щ.-зем. переходн. металлов II B, VA, Eu. 1974

Структ. параметры

149196c **Geometry of some metal halides.** Yarnell, P. A. (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, Calif.). *Report* 1973, LBL-1973, 202 pp. (Eng). Avail. Dep. NTIS. From Nucl. Sci. Abstr. 1974, 29(3), 7443. Two polarizable-ion models were developed to describe metal dihalide mols. in the gas phase. Both models use electrostatic and repulsive interactions to predict mol. geometries and mol. consts. The 1st model was applied to the dihalides of the alk. earths, Group IIB metals, transition metals, Group IVA metals, and Eu. In addn. to the mol. geometry, bending frequencies were derived for most of these mols. The 2nd or "linear" model was applied to the alk. earth dihalides; equil. internuclear bond lengths, stretching force consts., and stretching frequencies were detd.

(+1) Eu

см. ориг. (инф. больше нет в сист.)

C.A. 1974. 80. N 26

Щелочные галогениды

отчет 3156 1975

Finn E. J

J. Chem. Phys., 1975

62 N5, 1842-46.

(м.п. расчет потенц. эн.)

(см. пот. эн. 2х ат. молекул)

Щелочные галогениды 1975
(молекул. пучки)

85: 37444d Molecular beam scattering from clean surfaces of alkali halides.—Meyers, Jeffrey A., (Pennsylvania State Univ., University Park, Pa.). 1975. 97 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 76-10,764. From *Diss. Abstr. Int. B* 1976, 36(11), 5653.

C.A. 1976 85 N 6

Щелочные металлы 1975

галогениды

8 Д371. Фотоэлектронные спектры бромидов и йодидов щелочных металлов. Poole R. T., Leckey R. C. G. Jenkin J. G., Liesegang J. A photoelectron study of the alkali bromides and iodides. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 31, № 2, 308—311 (англ.)

фотоэл. спектры

Получены точные значения энергий связывания для полос внешних электронов бромидов и йодидов щелочных металлов с использованием УФ-фотоэлектронной спектроскопии (УФ-фотоны — 40,81 эв). Сделаны поправки на релаксационные эффекты и получено хорошее соответствие с борновской моделью ионных твердых тел как в величинах абс. значений энергий связывания, так и в величинах энергетич. зазоров между полосами внешних валентных электронов. Библ. 10.

Ф 1975 N8

50410.3699

Ch,Ph,TC

40892

Целочисленное разложение

1975

3165

До потенц. энерг.

Thakkar Ajit J.

A new generalized expansion for the potential energy curves of diatomic molecules.

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N 5, 1693-1701 (англ.)

0341 ПРИК

314 317 335

ВИНИТИ

$M^+HBr_2^-$ —

M^+HClBr^- —

(ν₂)

(в. с матрица)

M = щел. металл

ХИ-12431 1976

84: 128346u **Infrared spectra of the $M^+HBr_2^-$ and the M^+HClBr^- ion pairs and their deuterium analogs isolated in argon matrices at 15 K.** Ault, Bruce S.; Andrews, Lester (Dep. Chem., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(5), 1986–93 (Eng). The matrix reactions of alkali bromide salts and HBr and DBr were investigated in argon matrices. In each case, an intense band was obsd. from the reaction product, which was assigned to the antisymmetric stretch, ν_3, of the HBr_2^- anions in the $M^+HBr_2^-$ and $M^+DBr_2^-$ ion pairs. Comparisons to literature spectra, in conjunction with quartic deuterium shifts, indicate that the anion has a linear, centrosymmetric geometry in the isolated ion pair. A less intense band was also obsd. which has been assigned to the combination band $\nu_1 + \nu_3$ for the HBr_2^- anion. Reaction of alkali bromide salts with HCl and alkali chloride salts with HBr were shown to yield identical absorptions for the M^+HClBr^- ion pairs. The spectra suggest that both type I and type II $HClBr^-$ anions exist, and the resulting form may be detd. by cation position.

C.A. 1976 84 N 18

Шевчук. Шмидт 1976

$M^+F_3^-$

(Vi, спектр)

84:142801y Matrix reactions of alkali metal fluoride molecules with fluorine. Infrared and Raman spectra of the trifluoride ion in the $M^+F_3^-$ species. Ault, Bruce S.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *J. Am. Chem. Soc.* 1976, 98(6), 1591-3 (Eng). The reaction of alkali fluoride salt mols. with F_2 in argon matrices has produced a single sharp, intense ir band at 550 cm^{-1}, with a strong Raman counterpart band at 461 cm^{-1}. Through analogy to previous salt-mol. reactions, and using KrF_2 as a model compd., these 2 bands were assigned to ν_3 and ν_1 of the F_3^- anion in the $M^+F_3^-$ pair. Mutual exclusion between the ir and Raman spectra indicates a center of symmetry for the anion, in a $D_{\infty h}$ geometry, and a lack of shift of band position with the different cations indicates a pure fluorine vibrational mode in a distinct trifluoride anion.

C.A. 1976 84 N20

Brumer Paul, Karplus Martin.

Erratum: perturbation theory and ionic models for alkali halide systems. II. Dimers. "J. Chem. Phys.", 1977, 66, N3, 1388 (англ.)

Исключено
заключено

[отмена 8783]

~~1970~~
мая 1975

обзор

Berkowitz J.

(обзор)

High Temperature UPS Studies and Other Variations.

p 355 – 433.

Димеры щел. галогенидов 1976

85: 130812g **Perturbation theory and ionic models for alkali halide systems. II. Dimers.** Brumer, Paul; Karplus, Martin (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1976, 64(12), 5165–78 (Eng). Contributions to the potential energy of alkali halide dimer systems (MXM'X') and the assumptions inherent in ionic models commonly used to describe dimer structure are analyzed using exchange perturbation theory. Numerical results demonstrate that no simple ionic model satisfactorily accounts for all available exptl. data. The perturbation theory approach suggests the incorporation of many-body terms, 1st order in the potential and 2nd order in the overlap, as the 1st correction necessary to account for the exptl. results. The need for further theor. work on many-body contributions and exptl. work on dimer properties is emphasized.

кат. нов. отдел

ВР-9977-1
Ж-1
Ж-14434

Р.А. 1976 85 N 18

Щелочные галогениды 1976

Вр-9477-Х

Ф.Ж.М.; 1-Х-Б-14413

1 Б69. Теория возмущений и ионные модели для систем галогенидов щелочных металлов. II. Димеры. Brumer Paul, Karplus Martin. Perturbation theory and ionic models for alkali halide systems. II. Dimers. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, № 12, 5165—5178 (англ.)

Предложенная ранее схема обменной теории возмущений применена для описания димеров галогенидов щел. металлов типа MXM′X′ и уточнена путем учета многочастичных эффектов в первом порядке по потенциальной энергии и во втором — по перекрыванию. Рассмотрены многочисленные ионные модели, предложенные различными авторами для данных димеров. Найдено, что ни одна из ионных моделей не согласуется с совокупностью эксперим. данных. По обменной теории возмущений вычислены различные характеристики (геометрич. параметры, энергии диссоциации, частоты нормальных колебаний) для 20 симм. димеров типа MXMX. Отмечается, что результаты носят предв. характер, т. к. расчетный метод нуждается в уточнениях, а для развития теории необходимы более подробные эксперим. данные. Сообщ. I см. РЖХим, 1973, 20 Б24. Т. К. Ребане

(+1) Ежегод.

Х.1977 N1

60712.1810
TC, Ch, Ph

Целочисл.
Целочисл.
96200

1976
4381

Holmlid Leif. Rynefors Kjell. Absolute complex formation cross sections for alkali-alkali halide collisions: a Monte Carlo trajectory study.
"Chem. Phys.", 1976, 14, N 3, 403-412
(англ.)

0658 ЯИК

635 636 650

ВИНИТИ

60601.7631
Ch, Ph, TC

42530
Щелочн. галоид.

1976
S-13141

Jain J.K., Shanker Jai, Khandelwal D.P. Evaluation of Van der Waals dipole--dipole and dipole-quadrupole energies in alkali halides. "Phys. Rev. B: Solid State", 1976, 13, N 6, 2692-2695 (англ.)

0626 анк

610 613

ВИНИТИ

Щелоч. галогенид

1976

3 Д119. Релятивистские эффекты в двухатомных молекулах. II. Релятивистские вклады в энергию связи в молекулах галогенидов щелочных металлов. Matcha Robert L. Relativistic effects in diatomic molecules. II. Relativistic contributions to binding energy in alkali halide molecules. «J. Chem. Phys.», 1976, 65, № 5, 1962—1966 (англ.)

Исследуются вклады в энергию связи двухатомных молекул, обусловленные релятив. эффектами. Поправки к энергии определяются в первом порядке теории возмущений, причем в качестве оператора возмущения используется гамильтониан Брейта — Паули. Ф-цией нулевого приближения считается однодетерминантная ф-ция, полученная методом Хартри — Фока — Рутана. Отмечается, что основная трудность при учете релятив. эффектов состоит в необходимости достаточно точного вычисления интегралов. Поправки к энергии связи, обусловленные релятив. эффектами, увеличиваются от 0,94 ккал для молекулы LiF до 7,7 ккал для молекулы LiBr. В последнем случае полученная поправка составляет 7,84% от полной энергии связи. Показано, что основной вклад в поправку к энергии связи вносит член, связанный со спин-орбитальным взаимодействием. А. И. Панин

Ф 1977 IV 3

Щелочные мет. (галогениды) 1976

J 85: 52033n Theory of the chemical bond. 2. Dipole moments of alkali halide molecules, bond polarity, and differential charge affinity. Matcha, Robert L.; King, Stephen O., Jr. (Dep. Chem., Univ. Houston, Houston, Tex.). *J. Am. Chem. Soc.* 1976, 98(12), 3420–32 (Eng). An accurate dipole moment model is used to analyze dipole moments of alkali halide mols. For these mols, the effective charge transferred during mol. formation, f, ranges systematically from 0.76 to 0.99 in an order predictable from the periodic table. The Fs are related to at. parameters by the equation $f = (q_M - q_X)/2$, where q is the ideal at. charge. The model predicts equil. dipole moments and slopes for alkali halides which differ on the av. from exptl. values by 0.33 and 1.5%, resp. A complete table of alkali halide dipole moments is constructed; given are coeffs. in the equation $\mu_{v,J} = \mu_0 + \mu_I(v + 1/2) + \mu_{II}(v + 1/2)^2 + \mu_0^J J(J + 1) + \mu_I^J J(J + 1)(v + 1/2)$, where v and J are vibrational and rotational quantum nos., resp. The model is compared with several other dipole moment models. The model leads to a plausible interpretation of the signs of equil. dipole moments for such mols. as CF which have appeared to violate chem. intuition. A quant. procedure for resolving chem. bonds into ionic and covalent components is proposed. The method derives from an

(μ)

C.A. 1976 85. N8

ОПИ - 4383

anal. of alkali halide dipole moment measurements. Bonds are classified according to their polarity $f = (q_A - q_B)/2$ and their covalency $c = (q_A + q_B)/2$. A new concept, the differential charge affinity, is introduced to explain trends in the bond polarities of alkali halide mols. The relationship of this property to ionization potentials and electron affinities is explored. A comparison of bond polarities and differential charge affinities with the older concepts of ionic character and electronegativity is given.

Щелочные галогениды 1976

86: 147922m Vibrational-rotational energy levels of diatomic halide molecules. Malinowska-Adamska, Cecylia (Inst. Phys., Tech. Univ. Lodz, Lodz, Pol.). *Zesz. Nauk. Politech. Lodz., Fiz.* 1976, 3, 5-14 (Pol). An anal. expression was derived for the energy eigenvalues of the vibrational-rotational terms of diat. mols. by using the potential function of T. Tietz (1963,1964): $U(r) = [De(1 - q)^2/(1 + q)^2][1 + (A/q) + (B/q^2)]$; where $q = r/r_e$. Calcns. on alkali halides demonstrate that this approach gives agreement with the exptl. dependence of these eigenvales on the rotational quantum nos. B. J. Skutnik

расчет уровней энергии

C.A. 1977, 86 N20

2 Хим. заборгенщей серия. лет. 1976

12 Д164. Колебательно-вращательные уровни в двухатомных молекулах галогенидов щелочных металлов. Malinowska-Adamska Cecyla. Oscylacyjno-rotacyjne poziomy energetyczne czasteczek dwyatomowych halogenków. «Zesz. nauk. PŁódz.», 1976, № 217, 5—14 (польск.; рез. англ., рус.)

Приведено аналитич. выражение для собств. значений энергии колебательно-вращательных уровней двухатомных молекул, полученное с помощью потенц. ф-ции Титца:

$$U(r)=D_e(1-r/r_e)^2(1+r/r_e)^{-2}\cdot[1+A(r_e/r)+B(r_e/r)^2].$$

Показано, что ф-ция Титца дает правильную зависимость собств. значений энергий колебательно-вращательных уровней от вращательного квантового числа для двухатомных молекул галогенидов щелочных металлов.

Резюме

ЖР 1976 N 12

Щелочные галогенсуде 1976

(MF_6)

87: 160920z IR-spectroscopic study of some alkali metal hexafluorides. Markaryan, Sh. A.; Grigoryan, Zh. Kh.; Ter-Arakelyan, K. A.; Babayan, G. G. (USSR). *Ereyani Amalsaran. Gitakan Tegekagir. Bnakan Gitutyunner, Uch. Zap. Ereyan. Un-t. Estestv. N.* 1976, 3(133), 156–7 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1977, Abstr. No. 13B245. Title only translated.

И. К. Скиф

C.A. 1977, 87 N20

Щелочные галогениды (пары) 1976

фотоэл. спектр

85: 133704j Helium(He II) photoelectron spectra of vapor phase alkali halides. Potts, A. W.; Williams, T. A. (Dep. Phys., King's Coll., London, Engl.). *Daresbury Nucl. Phys. Lab. [Rep.]* 1976, DL/SRF/R8, 75-6 (Eng). The energy range of He II photoelectron spectral measurements of alkali halide (MX) vapors was extended to include ionization from the M^+ cation of diat. M^+X^-. Spectra for Cs halides and Rb halides are presented and discussed; agreement between calcd. and exptl. ionization potentials is good. In many of the mol. M^+p^{-1} spectra, four or possibly more features were obsd. It is tentatively suggested that the fine structure arises from configuration interaction between the various possible states of the $M^+p^5s^1X^0p^5$ ion and the $M^{2+}p^5X^-p^6$ ion.

С.А. 1976 85 N 18

61123.3627
Ch,Ph,TC

LiF, NaF, KF, CsF (энергии св.уз)

1976
4789

Pople R.T. On the relationship between the chemical bond energy and the electron energy levels of strongly ionic compounds. "Chem. Phys. Lett.", 1976, 42, N 3, 509-511 (англ.),

0758 ямк

714 716

ВИНИТИ

M – ClF

1977

M – щелочной металл.

87: 60119b **Infrared, Raman, and ultraviolet spectra of M^+ClF^- species in solid argon.** Prochaska, Eleanor S.; Ault, Bruce S.; Andrews, Lester (Chem. Dep., Univ. Virginia, Charlottesville, Va.). *Inorg. Chem.* 1977, 16(8), 2021–3 (Eng). The alkali metal–ClF matrix reaction products were examd. by IR, Raman, and UV matrix techniques. Strong bands near 340 cm^{-1} in both the IR and Raman spectra are assigned to the intraionic $(Cl–F)^-$ mode and strong metal-dependent IR absorptions are attributed to the interionic $M^+ \leftrightarrow (ClF)^-$ mode. Intense UV absorptions near 290 and 250 nm are assigned to $M^+(ClF)^-$ and $M^+Cl_2F^-$, resp.

У. ф. спектр

С.А. 1977. 87 № 8.

2 Хим. молекулы

Щесоглые молекулы

галогенидов

1977

90: 157348a Comparative method for evaluating molecular parameters of diatomic molecules based on the virial theorem. Application to the titanium boride (TiB) molecule. Rozukova, T. P.; Morozov, E. V.; Bobkova, V. A. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Deposited Doc.* 1977, VINITI 4199-77, 9 pp. (Russ). Avail. VINITI. Electron kinetic energies and potential energies were evaluated as functions of internuclear distances for 48 diat. mols. of the type XY (where X = alkali metals, alk. earth metals, B, or Ti, and Y is a halogen, H, O, or S) and of H_2, B_2, and Ti_2. Mol. and thermodn. parameters were calcd.

C. A. 1979. 90 N 20

Щелочные галогениды 1977

87: 11808s **Chemi-ionization reactions of alkali dimers with halogen molecules.** Reck, Gene P.; Mathur, B. P.; Rothe, Erhard W. (Dep. Chem., Wayne State Univ., Detroit, Mich.). *J. Chem. Phys.* 1977, 66(9), 3847-53 (Eng). A crossed beam app. is used to characterize ionic products of thermal energy collisions of alkali dimers M_2 with homonuclear halogens X_2 and with IBr and ICl. All possible alkali-halogen combinations were studied, except Rb_2 with ICl and IBr. When energetically possible the ionic products are mainly M^+ and X^-. When this path is closed two alternative paths are obsd. These yield M_2X^+ and X^-, or M^+ and MX_2^-. The results are discussed in the framework of a mechanism proposed by Lin, Whitehead, and Grice. The binding energy of the triat. ions is computed with the use of an ionic model.

энергия связи

C.A. 1977 87 N2

Щелочные галогениды 1977

91: 112776t Internuclear distances r_e(M-X), radii, and effective dipole polarizabilities of M(1+) and X(1-) ions in dimeric molecules (M_2X_2) of alkali metal halides. Solomonik, V. G. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Deposited Doc.* 1977, VINITI 4387-77, 12 pp. (Russ). Avail. VINITI. Based on the ionic model, the bond distances, r_e(M-X), in alkali metal halide dimers, M_2X_2, were estd. by interpolation of r_e(M-X) from monomer MX → dimer M_2X_2 → crystal. By using r_e(M-X) values of M_2X_2, the ionic radii and polarizabilities in M_2X_2 were calcd.

CA, 1979, 91, N14

Плазма 1978

Щелочные галогениды

(спектр)

91: 99299t The photodissociation of alkali halides in air-acetylene flame as studied by molecular absorption spectroscopy. Furuta, Naoki; Yoshimura, Etsuro; Haraguchi, Hiroki; Fuwa, Keiichiro (Div. Chem. Phys., Natl. Inst. Environ. Stud., Ibaraki, Japan). *Spectrochim. Acta, Part B* 1978, 33B(10-12), 715-26 (Eng). The absorption spectra of alkali halides and hydroxides which were aspirated into an air-C_2H_2 flame were obsd. in the UV and visible regions using a conventional at. absorption spectrometer with an analog data processing system. Mol. bands which arose from the alkali halides and hydroxides were obsd. along with at. lines. For Li, only mol. absorption bands of LiO were obsd. in the flame, even when Li halides were aspirated. These mol. absorption bands can be interpreted in terms of photodissocn. processes of the alkali halides and hydroxides produced in the flame.

C.A. 1979, 91, N12

Инфракрасное поглощение 1978

Кластеры

91: 65464c Infrared absorption in alkali halide molecules, clusters and microcrystals. Martin, T. P. (Max-Planck-Inst. Festkoerperforsch., Stuttgart, Fed. Rep. Ger.). *Proc. Int. Conf. Lattice Dyn.* 1977 (Pub. 1978), 769-71 (Eng). Edited by Balkanski, M. Flammarion Med.-Sci.: Paris, Fr. IR absorption spectra are reported for alkali halides in various stages of aggregation ranging from monomer to microcrystal. The samples were prepd. by the simultaneous condensation of Ar and alkali halide vapor onto a transparent He temp. substrate. For the smaller clusters, >30 sharp mol. lines could be seen. As the clusters become larger, the mol. lines coalesce into a small no. of narrow bands which can be characterized as surface phonon absorption. The equil. configurations of alkali halide polymers contg. 1-9 mols. were detd. by numerically minimizing the total energy. The 2nd derivs. of the total energy with respect to at. displacements were evaluated and used to calc. the IR absorption spectrum of each polymer.

Кабеев-Кондратьев

С.А. 1979 91 N8

Щелочные галогениды 1978

11 Д589. **Матрично-изолированные щелочногалоидные мономеры и кластеры.** Martin T. P., Schaber H. Matrix isolated alkali halide monomers and clusters. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 9, 4299—4303 (англ.)

спектры в матрице

Получены ИК-спектры (600—30 см$^{-1}$) натриевых и цезиевых щелочногалоидных мономеров и кластеров, изолированных в аргоновой матрице. Обнаружено, что при низких конц-ниях исследуемых соединений в ИК-спектре наблюдаются 4 полосы, причем наиболее интенсивная ВЧ-полоса приписана колебаниям мономеров, а остальные — колебаниям плоских ромбич. димеров. Увеличение конц-ии исходного продукта в матрице сопровождается появлением ИК-полос тримеров и тетрамеров. Вычислены константы равновесных конфигураций щелочногалоидных молекул, содержащих от 2 до 8 атомов. Взаимодействие частиц в мономерах и кластерах описано в рамках моделей твердого и поляризуемого ионов. Библ. 19. И. В. А.

Ф. 1978 N 11