

NC-By



VI-390 1967

$\text{V}(\text{NbCl}_5)_2$,
 $(\text{NbBr}_5)_2, (\text{TaCl}_5)_2, (\text{TaBr}_5)_2$,
 $(\text{WCl}_5)_2, (\text{WBr}_5)_2$.

Walton R.A., Brisdon B. J.

Spectrochim. Acta, 1967, A23, N8, 2489-92.
The far-infrared spectra (500-200 cm^{-1}) of
some transition metal pentahalides; NbCl_5 ,
 NbBr_5 , TaCl_5 , TaBr_5 , WCl_5 .

RX., 1968, 2 214

J.

cert. p. 2

АВОВЕ (01, 2000 об. 69)

1967
VII 4032

Регула Е. И., Булава Л. И.,
Александров В. И.,
Учб. ОН СССР, Издательство,
1964, 3(10), 1942-5

10

CO 1968

67

67 1968

Cs₃Tl₂Cl₉, Nb₂Br₁₀Au₂Cl₆, Nb₂Cl₁₀Ta₂Cl₁₀, Ta₂Br₁₀

(P, can not)

VI 6200

Beattie I.R., Gilson T.R., Ozin G.A.

J. Chem Soc, 1968, A, vii, 2765-2771 (eng)Vibrational Spectra of Cs₃Tl₂Cl₉Au₂Cl₆, Nb₂Cl₁₀, Nb₂Br₁₀, Ta₂Br₁₀,
Ta₂Cl₁₀.

Proc Roy Soc, 1969, 62180

W

Y

Q

NbDBr₃(K) (om. 22968)

1968

Canterford J. H., Colton R.,
Tomkins J. B.,

Vi;

Inorg. Nucl. Chem. Lett.,
1968, 4, 471-475.

NbOCl_3 , NbOBr_3 , NbOI_3 (v.) 7 1968
Schulz C. O., Schafford F. E., VII 3430
J. Phys. Chem., 1968, 72(13), 4686-8

The vapor-phase infrared spectra of the
niobium oxo trihalides, NbOCl_3 , NbOBr_3 ,
and NbOI_3 .

W

ЕСТЬ Ф. Н.

CA, 1969, 40, 12, 52652d.

$[M_6X_{12}]X_n$ (vi, cum. no. vii 3719)
 $M = Nb, Ta$; $X = F, Cl, Br, I$ $n = 2, 3, 4$ 1969
Matter R., Z. anorgan. und
allgem. Chem., 1969, 364 (56), 279-89
Infrared spectra and force constants of niobium and tantalum
halides containing M_6X_{12} groups.

W

Ca 1969

$\text{Vb}_2\text{X}_{10}; \text{Ta}_2\text{X}_{10}; \text{Mo}_2\text{Cl}_{10}; \text{Re}_2\text{Cl}_{10}(\text{Vi})$ 1969
 $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$

Smardzewski R.R.,

7 VII 4759

U.S. At. Energy Comm., 1969, JS-T-292,
128pp. (am.)

Infrared spectra and vibrational
analyses of some dimeric transition
metal pentahalides.

10



CA, 1970, 72, N14, 727302

cur. n. ($TaCl_6^-$, $TaBr_6^-$, $NbCl_6^-$,
 $NbBr_6^-$) 7 VI 5260 ¹⁹⁷¹

Avasthi M.N., Mahita M.L.;
J. Mol. Struct., 1971, 7, 33-4, 301-
304 (ann)
molecular force fields of some
hexahalide ions.

Pu Xue, 1971, 16563

10

10

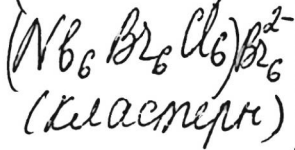
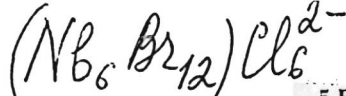
$\text{NbOBr}_3(\text{v})$ [Om. 22605] 1971

Ngai L.H., Stafford F.E.,

M.N.,
Kp.;

Adv. High. Temp. Chem.,
1971, 3, 213-270.

1981



5 Б30. Расчеты методом ССП ЛКАО кластеров $(\text{Nb}_6\text{Br}_{12})\text{Cl}_6^{2-}$ и $(\text{Nb}_6\text{Br}_6\text{Cl}_6)\text{Br}_6^{2-}$. Reiser Berghard. LCAO—SCF-calculations of the cluster $(\text{Nb}_6\text{Br}_{12})\text{Cl}_6^{2-}$ and $(\text{Nb}_6\text{Br}_6\text{Cl}_6)\text{Br}_6^{2-}$. «Comput. and Chem.», 1981, 5, № 2—3, 107—110 (англ.)

Методом ССП ЛКАО рассчитано электронное строение кластеров $(\text{Nb}_6\text{Br}_{12})\text{Cl}_6^{2-} (O_h)$ (I) и $(\text{Nb}_6\text{Br}_6\text{Cl}_6)\text{Br}_6^{2-} (D_{3d})$ (II). Расчеты проводились в базисах, состоящих из 450 и 264 АО, представленных в виде разл. по 3798 и 2250 элементарным гауссовым ф-циям (ГФ). Матричные элементы кластерного Пт в методе ЛКАО вычислялись с использованием разл. Пт, являющегося суперпозицией атомных Пт, рассчитанных в приближении Хартри-Фока-Слейтера, в ряд по 216 ГФ. В процессе итераций поправки к кластерному Пт находились в результате численного решения трехмерного уравнения Пуассона внутри сфер радиусов, соответствующих атомным

Электрон.
строение,
эв. мех. расчет

X, 1982, 19, № 5.

радиусам каждого из атомов в кластере. Описана блок-схема процесса вычислений на ЭВМ. Для I и II вычислены плотности электронных состояний, обсуждены энергетич. спектры МО и распределение МО по симметрии.

И. А. Тополь



NbDBr₃

1984

Nunziante-Cesaro S.,
Maltese M., et al.

спектр
в

Spectrochim. Acta,

maiuscula 1984, A40, N6, 579-
-585.

(с. NbOCl₃; III)

NbOBz_3

1987

French R. Z.,

Электроно- Diss. Abstr. Int. B
групп. иссл. 1987, 47(9), 3783.

(ср. CrO_2F_2 ; III)

NBBz₅

1991

Pershina V., Sepp
W. D. et al.

u.n.

GSI-Rept. 1991. N 91-
1, Sci. Rept. 1990, C.
275.

( VCl₅; III)

NbOBr_3

1992

Pershina V., Lepp W.D.
et al.,

электрон.
структура, J. Chem. Phys. 1992,
теор. расчт 97, N2, C. 1123-1131.

(англ. VOCl_3 ; III)

Nb_3Br_3

1994

120: 227406g The electronic structure of Nb_3Br_3 . Meyer, H. Juergen (Inst. Anorg. Chem., Univ. Hannover, Hannover, Germany). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1994, 620(1), 81-4 (Ger). The bonding in Nb_3Br_3 was investigated with the aid of extended Hückel and MO calcs. to gain some understanding concerning stability and possible chem. altering. Seven electrons occupy metal-metal bonding states of a Nb_3Br_3 unit. Six of them are responsible for strong σ bonds within the Nb_3 cluster. One to two addnl. electrons may be incorporated to occupy a_1 orbitals, which slightly increase the bonding in a Nb_3 cluster, rather than between adjacent clusters.

(meop. facem)

C.A. 1994, 120, N18

F: Nb2Br10

P: 3

2090

134:242937 Analysis of electronic structure and quadrupole coupling in dimeric transition and nontransition halides in terms of the density functional theory. · · Poleshchuk, O. Kh.; Koput, Ya.; Latoshinska, I. N.; Nogai, B.; Shanina, Yu. A. Toms State Pedagogical Institute, Tomsk, Russia. Russ. J. Coord. Chem. (2000), 26(11), 784-791. in English.

The electronic structure of dimeric M_2X_6 ($M = Al, Ga, In, I$; $X = F, Cl, Br, I$) and M_2X_{10} ($M = Sb, Nb$; $X = Cl, Br, I$) was analyzed using the d. functional theory. The calcd. parameters of the NQR spectra were compared with the exptl. values. Binding of the bridging and terminal halogen atoms was examd. using the natural orbitals of the metal-halogen bond. The inversion of the halogen NQR frequencies for the compds. of transition and nontransition elements is explained.