

ClO_4^-



I-1942

I948

$\text{NO}_2^+ (r_e)$

$\text{ClO}_4 (r_e)$

Cox E.G., Jeffrey G.A., Truter M.R.,
Nature, I948, I62, 259.

Crystal structure of nitronium perchlorate^e

Ch.A., I949, 460d

сестр. г.к. 9-1

I-1939

✓ (TiCl₄, GeCl₄, GeBr₄, SnBr₄, GeH₄, SiH₄, IO₄, 1955
SeO₄, CrO₄, SO₄, PO₄, MoO₄, SiO₄, ClO₄)

Venkateswarlu K., Sundaram S.

J. Chem. Phys., 1955, 23, N 12, 2365-2367

()

Evaluation of force constants from
raman effect data. Part I. Molecules and
radicals of the type XY₄.

PX, 1956, 53653

HO

ClO_4

1958.

Morris D.F.C.

Ac^-

III-8995-464

"J. Inorg. Nucl. Chem."

1958, 6, 295-302.

ClO₄⁻ Soulen J.R., Schwartz W.F. 1962

1-III
BQP-5263-

J. Phys. Chem. 66, 2066 (1962)

Infrared spectrum of nitryl
perchlorate.

C.A. 1963.58.1.

152B

T-3137

1963

ОС10₃ (силовые пост., расчет)

Magarajan G.

Potential constants of some
XY₃Z type ions. "J.Scient. and
Industr.Res.", 1962,B21,N 1, 42-43.
(. АНГЛ..)

РХ., 1963, 1, Б 23

Ю

ClO_4^-

Nagarajan G.

1964

Indian J. Pure and Appl.
Phys., 2, n 1, 17.

Среднее асимметричное
состояние для некоторых мети-
лраздвоенных ионов ClO_4

I, VI и VII групп.

(см. PO_4^{3-})

x. 1965. 8

VII 2963

1964

SO_4^{2-} , AsO_4^{2-} , SeO_4^{2-} , PO_4^{3-} , ClO_4^- ,

IO_4^- (sil. post., 2)

Radhakrishnan M.

Z. Phys. Chem., (BGR), 1964, 41,

и 3-4, 201-204.

ЕСТЬ Ф. Н. J.

SO_4^-

Manne R.

1/1967

J. Chem. Phys., 46, n 12,
4645. - 4651.

Молекулярные орбитали
и химический сдвиг для
внутренних - и внешних
ионов S и Se. как оксидо-
[см. SO_4^{2-}]

1968

6 Б202. Инфракрасные спектры поглощения хлората калия, подвергнутого действию рентгеновского излучения. Jumeau Daniel. Fayet Jean-Claude. Spectre d'absorption infrarouge du chlorate de potassium irradié aux rayons X. «С. г. Acad. sci.», 1968, 266, № 26, B1614—B1617 (франц.)

Изучены поляризованные ИК-спектры в области $780-120\text{ см}^{-1}$ продуктов радиолиза KClO_3 . Показано, что в результате облучения монокристалла KClO_3 в его ИК-спектре наблюдаются существенные изменения, к-рые объясняются появлением ионов ClO_2^- и ClO_4^- . Сопоставляя данные поляризационных ИК-спектров и результаты влияния изотопного обмена ($\text{KCl}^{37}\text{O}_3$) на ИК-спектр, авторы показали, что имеются два типа ионов ClO_2^- , отличающихся по симметрии: с симметрией C_s (809 и 848 см^{-1}) и симметрией C_{2v} (803 и 844 см^{-1}). Наблюдаемые частоты 1107 , 1116 и 1140 см^{-1} отнесены к колебаниям иона ClO_4^- .

И. В. Кумпаненко



X. 1969. 6

ClO₄ (2cc-o)

XI 394¹⁹⁶⁸

Olovsson J.,

J. Chem. Phys., 1968,

49 (3), 1063-67

20

ca 1968

1969

ClO_4^-
(в кристал.)

Janik J.M., и др.

Acta phys. polon.,
1969, 35, n 6, 997

V_i
(ИК - спектр)

(ср. SO_4^{2-}) III

XI-281

1969

ClO_4^- , ClO_3^- (di, chem. uost.)

Klee W. E.,

Z. anorgan. und allgem. Chem.,
1969, 370, N 1-2, 1-15

• 10

ClO₄ - (Mepme chazu Cl-O) XI 516 1969

Tao shu-fen, Green J. H.,

J. Phys. Chem., 1969, 73 (4), 882-9.

Positronium interactions in aqueous
oxyacids and hydrogen compounds.

7
Bop, S. M. (Q) CA, 1969, 71, 12, 69382

ClO_4^-

1970

135584w Vibrational properties of perchlorate perbromate, and periodate ions. Baran, Enrique J.; Aymonino, Pedro J.; Mueller, Achim (Anorg. Chem. Inst., Univ. Goettingen, Goettingen, Ger.). *An. Asoc. Quim. Argent.* 1970, 58(2), 71-7 (Span). Force consts. and bond orders (according to Siebert), as well as vibrational amplitudes and Coriolis coupling consts., were calcd. for ClO_4^- , BrO_4^- , and IO_4^- by the valence force field, L matrix, and potential-energy distribution methods, with fairly good agreement. T. Hirschfeld

сш.
ноч.

(+2)



C.A. 1970. 73 26

ClO_4^-

1980

5 Б276. Колебательные постоянные ионов ClO_4^- , BrO_4^- и JO_4^- . Baran E. J., Aymonino P. J., Müller A. Propiedades vibracionales de los iones ClO_4^- , BrO_4^- y JO_4^- . «An Asoc. guím. argent.», 1970, 58, № 2, 71—77 (исп., рез. нем.)

Из лит. данных по частотам колебаний в приближении $L_{12}=0$ (L — матрица форм колебаний) вычислены силовые постоянные ионов ClO_4^- , BrO_4^- и JO_4^- , а также средне-квадратичные амплитуды колебаний и постоянные кориолисова взаимодействия. М. Р. Алиев

Сил. конст.

12

X. 1971. 5

12

ClO_4^-

perchlorate;
2;

Millier T. H.

1970

Saunders V. R.

Chem. Consumers, v 18,
1183.

(see: ClO_2^-) III

ClO_4^-

Brooker M. H.

1941

u gp.

Di

Chem. Phys. Lett., 9 (3),
242.



(Calc. NO_3^-) III

$\text{ClO}_y - n$ ($n = 0.1 \div 4$)

1974

Elumalai K.

использов.
коррозийно-
взаимодейств.

"Indian J Pure and
Appl Phys" 1974, 12,
№8, 598-600 (англ.)

(с SiO_2 - III)

СЛО₄

оттиски 1972

1974

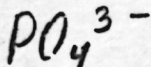
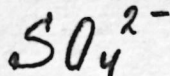
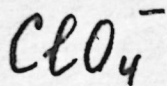
6 Д153. Расчеты методом ССП МО ЛКАО изо-
электронного ряда ClO_4^- , SO_4^{2-} и PO_4^{3-} . Johansen

Helge. SCF LCAO MO calculations for the iso — elect-
ronic series ClO_4^- , SO_4^{2-} , and PO_4^{3-} . «Theor. chim. ac-
ta», 1974, 32, № 3, 273—278 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследо-
вано электронное строение изоэлектронных анионов
 ClO_4^- , SO_4^{2-} и PO_4^{3-} . Использован базис гауссовых
ф-ций $10s6p$, сгруппированный в $5s3p$ для атомов
О и $12s10p2d$, сгруппированный в $6s6p2d$, для
остальных атомов. Для всех систем принята тетраэд-
рич. геометрия с длинами связей, полученными усредне-
нием по имеющимся эксперим. данным. Полученные
результаты по оценкам автора, близки к предельным
хартри-фоковским. Приведены полные и орбитальные
энергии и проведен анализ заселенностей. Подчеркнута
важность включения в базис поляризац. ф-ций d -типа.
Полученные результаты сопоставлены с данными неэм-
пирич. расчетов других авторов и данными расчетов
методом рассеянных волн В. Л. Лебедев

электр.
структ.

ф. 1974
№ 6



kb. lex.
packet.

En memo 1972

1974

137435s SCF LCAO MO calculations for the isoelectronic series perchlorate, sulfate, phosphate ion. Johansen, Helge (Dep. Chem. Phys., Tech. Univ. Denmark, Lyngby, Den.). *Theor. Chim. Acta* 1974, 32(3), 273-8 (Eng). Ab initio calcs. were performed for the ground states of ClO_4^- , SO_4^{2-} , and PO_4^{3-} using basis sets consisting of contracted Gaussian-type orbitals having 12s-, 10p-, and 2d-type primitive functions on the central atoms and 10s- and 6p-type functions on the O atoms. The results are nearly at the Hartree-Fock limit.



(+2)



C.A. 1974. 80. N24

1971

8 Б34. Неэмпирические расчеты МО ЛКАО ССП систем ClO_4^- , HCl и ClF . Johansen H. SCF LCAO MO calculations on ClO_4^- , HCl and ClF . «Chem. Phys. Lett.», 1971, 11, № 4, 466—471 (англ.)

Проведен расчет МО ClO_4^- , HCl и ClF полным методом Рутана с базисом из сгруппированных ГФ: для Cl 10s6p1d сгруппированных в 7 ГФ для s (4,2,1,1,1,1) и 4 ГФ для p (2,2,1,1) с экспонентой для d-функции 0,68 (для HCl и ClF эта экспонента варьировалась); для O и F 7s3p, сгруппированных в 4 ГФ для s (4,1,1,1) и 2 ГФ для p (2,1); для H 4 ГФ, сжатых в 2 ГФ с добавлением 1 ГФ для p-АО с экспонентой 0,80. Приведены орбитальные энергии МО и состав заполненных МО ClO_4^- , для всех молекул — полные энергии и заселенности АО в

(+2)

X. 1972. 8



вариантах без учета и с учетом $3d$ -АО Cl. Для заселенностей $3d$ -АО Cl найдены значения: ClO_4^- 0,881; HCl 0,025 и ClF 0,058. Порядок МО ClO_4^- не зависит от учета $3d$ -АО и совпадает с найденным для SO_4^{2-} , а значения энергий согласуются с эксперим. данными по фотоэлектронному спектру. Включение $3d$ -АО заметно сказывается на орбитальных и полной энергии перхлората (последняя понижается на $-0,38$ ат. ед.), но гораздо меньше в случае HCl и ClF (понижение на 0,014 и 0,025 ат. ед.). Большой вклад $3d$ -АО в ClO_4^- отражается также в увеличении заселенности перекрывания ClO от 0,15 до 0,62. Причем несвязывающий уровень $1e$ становится связывающим.

М. Дяткина

Сродство к (OI, OBr, OCl, OClO, SO_4^{2-} , HSO_3^-) 1972
протону ($OClO_2^-$, $OClO_3^-$, F^- , $HSiO_4^-$, SO_3^{2-})

Борисов Ю. А., Булахов Н. Н.

XI 2901

Изв. АН СССР. Сер. хим., 1972, №1,
18-23 (русс.).

Расчёт сродства к протону
анионов оксикислот.

Рязань, 1972. 12526

10

16



$\text{SiO}_4; \text{PO}_4; \text{SiS}_4; \text{AsO}_4$ (ana. noem.) 1012
1072
xi 3242.

Darkov A. N.,
Chem. Phys. Lett., 1972, 15, N4,
631-3 (anew.) 5 + 5

Force constants and some
regularities of chemical
bonding in the tetrahedral
oxy-compounds of the second-
row elements: Si, silicon, phospho-
rus, sulfur, chlorine, etc.
CA, 1972, 47, N20, 132 742 t

110

(Φ)

PO_4^{3-} , SO_4^{2-} , ClO_4^- , SeO_4^{2-} , BrO_4^- (Vi, cur. met). XI 4008 1973

Schulze H., Weinstock N., Mueller A.,
Vandrish G.

Spectrochim. Acta, Part A, 1973,
29A (9), 1705-9 (Eng).

Raman intensities and force const.
of phosphate, sulfate, perchlorate,
selenate, and perbromate ions

C.A. 1974. 80 N2. 8524w. 10 (P)

XI-4001

1973

(CBr_4 ; SiCl_4 ; SiBr_4 ; GeCl_4 ; GeBr_4 ; SnCl_4 ;
 SnBr_4 ; PO_4^{3-} ; SO_4^{2-} ; ClO_4^- ; SeO_4^{2-} ; BrO_4^-)
ска нест, медој паровима.

Müller A, Mohan N, Königer F.

J. Mol. Struct, 1973, 18, N3, 357-365

ClO_4^- , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} (кб. мех. процесс). 1974.
Johansen H., XI 4132

Theor. Chim. Acta, 1974, 32 (3),
273-8.

SCF LCAO MO calculations for the
isoelectronic series perchlorate,
sulfate, phosphate ion.

C. A. 1974. 80. N24. 137435s

10 (⊕) 8

Clay-

1974.

Sharma D.K.

Pandey A.N., et al

Cp. annu.
Koced, L.
Cus. Inoc

Z. Naturforsch
1974, 29a n 10.

1504-6

(Cus. Tilay, III)

41002.5

TC, Ph, Ch

41273

02

1974

 ClO_4^- (Di)

*4-6607

Syal S.K., Yoganarasimhan S.R. Infrared
and permittivity studies on alkali per-
chlorates. "J. Solid State Chem.",
1974, 10, N 4, 332-340

(англ.)

0204 пик

166 168

196

ВИНИТИ

ClO_4^-

1975
Baran Enrique J.

средни
амплитуды
колебаний.

"Monatsh Chem" 1975
106, N 1, 121-126 (нем.
рез. анал.)

(см СНУ. III)

61207.1911

TC, Ch

ClO₄⁻ 48536

1976

* 45-15911

Becher H. J., Friedrich F., Willner H. Kraftkonstantenberechnungen aus Isotopenverschiebungen infrarotaktiver Grundschrwingungen von NO₃⁻, ClO₄⁻, SO₄²⁻, CO₃²⁻ und MoO₄²⁻-Ionen in verschiedenen Wirtsgittern. (all SO₄²⁻ = 14)

"Z. anorg. und allg. chem.", 1976, 426,

N 1, 15-27 (nem. rez. anorg.)

60920, 8883
Ch, Ph, TC, MGU

40892

1976

ClO_4 (Раман
спект)

84-14755

Brill T. B., Goez F.

Laser Raman study of the thermal decomposition of solid NH_4ClO_4 .

"J. Chem. Phys.", 1976, 65, N 3, 1217-1219

0705 ЛМК

647

684 690

ВИНИТИ

1976

12 Д353. ИК-исследование некоторых гидратов алюминатов кальция $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6\text{-X}^+\cdot y\text{H}_2\text{O}$ ($=3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{CaX}_2\cdot n\text{H}_2\text{O}$, X^- —одновалентный анион). Houtepen C. J. M., Stein H. N. An i.r. investigation on some calcium aluminate hydrates, $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6\text{+X}^-\cdot y\text{H}_2\text{O}$ ($=3\text{CaO}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{CaX}_2\cdot n\text{H}_2\text{O}$, $\text{X}=\text{univalent anion}$). «Spectrochim. acta», 1976, A32, № 7, 1409—1414 (англ.)

В области $200\text{—}3800\text{ см}^{-1}$ исследованы ИК-спектры $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6\text{+X}^-\cdot y\text{H}_2\text{O}$, где $\text{X}^- = \text{Cl}^-, \text{Br}^-, \text{I}^-, \text{ClO}_3^-, \text{NO}_3^-, \text{ClO}_4^-$ ($y=2$) и $\text{X}^- = \text{BrO}_3^-, \text{JO}_3^-$ ($2 < y < 4$). С помощью дейтерирования показано, что по крайней мере при комнатной т-ре молекулы воды имеют симметричное окружение, а группы ОН ориентированы в сторону аниона X^- . Определены энтальпии водородных связей (от 1,8 ккал для ClO_4^- до 5,5 ккал для JO_3^-).

ClO_4^-
 JO_3^-

ΔH
водородн.
связи.

Ф 1976 N 12



60210.6671

Ch, Ph, TC

96201

 ClO_4^-

1976

3806

Höjer Germund, Meza-Höjer Sara, Hernández de Pedrero Gisela. A CNDO study of the electronic structure of oxyanions XO_4^{n-} with $\text{X} = \text{Si}, \text{P}, \text{S}, \text{Cl}, \text{Ge}, \text{As}, \text{Se}$ and Br . "Chem. Phys. Lett.", 1976, 37, N 2, 301-306

(англ.)

 Per. SiO_4^{4-}

535 536

0554 ПРИНИТИ

ClO_4^{2-}

1976

6 Б303. ЭПР рентген-облученного Na_2SO_4 , легированного NaClO_4 . Kumaraswamy A., Sobhanadri J. E. S. R. of X-irradiated Na_2SO_4 doped with NaClO_4 . «Mol. Phys.», 1976, 32, № 2, 387—393 (англ.)

В интервале t -р 77—300° К исследованы спектры ЭПР рентген-облученных монокристаллов Na_2SO_4 , легированных NaClO_4 . В спектрах наблюдали сигналы от стабильных парамагнитных центров ClO_4^{2-} , стабилизированных в двух магнитно-неэквивалентных положениях в кристалле. Эксперим. параметры спин-гамильтониана спектров ЭПР ClO_4^{2-} : $g_1=2,009$, $g_2=2,037$, $g_3=2,031$, $A_1(\text{Cl})=84$, $A_2(\text{Cl})=88$, $A_3(\text{Cl})=84$ гс сопоставлены с литературными. В спектрах ClO_4^{2-} при 77° К наблюдали слабую СТС от двух эквивалентных ядер атомов Na с константой $A \leq 3$ гс. Помимо сигналов от ClO_4^{2-} в

электрон.
структ.

Х. 1977. 6

спектрах наблюдали сигналы, отнесенные к парамагнитным центрам O_3^- и SO_4^- . Методом ЭПР исследована гибель парамагнитных центров при нагревании и УФ-облучении кристаллов. Установлено, что при нагревании кристаллов центры ClO_4^{2-} гибнут с образованием двух доп. центров SO_4^- с разной ориентацией главных осей g -тензора. Все парамагнитные центры полностью гибнут при 200° . Проведены расчеты электронной структуры ClO_4^{2-} . Наиболее вероятно, что основным состоянием ClO_4^{2-} является 2A_1 .

В. В. Жуков

AlO_4^-

Mekrotza Purn K.

1976

kb. mex.
pacerum

Theor. Chim Acta 1976,
41(3) 257-62 (Eng)

(cu PO_4^{3-} ; III)

SO_4^{2-} IV

ClO_4^-

emm. 4/19/76

1976

SO_2

85: 112925s Non-empirical versus empirical choices for overlapping-sphere radii ratios in SCF- $X\alpha$ -SW calculations on perchlorate and sulfur dioxide. Norman, Joe G., Jr. (Dep. Chem., Univ. Washington, Seattle, Wash.). *Mol. Phys.* 1976, 31(4), 1191-8 (Eng). Two nonempirical schemes for establishing ratios of at. sphere radii for $X\alpha$ -scattered wave ($X\alpha$ -SW) calens. are proposed and compared with known methods of partitioning mols. into at. fragments along paths of max. change in electrostatic potential or charge d. In the initial $X\alpha$ -SW mol. charge distribution the radius of a sphere around each atom contg. the at. no. of electrons is approx. const. no matter what at. charges are assumed in constructing the charge distribution. The radius of a sphere contg. the no. of electrons put in for the atom in calcg. its at. charge d. varies inversely with the assumed charge. Ionization energies of ClO_4^- and SO_2 are calcd. using ratios of sphere radii established from the at. no. sphere sizes and from J. C. Slater's (1965) empirical at. radii. Calens. using at. no. radii ratios agree best with expt.

κβ. mex.
pactes

⊗ (+1)

C.A. 1976. 85 N16

BP-5058-XI
~~BP-5058-XI~~

Вин. 4491

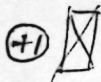
1976

ClO_4^-
 SO_2

22 Б28. Неэмпирический и эмпирический выбор отношений радиусов перекрывающихся сфер при расчетах ClO_4^- и SO_2 ССП X_α — методом рассеянных волн. Norman Joe G., Jr. Non—empirical versus empirical choices for overlapping—sphere radii ratios in SCF— X_α —SW calculations on ClO_4^- and SO_2 . «Mol. Phys.», 1976, 31, № 4, 1191—1198 (англ.)

ССП X_α -методом рассеянных волн в приближении перекрывающихся атомных сфер рассчитано электронное строение иона ClO_4^- и молекулы SO_2 . Отношения радиусов перекрывающихся сфер (ОРПС) выбраны так, чтобы при построении исходной электронной плотности атомные сферы содержали такое же число электронов, как и в свободном атоме. На примере молекул HF , CS_2 , ClO_4^- , $\text{Fe}(\text{SH})_4^-$ и PtCl_4^{2-} показано, что при этом ОРПС с точностью до нескольких процентов не зависят от принятого исходного заряда каждого из

кв. мех.
фрактм



X. 1976. N 22.

Вар-5058-X1
Вар-5120-X1

атомов в молекуле. Для конкретных расчетов электронного строения ClO_4^- и SO_2 кроме указанного выбора ОРПС, использована также оценка ОРПС по отношению слейтеровских атомных радиусов. Абс. значения радиусов определялись из условия наиболее точного выполнения теоремы вирнала. В модели переходного состояния вычислены потенциалы ионизации (ПИ) валентных электронов в ClO_4^- и SO_2 . Результаты сопоставлены с ПИ этих молекул, вычисленных в рамках теоремы Купмэнса методом ССП МО ЛКАО. Показано, что ПИ, вычисленные при выборе ОРПС по числу атомных электронов значительно лучше согласуются с экспериментом, чем ПИ, вычисленные при выборе ОРПС по отношению слейтеровских атомных радиусов и найденные методом ССП М7 ЛКАО. И. Тополь

ВФ - 3058 - 87

1976

12 Д115. Противопоставление неэмпирического и эмпирического выборов отношений радиусов перекрывающихся сфер в расчетах ClO_4^- и SO_2 методом ССП $X\alpha$ РВ. Norman Joe G., Jr. Non-empirical versus empirical choices for overlapping-sphere radii ratios in SCF- $X\alpha$ -SW calculations on ClO_4^- and SO_2 . «Mol. Phys.», 1976, 31, № 4, 1191—1198 (англ.)

Сравниваются 2 способа выбора отношений радиусов перекрывающихся атомных сфер в расчетах электронного строения молекул методом ССП $X\alpha$ в формализме рассеянных волн (РВ): 1) по отношению радиусов сфер, содержащих в начальном распределении зарядов такое число электронов, которое соответствует исходному выбору зарядов на атомах, и 2) по отношению радиусов сфер, содержащих для начального распределения зарядов число электронов, равное ат. номеру элемента. Показано, что 2-й способ меньше зависит от выбора начального распределения заряда, что особенно существенно при рассмотрении ионных систем. Этот способ рекомендован в качестве неэмпирич. способа выбора отношения радиусов. На примере расчета электронного строения ClO_4^- и SO_2 указанный неэмпирич. способ выбора сопоставлен с эмпирич. способом выбора радиусов

 ClO_4^- SO_2

м.п. Е.

⊕ 18

ф 1976 N 12

1657
м.п. Е.
ф 1976 N 12

по отношению слэтеровских атомных радиусов. Рассчитанные энергии ионизации сопоставлены с данными неэмпирич. расчетов методом ССП МО ЛКАО по теореме Купманса и с эксперим. данными фото- и рентгеноэлектронных спектров. Найдено, что расчеты методом ССП $X\alpha$ с неэмпирич. выбором радиусов атомных сфер приводят к полному согласию с экспериментом как в отношении абс. значений энергий, так и разностей между отдельными уровнями. Результаты расчета методом ССП МО ЛКАО хуже воспроизводят эксперим. данные, тогда как расчеты методом ССП $X\alpha$ с эмпирич. выбором радиусов сфер дают наилучшее согласие энергий ионизации для SiO_4^- , хуже воспроизводят разности энергий и дают наихудшие результаты по сравнению с двумя другими способами расчета для SO_2 .

А. Багатурьяни

рим.

оле 1

III

CO_4^-

1977

Glidelwell C.

Inorg. Chim. Acta 1977,
24, 149-57 (Eng).

(Do)

(all. CO_3^{2-} ; III)

ClO_4^-

Sanyal et al.,
et al.

1977

amucca 5079

am.
noem.

"Indian J. Pure and
Appl Phys" 1977, 15, N1,
17-20 (amul)

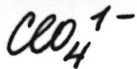
● (all SiO_4^{4-} ; III)

CD₄ Thirugnanasambandam P., 1977
Mohan S.

"Pramana J. Phys.",
1977, 8, n1, 44-49

раств.
сес.
носу.

(сес. CH₄) III



1978

Mohan S.

Acta. Cienc. Indica, 1978, 4(2),
154-60.

u.m.

(u.m. SiO_4^{4-} ; III)

ClO_4^-

1978

Ushanova, N. I., et al.

Zh. Prikl. Spektrosk. 1978,

28-2, 356-7.

ди; сел.
носеи.

сел. SiO_4^{4-} - III

ClO_4^-

(2i)

1973
91: 219576e Raman, IR and far-IR measurements on anhydrous sodium perchlorate between 90 and 600 K. Lutz, H. D.; Becker, R. A.; Kruska, Brigitte G.; Berthold, H. J. (Lab. Anorg. Chem., Univ. Siegen, Siegen, Fed. Rep. Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1979, 35A(7), 797-806 (Ger). The $K = 0$ vibrational spectra of the anhyd. orthorhombic anhydrite NaClO_4 was studied at 90-600 K. The IR, far-IR, and Raman spectra were recorded and interpreted in terms of the unit-cell group and the site group of the ClO_4^- ions. Raman single crystal measurements were used to assign the modes. The dynamic interactions of the vibrations of adjacent ClO_4^- ions were found to be very small, i.e. Davydov splitting $< 15 \text{ cm}^{-1}$; the site group splitting of internal modes was unusually large, $> 40 \text{ cm}^{-1}$. Only 1 mode of the fundamental ν_4 of ClO_4^- showed a splitting of the vibrations due to isotope effects. The site group splittings disappeared above 581.3 K except for a shoulder at the bending fundamental ν_2 . Both the librational fundamentals and the translatory modes were very broad, even at 90 K and of unusually weak intensity in the Raman spectra.

C.A. 1979 91/ N26

ClO_4^-

ВЗ-Х-6318

1980

18 Б51. Определение методом ССП- X_α энергий ионизации ClO_4^- , SO_4^{2-} и PO_4^{3-} . Barber Michael, El-Issa Basheet D., Hitchcliff Alan. SCF- X_α investigation of the ionization energies of ClO_4^- , SO_4^{2-} and PO_4^{3-} . «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 4, 441—445 (англ.)

Методом ССП- X_α рассеянных волн (X_α -РВ) в модели касающихся атомных сфер электронное строение ионов ClO_4^- , SO_4^{2-} и PO_4^{3-} в приближении переходного состояния для всех ионов рассчитаны потенциалы ионизации (ПИ) валентных и основных МО, хорошо согласующиеся с эксперим. ПИ. ПИ SO_4^{2-} рассчитаны также по теореме Купменса в рамках метода ССП МО ЛКАО с использованием большого базиса гауссовых s, p, d-орбиталей. Порядок следования ПИ для всех

(у)

(+2)



В Л

№ 1980 № 18

ионов в расчетах X_{α} -РВ и МО ЛКАО получается одинаковым, однако относительные энергетич. расстояния между ПИ в обоих методах отличаются. Для SO_4^{2-} исследована зависимость ПИ от величин обменных параметров α , полагаемых равными 2/3 и 1 во всех областях молекулы, соотв. (основные расчеты проводились с использованием параметров α , определенных по Шварцу). Показано, что значения ПИ линейно зависят от изменения параметров α при фиксированных параметрах атомных сфер в методе X_{α} -РВ. Найдено также, что варьирование параметров α в методе X_{α} -РВ эквивалентно изменению радиусов сфер при фиксированных значениях α . Расчеты ПИ методом X_{α} -РВ подтверждают интерпретацию эксперим., фотоэлектронных спектров в SO_4^{2-} , ClO_4^- и PO_4^{3-} . И. А. Тополь

ClO_4^-

ВФ-Х/6318

1980

9 Д164. Исследование энергий ионизации ClO_4^- , SO_4^{2-} и PO_4^{3-} методом ССП $X\alpha$. SCF- $X\alpha$ investigation of the ionization energies of ClO_4^- , SO_4^{2-} and PO_4^{3-} . Barber Michael, Ei-Issa Basheer D., Hinchliffe Alan. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1980, Part 2, 76, № 4, 441—445 (англ.)

Методом ССП $X\alpha$ рассеянных волн в модели переходного состояния рассчитаны потенциалы ионизации ClO_4^- , SO_4^{2-} и PO_4^{3-} (I). Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО (по теореме Купманса) в базисе ОСТ-3ГФ и большом базисе сгруппированных гауссовских ф-ций, включающем поляризационные ф-ции. Отмечено, что удовлетворительных значений разностей энергий уровней можно достичь только при использо-

(y)

(+2)



Ф 1980 N 9

вании большого базиса, хотя правильное относит. расположение уровней передается и в базисе ОСТ-3ГФ. Данные расчетов методом $X\alpha$ хорошо согласуются с экспериментальными фотоэлектронными спектрами (для всех молекул спектры сходны) и подтверждают сделанное ранее отнесение: широкая малоинтенсивная первая полоса отнесена к ионизации МО $1t_1$, $5t_2$ и $1e$, два следующих близкорасположенных пика и еще два пика отнесены к ионизации МО $4b_2$, $5a_1$, $3t_2$ и $4a_1$ соответственно. Расщепление уровней $4a_1$ и $3t_2$ наименьшее в случае I. Серия расчетов с использованием различных значений параметра α показала, что при его изменении меняются абс. значения потенциалов ионизации, но их разности остаются близкими.

В. Л. Лебедев

ClO_4^- Lammuck 1926 1980

Christe R.O., et al.

Li

Inorg. Chem., 1980, 19,

~~12~~ 1494-98

6 NF_4ClO_4 (76)

Synthesis and Properties...

ClO_4^-

$\nu_3; \nu_4;$

2-1981. N 10

10 Б196. Абсолютные инфракрасные интенсивности, производные дипольных моментов и колебательные зарядные параметры в анионе перхлората. Decius J. C., Murhammer D. Absolute i. r. intensities, dipole derivatives and vibrational charge parameters in the perchlorate anion. «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 11, 965—969 (англ.)

Измерены абс. интенсивности ИК-полос вал. кол. ν_3 (1050—1200 см^{-1}) и деф. кол. ν_4 (675—600 см^{-1}) иона ClO_4^- , изолированного в матрице KJ. Образцы готовили упариванием водных р-ров $\text{KClO}_4 + \text{KJ}$, при определенном отношении KClO_4/KJ , и дальнейшим пресованием дисков. Рассчитаны значения пр-ных дипольного момента по норм. координатам и координатам симметрии и эффективные заряды на атомах хлора (ξ_{Cl}) и кислорода (ξ_{O}). Рассчитаны значения силовых постоянных в координатах симметрии, используя эксперим. значения частот колебаний изотопозамещ. ионов $^{35}\text{ClO}_4$ и $^{37}\text{ClO}_4$ ($\Delta\nu_3 = 13,4$, $\Delta\nu_4 = 3,2$ см^{-1}). В связи с неопределенностью в выборе знака пр-ных дипольного момента получены 4 набора значений ξ_{Cl} и ξ_{O} . Из рассмотрения модели электронных взаимодействий в ионе ClO_4^- физически правильными признаны значения $\xi_{\text{Cl}} = 1,04$, $\xi_{\text{O}} = -0,51$.

И. А. Гарбузова

1980
1981
1982
1983
1984
1985
1986
1987
1988
1989
1990
1991
1992
1993
1994
1995
1996
1997
1998
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016
2017
2018
2019
2020
2021
2022
2023
2024
2025
2026
2027
2028
2029
2030
2031
2032
2033
2034
2035
2036
2037
2038
2039
2040
2041
2042
2043
2044
2045
2046
2047
2048
2049
2050
2051
2052
2053
2054
2055
2056
2057
2058
2059
2060
2061
2062
2063
2064
2065
2066
2067
2068
2069
2070
2071
2072
2073
2074
2075
2076
2077
2078
2079
2080
2081
2082
2083
2084
2085
2086
2087
2088
2089
2090
2091
2092
2093
2094
2095
2096
2097
2098
2099
2100
2101
2102
2103
2104
2105
2106
2107
2108
2109
2110
2111
2112
2113
2114
2115
2116
2117
2118
2119
2120
2121
2122
2123
2124
2125
2126
2127
2128
2129
2130
2131
2132
2133
2134
2135
2136
2137
2138
2139
2140
2141
2142
2143
2144
2145
2146
2147
2148
2149
2150
2151
2152
2153
2154
2155
2156
2157
2158
2159
2160
2161
2162
2163
2164
2165
2166
2167
2168
2169
2170
2171
2172
2173
2174
2175
2176
2177
2178
2179
2180
2181
2182
2183
2184
2185
2186
2187
2188
2189
2190
2191
2192
2193
2194
2195
2196
2197
2198
2199
2200
2201
2202
2203
2204
2205
2206
2207
2208
2209
2210
2211
2212
2213
2214
2215
2216
2217
2218
2219
2220
2221
2222
2223
2224
2225
2226
2227
2228
2229
2230
2231
2232
2233
2234
2235
2236
2237
2238
2239
2240
2241
2242
2243
2244
2245
2246
2247
2248
2249
2250
2251
2252
2253
2254
2255
2256
2257
2258
2259
2260
2261
2262
2263
2264
2265
2266
2267
2268
2269
2270
2271
2272
2273
2274
2275
2276
2277
2278
2279
2280
2281
2282
2283
2284
2285
2286
2287
2288
2289
2290
2291
2292
2293
2294
2295
2296
2297
2298
2299
2300
2301
2302
2303
2304
2305
2306
2307
2308
2309
2310
2311
2312
2313
2314
2315
2316
2317
2318
2319
2320
2321
2322
2323
2324
2325
2326
2327
2328
2329
2330
2331
2332
2333
2334
2335
2336
2337
2338
2339
2340
2341
2342
2343
2344
2345
2346
2347
2348
2349
2350
2351
2352
2353
2354
2355
2356
2357
2358
2359
2360
2361
2362
2363
2364
2365
2366
2367
2368
2369
2370
2371
2372
2373
2374
2375
2376
2377
2378
2379
2380
2381
2382
2383
2384
2385
2386
2387
2388
2389
2390
2391
2392
2393
2394
2395
2396
2397
2398
2399
2400
2401
2402
2403
2404
2405
2406
2407
2408
2409
2410
2411
2412
2413
2414
2415
2416
2417
2418
2419
2420
2421
2422
2423
2424
2425
2426
2427
2428
2429
2430
2431
2432
2433
2434
2435
2436
2437
2438
2439
2440
2441
2442
2443
2444
2445
2446
2447
2448
2449
2450
2451
2452
2453
2454
2455
2456
2457
2458
2459
2460
2461
2462
2463
2464
2465
2466
2467
2468
2469
2470
2471
2472
2473
2474
2475
2476
2477
2478
2479
2480
2481
2482
2483
2484
2485
2486
2487
2488
2489
2490
2491
2492
2493
2494
2495
2496
2497
2498
2499
2500
2501
2502
2503
2504
2505
2506
2507
2508
2509
2510
2511
2512
2513
2514
2515
2516
2517
2518
2519
2520
2521
2522
2523
2524
2525
2526
2527
2528
2529
2530
2531
2532
2533
2534
2535
2536
2537
2538
2539
2540
2541
2542
2543
2544
2545
2546
2547
2548
2549
2550
2551
2552
2553
2554
2555
2556
2557
2558
2559
2560
2561
2562
2563
2564
2565
2566
2567
2568
2569
2570
2571
2572
2573
2574
2575
2576
2577
2578
2579
2580
2581
2582
2583
2584
2585
2586
2587
2588
2589
2590
2591
2592
2593
2594
2595
2596
2597
2598
2599
2600
2601
2602
2603
2604
2605
2606
2607
2608
2609
2610
2611
2612
2613
2614
2615
2616
2617
2618
2619
2620
2621
2622
2623
2624
2625
2626
2627
2628
2629
2630
2631
2632
2633
2634
2635
2636
2637
2638
2639
2640
2641
2642
2643
2644
2645
2646
2647
2648
2649
2650
2651
2652
2653
2654
2655
2656
2657
2658
2659
2660
2661
2662
2663
2664
2665
2666
2667
2668
2669
2670
2671
2672
2673
2674
2675
2676
2677
2678
2679
2680
2681
2682
2683
2684
2685
2686
2687
2688
2689
2690
2691
2692
2693
2694
2695
2696
2697
2698
2699
2700
2701
2702
2703
2704
2705
2706
2707
2708
2709
2710
2711
2712
2713
2714
2715
2716
2717
2718
2719
2720
2721
2722
2723
2724
2725
2726
2727
2728
2729
2730
2731
2732
2733
2734
2735
2736
2737
2738
2739
2740
2741
2742
2743
2744
2745
2746
2747
2748
2749
2750
2751
2752
2753
2754
2755
2756
2757
2758
2759
2760
2761
2762
2763
2764
2765
2766
2767
2768
2769
2770
2771
2772
2773
2774
2775
2776
2777
2778
2779
2780
2781
2782
2783
2784
2785
2786
2787
2788
2789
2790
2791
2792
2793
2794
2795
2796
2797
2798
2799
2800
2801
2802
2803
2804
2805
2806
2807
2808
2809
2810
2811
2812
2813
2814
2815
2816
2817
2818
2819
2820
2821
2822
2823
2824
2825
2826
2827
2828
2829
2830
2831
2832
2833
2834
2835
2836
2837
2838
2839
2840
2841
2842
2843
2844
2845
2846
2847
2848
2849
2850
2851
2852
2853
2854
2855
2856
2857
2858
2859
2860
2861
2862
2863
2864
2865
2866
2867
2868
2869
2870
2871
2872
2873
2874
2875
2876
2877
2878
2879
2880
2881
2882
2883
2884
2885
2886
2887
2888
2889
2890
2891
2892
2893
2894
2895
2896
2897
2898
2899
2900
2901
2902
2903
2904
2905
2906
2907
2908
2909
2910
2911
2912
2913
2914
2915
2916
2917
2918
2919
2920
2921
2922
2923
2924
2925
2926
2927
2928
2929
2930
2931
2932
2933
2934
2935
2936
2937
2938
2939
2940
2941
2942
2943
2944
2945
2946
2947
2948
2949
2950
2951
2952
2953
2954
2955
2956
2957
2958
2959
2960
2961
2962
2963
2964
2965
2966
2967
2968
2969
2970
2971
2972
2973
2974
2975
2976
2977
2978
2979
2980
2981
2982
2983
2984
2985
2986
2987
2988
2989
2990
2991
2992
2993
2994
2995
2996
2997
2998
2999
3000
3001
3002
3003
3004
3005
3006
3007
3008
3009
3010
3011
3012
3013
3014
3015
3016
3017
3018
3019
3020
3021
3022
3023
3024
3025
3026
3027
3028
3029
3030
3031
3032
3033
3034
3035
3036
3037
3038
3039
3040
3041
3042
3043
3044
3045
3046
3047
3048
3049
3050
3051
3052
3053
3054
3055
3056
3057
3058
3059
3060
3061
3062
3063
3064
3065
3066
3067
3068
3069
3070
3071
3072
3073
3074
3075
3076
3077
3078
3079
3080
3081
3082
3083
3084
3085
3086
3087
3088
3089
3090
3091
3092
3093
3094
3095
3096
3097
3098
3099
3100
3101
3102
3103
3104
3105
3106
3107
3108
3109
3110
3111
3112
3113
3114
3115
3116
3117
3118
3119
3120
3121
3122
3123
3124
3125
3126
3127
3128
3129
3130
3131
3132
3133
3134
3135
3136
3137
3138
3139
3140
3141
3142
3143
3144
3145
3146
3147
3148
3149
3150
3151
3152
3153
3154
3155
3156
3157
3158
3159
3160
3161
3162
3163
3164
3165
3166
3167
3168
3169
3170
3171
3172
3173
3174
3175
3176
3177
3178
3179
3180
3181
3182
3183
3184
3185
3186
3187
3188
3189
3190
3191
3192
3193
3194
3195
3196
3197
3198
3199
3200
3201
3202
3203
3204
3205
3206
3207
3208
3209
3210
3211
3212
3213
3214
3215
3216
3217
3218
3219
3220
3221
3222
3223
3224
3225
3226
3227
3228
3229
3230
3231
3232
3233
3234
3235
3236
3237
3238
3239
3240
3241
3242
3243
3244
3245
3246
3247
3248
3249
3250
3251
3252
3253
3254
3255
3256
3257
3258
3259
3260
3261
3262
3263
3264
3265
3266
3267
3268
3269
3270
3271
3272
3273
3274
3275
3276
3277
3278
3279
3280
3281
3282
3283
3284
3285
3286
3287
3288
3289
3290
3291
3292
3293
3294
3295
3296
3297
3298
3299
3300
3301
3302
3303
3304
3305
3306
3307
3308
3309
3310
3311
3312
3313
3314
3315
3316
3317
3318
3319
3320
3321
3322
3323
3324
3325
3326
3327
3328
3329
3330
3331
3332
3333
3334
3335
3336
3337
3338
3339
3340
3341
3342
3343
3344
3345
3346
3347
3348
3349
3350
3351
3352
3353
3354
3355
3356
3357
3358
3359
3360
3361
3362
3363
3364
3365
3366
3367
3368
3369
3370
3371
3372
3373
3374
3375
3376
3377
3378
3379
3380
3381
3382
3383
3384
3385
3386
3387
3388
3389
3390
3391
3392
3393
3394
3395
3396
3397
3398
3399
3400
3401
3402
3403
3404
3405
3406
3407
3408
3409
3410
3411
3412
3413
3414
3415
3416
3417
3418
3419
3420
3421
3422
3423
3424
3425
3426
3427
3428
3429
3430
3431
3432
3433
3434
3435
3436
3437
3438
3439
3440
3441
3442
3443
3444
3445
3446
3447
3448
3449
3450
3451
3452
3453
3454
3455
3456
3457
3458
3459
3460
3461
3462
3463
3464
3465
3466
3467
3468
3469
3470
3471
3472
3473
3474
3475
3476
3477
3478
3479
3480
3481
3482
3483
3484
3485
3486
3487
3488
3489
3490
3491
3492
3493
3494
3495
3496
3497
3498
3499
3500
3501
3502
3503
3504
3505
3506
3507
3508
3509
3510
3511
3512
3513
3514
3515
3516
3517
3518
3519
3520
3521
3522
3523
3524
3525
3526
3527
3528
3529
3530
3531
3532
3533
3534
3535
3536
3537
3538
3539
3540
3541
3542
3543
3544
3545
3546
3547
3548
3549
3550
3551
3552
3553
3554
3555
3556
3557
3558
3559
3560
3561
3562
3563
3564
3565
3566
3567
3568
3569
3570
3571
3572
3573
3574
3575
3576
3577
3578
3579
3580
3581
3582
3583
3584
3585
3586
3587
3588
3589
3590
3591
3592
3593
3594
3595
3596
3597
3598
3599
3600
3601
3602
3603
3604
3605
3606
3607
3608
3609
3610
3611
3612
3613
3614
3615
3616
3617
3618
3619
3620
3621
3622
3623
3624
3625
3626
3627
3628
3629
3630
3631
3632
3633
3634
3635
3636
3637
3638
3639
3640
3641
3642
3643
3644
3645
3646
3647
3648
3649
3650
3651
3652
3653
3654
3655
3656
3657
3658
3659
3660
3661
3662
3663
3664
3665
3666
3667
3668
3669
3670
3671
3672
3673
3674
3675
3676
3677
3678
3679
3680
3681
3682
3683
3684
3685
3686
3687
3688
3689
3690
3691
3692
3693
3694
3695
3696
3697
3698
3699
3700
3701
3702
3703
3704
3705
3706
3707
3708
3709
3710
3711
3712
3713
3714
3715
3716
3717
3718
3719
3720
3721
3722
3723
3724
3725
3726
3727
3728
3729
3730
3731
3732
3733
3734
3735
3736
3737
3738
3739
3740
3741
3742
3743
3744
3745
3746
3747
3748
3749
3750
3751
3752
3753
3754
3755
3756
3757
3758
3759
3760
3761
3762
3763
3764
3765
3766
3767
3768
3769
3770
3771
3772
3773
3774
3775
3776
3777
3778
3779
3780
3781
3782
3783
3784
3785
3786
3787
3788
3789
3790
3791
3792
3793
3794
3795
3796
3797
3798
3799
3800
3801
3802
3803
3804
3805
3806
3807
3808
3809
3810
3811
3812
3813
3814
3815
3816
3817
3818
3819
3820
3821
3822
3823
3824
3825
3826
3827
3828
3829
3830
3831
3832
3833
3834
3835
3836
3837
3838
3839
3840
3841
3842
3843
3844
3845
3846
3847
3848
3849
3850
3851
3852
3853
3854
3855
3856
3857
3858
3859
3860
3861
3862
3863
3864
3865
3866
3867
3868
3869
3870
3871
3872
3873
3874
3875
3876
3877
3878
3879
3880
3881
3882
3883
3884
3885
3886
3887
3888
3889
3890
3891
3892
3893
3894
3895
3896
3897
3898
3899
3900
3901
3902
3903
3904

ClO₄

1980

93: 13471z The use of dummy spheres in SCF $X\alpha$ calculations. El-Issa, B. D.; Hinchliffe, A. (Chem. Dep., Univ. Manchester Inst. Sci. Technol., Manchester, Engl. M60 1QD). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 71(2), 294-5 (Eng). A representative SCF $X\alpha$ calcn. is presented for ClO₄⁻ using dummy spheres in an attempt to improve the formal intersphere region where the potential is taken to be a const. Such spheres appear to have minimal effect on all derived quantities, however.

icl. scf
factor

CA 1980 93 v2

ClO_4^-

Электр.
строение

2 1980 ~ 18

18 Б34. Использование фиктивных сфер в ССП X_α -расчетах. El-Issa B. D., Hinchliffe A. The use of dummy spheres in SCF X_α calculations. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, № 2, 294—295 (англ.)

Электронное строение молекулы ClO_4^- рассчитано методом ССП— X_α рассеянных волн (X_α -РВ) с использованием «фиктивных» — (пустых) промежут. сфер, в центре к-рых не находились ядра атомов, а потенциал сферически усреднялся так же, как и в атомных сферах метода X_α -РВ. Исследована зависимость ряда вычисляемых величин от значений радиусов фиктивных сфер. Показано, что при изменении радиусов этих сфер от 1 ат. ед. до 0 энергия высшей занятой МО в ClO_4^- повышается на 0,009 ат. ед., полная статистич. энергия увеличивается на 0,19 ат. ед., а заряд межсферной области увеличивается на 0,1 электронного заряда. Сделан вывод о том, что включение в метод X_α -РВ пустых, фиктивных сфер, даже при большом изменении значений их радиусов, не приводит к сколько-либо существенным улучшениям результатов расчета, в отличие от приближения перекрывающихся сфер в методе X_α -РВ, где уже при небольшом варьировании степени перекрывания сфер обычно достигается существенное улучшение результатов.

И. А. Тополь

1980

ClO_4^-

Lomnick 10564 | 1980.

Lopez-Boté M. A.,
et al

сильн. пог.
(в кристалл.
веществах)

J. Raman Spectrosc;
1980, 9 (6), 386-92

ClO_4^-

1980.

Schutte C. J. H.

(2i)

Solid State Commun.,
1980, 35 (8), 577-580.



(com. NH_4ClO_4 ; III)

ClO_4^-
перманганат
(7) Уммук 11688 1981
Gutsev G. L., et al.
Chem. Phys., 1981, 56,
N3, 277-283.

● (ср. BO_2^- ; III)

ClO_4^-

1981.

Gutsev G. L., et al.

г, теорет.
расчет. Zh. Neorg. Khim. 1981,
26 (9), 2353-2357.

(см. BO_2^- ; III)

ClO_4

1981

Gutsev G. L., et al.

Ас, меорей.
расей.

Zh. Neorg. Khim.

1981, 26 (9), 2557 -
- 2560.

●
(сер. BO_2 ; II)

ClO_4^-

1983

Teramae H., Tanaka K.,
et al.

Рассчёт
электрон.
структ.
и геометр.

Solid State Commun.
1983, 46, N 8, 633-637.

●
(см. NO_3^- ; III)

ClO_4^-

1984

Goel R.K., Ahmad S.

пачëм
н. н.

Acta Phys. pol., 1984,
A65, n5, 435-442.

( SO_4^{2-} ; III)

[Am. 19917]

1984

CDV

Ratcliffe C. J., Irish

A. E.,

Can. J. Chem., 1984, 62,
N 6, 1134-1144.

chem,
sacments

ClO_4^-

1985

Ehrhardt Claus,
Ahlrichs Reinhart

теор.
расчет
энергет.
характер

Theor. Chim. Acta
1985, 68 (3), 231-45.

(сш. NSF; III)

ClD₄-

Om. 22739

1985

смысл
ab initio

Fulg A., Ozias Y., Pel-
legatti A.,

Nouv. J. Chim., 1985,
9, N 11, 675-680

CCl_4^-

[DM-22645]

1985

Yang C.,

гущина
связи,
расчет.

Int. J. Quantum Chem.,
1985, 28, N5, 641-648.

$OClO \rightarrow ClOO$ [Dm. 25940] 1986

исследования.

Adrian F.F., Bohandy F.,
Kim B.F.,

J. Chem. Phys., 1986, 85,
N 5, 2692-2698.

СДЧ-

[OM 23337]

1986

Комованов С. П.,
Соломонов В. Г.

распределен-
ные ав
initio
характери-
стики

Координат. системы,
1986, 12, N 4, 463 -
● - 469.

AlO_4^-

(cm. 24623)

1986

Mayer E.,

J. Phys. Chem., 1986,

90, N18, 4455-4461.

alk oxymr,
 ν_3

ClO_4^-

(от. 26558)

1987

Теренин В. Л., Богуслав А.,
структ.

Vi, сив.
пост.
теорет.
расчет.

Изв. АН СССР Сер. хим.,
1987, № 4, 796-800.

(сис. ClO^- ; III)

ClO_4^-

1987

Pershin V. L., Boldyrev
A. I.

структурн. Изв. Akad. Nauk SSSR,
параметры, Ser. Khim. 1987, (4),
ссыл. по сс. 796-800.

●
(ссыл. ClO^- ; III)

ClO_4^{n-}

1987

Xu Changan.

Huaxue Tongbao 1987,

(7), 41-2.

(7), 41-2.

($\text{Ce}_4^+ \bullet \text{SiO}_4^{n-}$; III)

ClO_4^-

1988

(Di)

110: 66003z Raman spectral study of solutions of lithium perchlorate and strontium perchlorate in some organic solvents. Lalic, M.; Jeremic, M.; Antic-Jovanovic, A.; Bojovic, V. (Fac. Sci., Univ. Belgrade, 11001 Belgrade, Yugoslavia). *J. Mol. Liq.* 1988, 39, 105-10 (Eng). Raman spectra were obtained for solns. of LiClO_4 and $\text{Sr}(\text{ClO}_4)_2$ in Me_2Co and MeCN for salt concn. from 0.6 to 3M. Anal. of the solvent bands led to the identification of cation-solvent assocns. An addn. of NaNCS caused the replacement of the solvated mols. by NCS^- ions in the inner coordination sphere of cation. Intensity measurements of the components of the $\nu_1(\text{C-N})$ band of SCN^- yield solvation no. for cations of the order 2. Component band anal. of the $\nu_1(\text{Cl-O})$ band of ClO_4^- ion gave indication for presence of solvent-sepd. ion pairs and contact ion pairs in the investigated solns. The 911.5 cm^{-1} band of ClO_4^- is explained as $2\nu_2$ enhanced by Fermi resonance.

C.A. 1989, 110, N8

СДЧ

(М. 3278) 1989

Алексеев В. И., Зюбина Т. С.
и др.

Ае

Изв. АН СССР Сер. экон.
1989, № 10, 2278-2282.

ClO_4^-

1989

Bowmaker G. A.,
Boyd P. D. W.

Рачет

и температур
и колебл.

частот

THEOCHEM 1989,
60, 161-75.

(См. ● Cl_2O ; III)

ClO_4^- Reed A.E., von Rague, 1990
Schleyer P.

(copy) J. Amer. Chem. Soc. 1990,
112, N4: C. 1434-1445.

(ccy. $\bullet \text{F}_3\text{SiF}$; III)

СДЧ¹-

(от 34081)

1990

Суворова Б. А.

Пьер. и Жерар. Жерар,
1990, 26, N 2, 233-236.

О выделении вакцинных
орбавирусов в оксидирующих
средах, роста, сера и
железа.

ClO_4^-

1991

12 Д187. Стабильность молекулярных анионов ClO_4^- , HCO^- и O_3^- по данным метода $X\alpha$ рассеянных волн с поправкой на самодействие. Stability of the molecular anions ClO_4^- , HCO^- and O_3^- from the self-interaction corrected multiple-scattering $X\alpha$ method / Guo Y., Whitehead M. A. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1991.— 231.— С. 307—319.— Англ.

М.А.

Методом $X\alpha$ рассеянных волн с включением поправки на самодействие исследовано электронное строение ClO_4^- , HCO^- и O_3^- . Отмечено, что без включения поправки не всегда достигается сходимость. Обнаружено, что при включении этой поправки результаты значительно улучшаются и одноэлектронные энергии согласуются с эксперим. значениями лучше, чем полученные в модели переходного состояния. Схема также лучше подходов, использующих функционал корреляционной энергии.



(42)

ср. 1991, № 12

ClO_4^-

1993

Oberle Ch., Eysel H.H.,

Theochem. 1993, 1991, 107-15

теорет.
раздел 4,
ссыл. постр.

(ссыл. ClO^- ;  III)

ClO₄

1996

124: 301191j Chlorine tetraoxide. Grothe, Hinrich; Willner, Helge (Inst. Anorganische Chemie Univ., D-30167 Hannover, Germany). *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 1996, 35(7), 768-9 (Eng). ClO₄ was formed and spectroscopically identified in vacuum thermolysis of ClOClO₃. The primary thermal decay of 2 binuclear chlorine oxides yields the corresponding mononuclear radicals, with a preference for the formation of OClO. The IR and UV/visible spectra were obsd. It appears that ClO₄ photolyzes to give OClO and O₂. The distortion of the ClO₄ radical to C_{3v} symmetry is dynamic (Jahn-Teller effect).

(UK, Y9P)

C. A. 1996, 124, N 22

ClO_4^-

1996

124: 301047s Lithium Perchlorate: Ab Initio Study of the Structural and Spectral Changes Associated with Ion Pairing. Klassen, B.; Aroca, R.; Nazri, G. A. (Materials and Surface Science Group, University of Windsor, Windsor, ON Can. N9B 3P4). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(22), 9334-9338 (Eng). ClO_4^- anion and $\text{Li}^+\text{ClO}_4^-$ ion pair were studied by ab initio quantum chem. methods. Optimized geometries for monodentate, bidentate, and tridentate structures were detd. up to the MP2/6-311+G* level of theory. Vibrational frequencies were detd. for ClO_4^- and $\text{Li}^+\text{ClO}_4^-$ up to the HF/6-311+G* level of theory. Comparisons are made with exptl. Raman spectra of electrolyte solns. At the highest level of theory, the bidentate structure is preferred over monodentate or tridentate configurations.

ab initio
vacuum,
Diluting.



C.A. 1996, 124, N22

ClO_4

1997

126: 309057g The ClO_4 radical: experiment versus theory. Van Huis, Timothy J.; Schaefer, Henry F., III (Center for Computational Quantum Chemistry, University of Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1997, 106(10), 4028-4037 (Eng), American Institute of Physics. The chlorine tetroxide radical and its anion have been investigated with UHF, d. functional and hybrid Hartree-Fock/d. functional methods, perturbation theory, and coupled cluster methods. It is predicted that the min. on the ClO_4 radical potential energy surface corresponds to the $^2\text{B}_2$ ground electronic state, a C_{2v} -symmetry structure. The C_{3v} structure identified exptl. lies a few kcal mol $^{-1}$ higher energetically. A C_s symmetry structure lies very close energetically to the C_{2v} min. at some levels of theory. Adiabatic electron affinities, equil. geometries, harmonic vibrational frequencies, IR intensities, isotopic shifts, and dipole moments are presented for all methods. Comparisons with recent exptl. vibrational data for the radical are made. It is predicted that the C_{2v} equil. geometry of the ground state is $R_{\text{Cl-O}_2}=1.502$ Å, $R_{\text{Cl-O}_2}=1.424$ Å, $\theta_{\text{O}_1}=93.6^\circ$ and $\theta_{\text{O}_2}=114.2^\circ$. The adiabatic electron affinity of the ClO_4 radical is predicted to lie near 5.2 eV.

теор. расчет
по методу, по-
верхности;
структура
стабильна;
д.

С.А. 1997, 126, N 23

ClO_4

1999

Beltran A., et al.,

(Ae) J. Phys. Chem. A 1999,
103 (16), 3078-3088.

(an. ClO_4^-  III)

ClO_4^-

2000

Hall M.B.,

срещу
и
м. см. па
(едно)

Thier. Chem. Acc. 2000,
103 (3-4), 221-224

(all. ready  -; III)