

Fe - F

Fe Fe

A-547

1965

Weinstock B; Goodman G.L.

Advances. Chem. Phys. vol 3,

London-New York, - Sydney, Inter-
science, 1965, 169-190

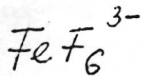
(11)

(see Ref. 10)

10 8 Brin

P. N. C. 1966, 13 B. 150

Chem. of K.

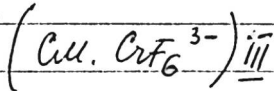


O'Donnell O.P.

1967

J. Chem. Phys., 47, N8, 2951

Расчет параметра $10Dq$ для
некоторых октаэдров переходных
металлов методом молекуляр-
ных орбиталей.



HeH_6^+

(Dm 19644) 1970
Allen G.,
Clark D. W.

He-F

J. Chem. Soc. A, 1970,
16, 2668.

$(\text{ex. HeH}_6^+)_{\text{II}}$

[Fe F₆]⁴⁻

parac

8:
61

Allen G.C.
Clark D.W.

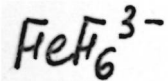
1970

1964

J. Chem. Soc., A (16),
2668.

W.

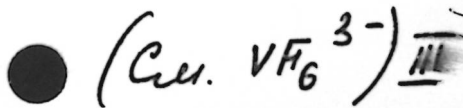
[Cu.(MnF₆)⁴⁻]^{III}



Allen G.C., et al. 1971

param;
 χ_e

J. Chem. Soc., 1941,
A, ~17, 2728.



[om. 19645]

FeF_6^{3-}

1972

Siebert H.

Ch. Z. Naturforsch. 1972, 27, 1101-2.

III (con ScF_6^{3-} ;

FeF_6^{3-}

1973

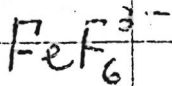
Harris L.E;

Bondreaux E.A.

Декр.
Chem. Phys. Lett."

символу . "1973, 23, N3, 434-36.

● (см. CF_6^{3-} ; III)



1973

3 Д177. Силовые постоянные и средние амплитуды колебаний некоторых октаэдрических анионов. Pandey A. N., Sharma D. K., Dubish A. K. Force constants and mean amplitudes of vibration of some octahedral anions. «Spectrosc. Lett.», 1973, 6, № 8, 491—498 (англ.)

Из литературных данных о значениях частот колебаний вычислены силовые постоянные модифицированного орбитально-валентного силового поля и средние амплитуды колебаний для ионов FeF_6^{3-} , GaF_6^{3-} , InCl_6^{3-} , SbCl_6^- и M^{6+}O_6 с $\text{M}=\text{Mo}$, W и Te . М. Р. Алнев

Силов.
пост.

ср. ампл.
колебаний

(+6) ☒

Р. 19 74 113

1973

FeF₆³⁻

119971p Force constants and mean amplitudes of vibration of some octahedral anions. Pandey, A. N.; Sharma, D. K.; Dubish, A. K. (Dep. Phys., Meerut Coll., Meerut, India). *Spectrosc. Lett.* 1973, 6(8), 491-8 (Eng). The modified orbital valence force field (MOVFF) was employed to compute the force consts. for FeF_6^{3-} , GaF_6^{3-} , InCl_6^{3-} , SbCl_6^{3-} , and M^{6+}O_6 (M = Mo, W, and Te). The general valence force field (GVFF) force consts. and mean amplitudes of vibration were also calcd. for M^{6+}O_6 at 0, 298, 16, and 500°K. The MOVFF calcns. gave neg. values for the bending force const. (D) for FeF_6^{3-} , GaF_6^{3-} , and Ba_2CaWO_6 . A comparison of stretching force consts. indicated that the Ga-F bond is stronger than the Fe-F bond; the Te-O bond is stronger than the Mo-O and W-O bond; the W-O bonds in Ba_2Ca and Ba_2Mg environments have equal strengths. The mean amplitudes corresponding to bonded distances in WO_6^{6-} and TeO_6^{6-} are nearly equal and are smaller than that of MoO_6^{6-} .

Crd.

nocu

C. A. 1973, 79 N 20

(+6)

FeF_6^{3-}

Sanyal, Nitish k. 1973
et al.

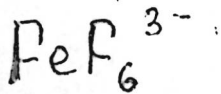
"Spectrosc. Lett"

сироб.
носім.

1973, 6 (1), 49-59.

458-57

● (сир. ScF_6^{3-} ; III)

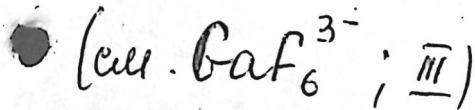


1973

Srivastava B. B.;
Publish A. K.; Pandey A. N.

Суд. ності.

носі. Копуамеа . "7. Mol. Struct".
1973, 15 (3), 421-4.



50210.4722

Ch, Ph, TC

homеrеу. крив 02
49587

1974

 FeF_6^{3-}

#48-8081

Clack Denis W., Smith William. Molecular orbital calculations on transition metal complexes. Part IX. High spin-low spin crossover in d^5 systems. "Theor. chim. acta", 1974, 36, N 2, 87-92

(англ.)

0299 пик

273 275 2 9.1

ВИНИТИ

Fe F_6^{4-}

(8)

пачи. жерг.
сен. и везд.
соемол.

Clack Dennis W. 1974
Smith William
"J. Chem. Soc Dalton Trans"
1974, N 18, 2015-2020 (англ)

(англ Co F_6^{3-} ; III)

50303.7319
Ch, Ph, TC

FeF_6^{3-} - 1974
 FeF_6 , FeF_6 -
*4-8267

К р. N 50303.7304

Larsson Sven, Viinikka Eeva-Kaarina,
De Siqueira Manoel L., Connolly John W.D.
The electronic structure of octahedral
transition metal halides as calculated
by the multiple scattering method.

"Int.J.Quant.Chem.", 1974, N 8, 145-160

(англ.) Symp.

283 287

304 0312 пик ВИНТИ

FeF₆³⁻

1976

Sharma D.K., et al.

Indian J. Pure and
Appl. Phys. 1976, 14(4),
319-21.

(see. work.
present.)

(see. SiF₆²⁻) III

1974

FeF_4

Ac^-

Сидоров Л.Н.
Координац. химия, 1977,
3, №8, 1128-1139.

●
(сш. BeF_2 ; III)

FeFx

1978

DeVore T.C., Van Zee R.F.,
Weltner W., Jr.,

Proc. Electrochem. Soc. 78-1
(Proc. Symp. High Temp. Met.
Halide Chem., 1977), 187-8 (1978)

An investigation of the first row
CA 89 120 290d

transition metal fluoride
molecules using ESR spectroscopy

БФ₄ - от. 18313 1981

к. ин.
пост. Рудков Е. Б., Борщевский
м. гр. А. Г.,
Депониров. рук. ВИНТИ,
N 1809-81. Дек., 1981.

FeFe^{3-}

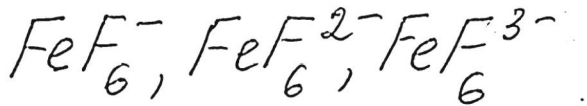
[Om. 17940]

1983

Broomfield K., Sher-
wood P.M.A.,

неприм.
прим.
окисл.
восполн.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1983, Pt 2,
79, ● N 9, 1321-29.



1984

Gutsev G. L., Boldyrev A. I.

геометр.,
структ.,
Ав. изобр.
патент.

Mol. Phys., 1984, 53,
N 1, 23-31.

(ср. ZrF_6^- ; III)

FeF_6

1984

Sabapathy K.,
Ramasamy R.

Vi, cent.
no. 11.

Indian J. Phys., 1984,
B58, N4-5, 464-472.

●
(cer. SF_6 ; III)

FeF₆⁻

OM. 20926

1985

Буцев Г. Л., Богдыхрев А. И.,

Электрон.
строен.,
расчет.

Координат. хим., 1985,
11, № 4, 435-442.

FeX₂

X-2aponep

[Om-24196]

1986

105: 123136t New empirical correlations between molecular constants of dihalides of iron, cobalt and nickel. Kharitonov, Yu. Ya.; Gerzha, T. V. (Mosk. Khim.-Tekhnol. Inst., Moscow, USSR). Zh. Neorg. Khim. 1986, 31(8), 2154-7 (Russ). New empirical correlations between the force const. k and the equil. length r_e of the metal-halogen bond were formed for the dihalides of Fe, Co, and Ni. $k = 13.57r_e^{-2} - 0.65$ (k Expressed in mdynes/Å and r_e in Å), which with satisfactory accuracy was applied for mols. of monohalides of the same metals.

(chep Ku2)

CoX₂,



NiX₂,

X-2aponep

(72) ~~18~~

C.A. 1986, 105, N 14

Fe₂F₅

(DM-25416)

1986

Fe₂F₆

Sidorov L. N., Bozshek-
evsky A. Ya., et al.

(Do, Ae)

Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process., 1986,
73, N 1-2, 1-11.

Fe₂F₆

1986

Sidorov I. D., Skokan
E. V.

Int. J. Mass Spectrom.
Ac; Ion Processes 1986, 73
(1-3), 1-11.

(cur. Fe F₃⁻; ~~74~~ ^I)

$Fe_2 F_5$ 1986
Sidorov I. D., Skokan E. V.

Int. J. Mass Spectrom.

Ion Processes 1986, 73
Ae; (1-3), 1-11.

(cur.  FeF_3^- ; ~~$\frac{1}{2}$~~)

$(FeF_6)^{5-}$

1987

Fernández Rodrigo G.,
Pueyo L.

J. chim. phys. et phys.-
chim. géol., 1987, 84, N 6,

et. n.

821-827

(CrF_6)⁵⁻; III)

$(\text{FeF}_6)^{3-}$

1988

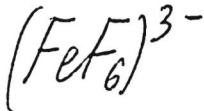
11 Д150. Теоретический расчет электронного строения иона $(\text{FeF}_6)^{3-}$. Theoretical calculation of the electronic structure of the $(\text{FeF}_6)^{3-}$ ion. Fernández V. M. García, Rodrigo G. Fernández, Puevo L. «J. Mol. Struct. Theochem», 1988, 166, 241—246 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в приближении замороженного остова в базисе ф-ций слэтеровского типа исследовано электронное строение октаэдрич. иона $(\text{FeF}_6)^{3-}$ в интервале длин связей 3,2—4,0 ат. ед. Рассмотрено различное разделение на остова и валентную оболочку и проведены расчеты с проектированием и без него. Приведены полные и орбитальные энергии, равновесные длины связей, силовые постоянные и частоты для колебания a_{1g} . Обсуждено влияние неполноты ортогональности остова и валентной оболочки на форму ядерного потенциала для основного состояния. Отмечено, что включение в рассмотрение диффузных 4s- и 4p-ф-ций металла приводит к удлинению связи.

В. Л. Лебедев

М-П

ф. 1988, 18, № 11



1988

109: 99075g Theoretical calculation of the electronic structure of the hexafluoroferrate $[(\text{FeF}_6)^{3-}]$ ion. Garcia Fernandez, V. M.; Fernandez Rodrigo, G.; Pueyo, L. (Fac. Quim., Univ. Oviedo, Oviedo, Spain 33007). *THEOCHEM* 1988, 43, 241-6 (Eng). The electronic structure of the octahedral hexafluoroferrate(III) anion has been calcd. as the first step of a study on the electronic properties of the $\text{Fe}(3+)$ ion in fluoride lattices. The consequences of insufficient core-valence orthogonality in the shape of the ground state nuclear potential have been discussed. Particular attention has been paid to the effects of diffuse 4s and 4p metallic functions on the total and orbital energies. The predicted equil. iron-fluoride distance agrees well with obsd. data.

meop. paper

C. A. 1988, 109, N 12.

FeF₄

[от. 30899, "а"]

1988

Сигоров Л. Н., Коробов Л. В. и др.,

(Ае)

ж. структур. химии,
1988, 29, № 6, 51-57.

FeF₄⁻

(OM-31234)

1989

Гуцев Т. Л., Богдырев А. И.,

структура Не. Меорган. химии, 1989,
34, № 2, 304-310.

Связь геосетрического строения
с электронной структурой в
тетраэдрических переходных
металлах.

FeF_4^-

(Om. 32553)

1989

Gutsev G. L.

кризиса Int. J. Mass Spectrom.
and Ion Process. 1989. -
91, - 2. - 135-44

● (Cer. SeF_4^- , III)

Fe Fe⁴⁻

Sverdakov A.V. 1992

Tchougreff A.G.
et al

Жл. епркт.

Theor. chim. acta
1992, 83, N5-6, 389-416

ссл.  Mn Fe⁴⁻ (III)

HF-FeF₃

1993

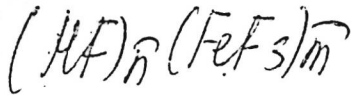
118: 261367p The vapor phase complex HF-FeF₃. An ab initio molecular orbital study. Scholz, G. (Centre of Inorganic Polymers, Rudower Chaussee 5, O-1199 Berlin, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 206(5-6), 555-9 (Eng). Similar to the HF-AlF₃ complex, the HF-FeF₃ complex has a C_s structure. The HF and FeF₃ subunits are nearly undistorted and connected via a long Fe-F bond (~208 pm, MP2 level). The HF subunit has a nearly free rotation about the FeF₃ subunit.

структура

составител.

морем. падам

C.A. 1993, 118, N 26



1997

$m, n = 1, 2$

Scholz f. et al.,

cmp-ra,
cmasub.
meopem-
pavem

J. Fluorine Chem. 1997,
86 (2), 181-42



Хлориды, бромиды,
иодиды Fe

1998

Akdeniz, Z; et al.,

суп-ра, Nuovo Cimento Soc. Ital.
физ., 1998, 20D (5),
теор. 595-605
расчет

(ал. хлориды, бромиды, иодиды Al, III)