

Fe-B, Al,

Ga, In, Tl

$Mg_3(BO_3)_2$, $FeBO_3$, Fe_3BO_5 ,
 Fe_3BO_4 , Fe_3BO_6 , $Mg_3BO_3F_3$,
 $B-Mg_2BO_3F$, $\Delta-Mg_2BO_3F$;
 $Mg_5(BO_3)_3F$

Сукнев В.С.,

1969
9
6
Vi
7381

Ж. прикл. спектроскоп., 1969, 11, №6, 1111-
- 12 (русск.)

Щедро красные сведения введутся
перепроверка по данным с учетом
атомов.

Ю 14

СН1970/12, 122, 1163/3V

1970

Ғе-боратн

Сукнев В.С.

ИК-спектр

Ж. прикл. спектроско-
пии, 1970, 12, n 3, 491

● (См. Мд-боратн) III

$\text{Fe}_2\text{B}_2\text{O}_5$

Сукнев В.С.

1920

ν_i

ИК-спектр

ис. прик. 1. спектроск.,
12(1), 76-9.

● (ис. $\text{Mg}_2\text{B}_2\text{O}_5$)/III

50512.8459

Ch, TC, MGU

(asc. электр)
41197

FeAlCl₆

1975

X 4-8921

Shieh Chyi-Feng, Gregory N.W.

Spectrophotometric study of the vapors of iron(III) chloride and aluminum (III) chloride. Evidence for formation of mixed metal dimer molecules.

"J. Phys. Chem.", 1975, 79, N 8, 828-833

(2471)

340 343

3

0357 ГМК ВИННТИ

FeBO_3 121 Б156. Оптические и магнито-оптические спектры. FeBO_3 в области сильного поглощения. Malakhovskii A. V., Edelman I. S. Optical and magneto-optical spectra of FeBO_3 in the region of strong absorption. «Phys. status solidi (b)», 1976, 74, № 2, K145—K149 (англ.)

-1976

оптиг.
и магн.
спектры

Исследованы оптический и магнито-оптический спектры слабого ферромагнетика FeBO_3 в области сильного поглощения. Коэффициенты поглощения α в области энергий меньших 3,05 эв измерены в проходящем свете; действительная часть диэлектрической проницаемости ϵ' и коэф. поглощения при энергиях больших 3,05 эв измерены в отраженном свете. Параметры действительной (g') и мнимой (g'') частей недиагональной компоненты тензора диэлектрической проницаемости рассчитаны из спектров поперечного эффекта Керра и оптических констант. Найдено четыре резонанса на кривой g'' при энергиях: $E_1=2,8$ эв, $E_2=3,05$ эв, $E_3=3,38$ эв и $E_4=3,76$ эв, отнесенные к следующим $d-d$ -переходам: ${}^6A_{1g} \rightarrow {}^4A_{1g}$, ${}^4E_g({}^4G)$; ${}^4T_{2g}({}^4D)$; ${}^4E_g({}^4D)$ и ${}^2A_{1g}({}^2I)$, соотв. Дана оценка магнито-оптической активности ${}^6A_{1g} \rightarrow {}^4A_{1g}$, ${}^4E_g({}^4G)$ -перехода: $g''/\epsilon'' \approx 0,11$. И. Ф. Голованева

X 1976
N21

$\text{Fe}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

$\text{Co}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

$\text{Ni}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

(Di; E)
X. 1976
N 20

20 Б176. Исследование кристаллогидратов неорганических солей. Сообщение 8. Интерпретация колебательных спектров $\text{M}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, где $\text{M} = \text{Fe}^{2+}$, Co^{2+} и Ni^{2+} . Manewa Maria. Untersuchungen an Kristallhydraten anorganischer Salze, 8. Mitt. Interpretation der Schwingungsspektren von $\text{M}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, für $\text{M} = \text{Fe}^{2+}$, Co^{2+} , Ni^{2+} . «Monatsch. Chem.», 1976, 107, № 2, 337—343 (нем.; рез. англ.)

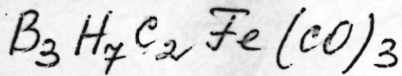
Получены ИК-спектры и спектры КР в области 4000—160 cm^{-1} $\text{M}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (I), где $\text{M} = \text{Fe}^{2+}$ (Ia), Co^{2+} (Iб), Ni^{2+} (Iв). Частоты сим. и асим. вал. кол. OH-группы расположены при 3460—3480 cm^{-1} и 3520—3560 cm^{-1} , соотв.; деф. кол. H_2O при 1620—1635 cm^{-1} . Эти данные указывают на наличие в Ia—Iв связей $\text{H}_2\text{O} \cdots \text{H}_2\text{O}$. Расщепление частоты ν_3 на 3 компоненты свидетельствует об образовании связи $\text{OH} \cdots \text{F}_4\text{B}^-$, энергия к-рой для Ia, Iб и Iв 3,75; 3,67; 3,33 ккал/моль, соотв.; $f_{\text{OH}} \cdot 10^5 = 6,77$; 6,77; 6,81 дин/см, соотв.; $f_{\text{H}_2\text{O}} \cdot 10^4 = 1,17$; 1,30; 1,71 дин/см; $\tau_{\text{OH}} = 0,988$; 0,987; 0,985 Å. Наличие $\nu_{\text{B}(\text{H}_2\text{O})}$ в спектрах Ia, Iб и Iв при 675, 570, 465; 712, 580, 475; 770, 635, 485 cm^{-1} , соотв. указывает на присутствие двух типов молекул H_2O , участвующих в связях $\text{BF}_4^- \cdots \text{HOH} \cdots \text{F}_4\text{B}^-$ и $\text{H}_2\text{O} \cdots \text{HOH} \cdots \text{F}_4\text{B}^-$. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1973, М. Дейчмейстер 8Б901.

1976

ВР-ХИ-3196

(72)

X



1977

Электрон.
строение,

15 Б54. Электронное строение дикарбациклопентаборанил-трикарбонила железа, $\text{B}_3\text{C}_2\text{H}_7\text{Fe}(\text{CO})_3$. Armstrong D. R., Findlay R. H. The electronic structure of dicarbacyclopentaboranyliron tricarbonyl, $\text{B}_3\text{C}_2\text{H}_7\text{Fe}(\text{CO})_3$. «Inorg. chim. acta», 1977, 21, № 1, 55—59 (англ.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП рассчитано электронное строение комплекса $\text{B}_3\text{C}_2\text{H}_7\text{Fe}(\text{CO})_3$, а также его фрагментов: нейтр. карборана, его дианиона, нейтр. группы $\text{Fe}(\text{CO})_3$ и ее дикатиона $\text{Fe}(\text{CO})_3^{2+}$. В качестве базиса использован миним. набор орбиталей слейтеровского типа с включением $4p$ -АО Fe, причем каждая орбиталь аппроксимирована пятью гауссовыми функциями. Данные о геометрии комплекса взяты из рентгеноструктурных исследований, тогда как геометрич. конфигурация фрагмента $\text{Fe}(\text{CO})_3$ (нейтр. и дикатиона) была оптимизирована (углы между связями Fe—C со-

X. 1977 N 15

ставляют 100° и 113° , инверсионные барьеры — 288 и 128 кДж/моль, соотв.). Из данных анализа заселенностей следует, что на карборановом кольце заряд равен 2,03 заряда электрона — e , а фрагмент $\text{Fe}(\text{CO})_3$ заряжен положительно, причем эффективный заряд атома $\text{Fe} \approx +2,8 e$. Электронное строение карборанового кольца и группы $\text{Fe}(\text{CO})_3$ в комплексе близко к строению соотв-щих изолированных фрагментов $\text{B}_3\text{C}_2\text{H}_7^{2-}$ и $\text{Fe}(\text{CO})_3^{2+}$. Этот результат, а также отриц. заселенности перекрывания между атомом Fe и атомами карборанового кольца свидетельствуют, по мнению авторов, о ионном характере связи между фрагментами, что находится в соответствии с высказанными ранее предположениями (см. РЖХим, 1974, 8Б467). Н. М. Клименко

ленн.

Х_α М

$Fe_2(CO)_6 B_2H_6$

1979

$Fe_2(CO)_6 S_2$

2 Д139. Относительные энергии связи металл — металл и несвязывающие молекулярные орбитали в мостиковых комплексах с двумя атомами железа. Relative energies of metal-metal bonding and nonbonding molecular orbitals in bridged diiron complexes. Andersen E. L., Fehlner T. P. «Inorg. Chem.», 1979, 18, № 8, 2325—2326 (англ.)

фотоэлектронные
спектры

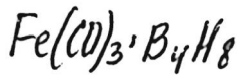
Получены фотоэлектронные спектры молекул $Fe_2(CO)_6 B_2H_6$ и $Fe_2(CO)_6 S_2$ для HeI- и NeI-источников излучения. Первая полоса в спектрах в области потенциалов ионизации 8—10 эВ. отнесена к ионизации d -

электронов. Внутри этой полосы выделены пики, отвечающие молекулярным орбиталям связи металл — металл.

А. Ф. Шестаков

ф. 1980 №2

(71) 7



Электрон.
строение

17

2.1980.116

6 Б25. Вклад фрагментов $\{\text{Fe}(\text{CO})_3\}$ в образование связи в металлоборановых аналогах пентаборана (9). Brint P., Spalding T. R. The contribution of $\{\text{Fe}(\text{CO})_3\}$ units to bonding in metalloborane analogues of pentaborane (9). «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1979, 15, № 9—10, 355—359 (англ.)

Расчет электронного строения B_5H_9 (I) и $\{\text{Fe}(\text{CO})_3\text{-B}_4\text{H}_8\}$ (II) проведен в приближении РМХ. Для вычисления резонансных интегралов H_{ij} использовано приближение Вольфсберга — Гельмгольца, модифицированное Гоффманом так, чтобы избежать противоречащего интуиции смешивания орбиталей (М.-Н. Whangbo, P. Hoffman «J. Chem. Phys.», 1978, 68, 5498). Порядок энергетич. уровней МО качественно согласуется со значениями, полученными в неэмпирич. расчетах, а также с данными фотоэлектронных спектров. Заселенность перекрывания фрагмента $\text{L}[\text{L}=\text{BH}, \text{Fe}(\text{CO})_3]$ с остальной частью кластера слабо зависит от того, находится ли L в главной плоскости системы или вне ее; в то же время природа связи в этих случаях различна. В 1-м случае существенный вклад в связь дает взаимодействие L с мостиковыми атомами H , а во 2-м — связь целиком обусловлена взаимодействием L с соседними атомами B . В целом, связь $(\text{CO})_3\text{Fe-B}_4\text{H}_8$ значительно

1979

а более связи $\text{HB}-\text{B}_4\text{H}_8$, а связи $\text{B}-\text{B}$ в случае II проч-
е связей $\text{B}-\text{B}$ в I.

О. Гриценко



$\text{Fe}(\text{CO})_3 - \text{B}_x\text{H}_y$

1980

Кв. мех.
расчет
кластеров

2 Б17. Оценка «изоэлектронно-изолабального» описания фрагментов, образующих кластеры. Brint R. P., Pelin K., Spalding T. R. Evaluation of the «iso-electronic-isolobal» description of cluster bonding units. «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1980, 16, № 6, 391—396 (англ.)

В валентном приближении методом типа РМХС самосогласованием по зарядам рассчитаны пр-ные борана B_5H_9 , в к-ром апикальная и базальная группы ВН заменены металлофрагментом $\text{Fe}(\text{CO})_3$, а также боран B_6H_{10} и четыре изомера, получающиеся при замене одной из его ВН групп на группу $\text{Fe}(\text{CO})_3$, а также кластер $\text{Fe}_5(\text{CO})_{15}\text{C}$. В подтверждение сделанного ранее вывода («Inorg. Nucl. Chem. Letters», 1979, 15, 355) установлено, что в металлопр-ных боранов в связи

X.1981 IV 2

фрагмента $\text{Fe}(\text{CO})_3$ с кластером эффективно участвуют не три орбитали и два электрона, как у группы BH , а две орбитали и один электрон. Напротив, в кластере $\text{Fe}_5(\text{CO})_{15}\text{C}$ кластерная связь каждой из групп $\text{Fe}(\text{CO})_3$ осуществляется с одинаковой эффективностью тремя орбиталями этой группы.

Н. Гамбарян

FeB_x

Электр.
спектроскоп.

15 Б109. Исследование боридов железа. I. Электронная спектроскопия. Joynner David J., Johnson Oliver H., Hucules David M. A study of the iron borides by electron spectroscopy. «J. Amer. Chem. Soc.», 1910—1917 (англ.)

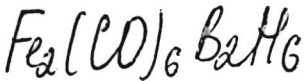
Проведение исследования основных и валентных рентгеноэлектронных спектров (РЭС); а также оже-электронных спектров с рентгеновским (РОС) и электронным (ЭОС) возбуждением в Fe, FeB и Fe₂B. Изменения относительных площадей пиков в РЭС Fe боридов железа показали, что в анализируемых боридов имеют ту же стехиометрию, что и объемные образцы боридов железа. Между энергиями связи основных уровней Fe в FeB, Fe₂B и в металле наблюдается весьма малый хим. сдвиг 0,2—0,4 эВ. В результате учета изменений в атомном объеме и эффектов сверхатомной релаксации сделан вывод о том, что электронные плотности вблизи

1980

ж 1980 № 15

атомов Fe и B в бориды имеют одинаковый характер, и перенос заряда между атомами B и Fe отсутствует. Этот вывод подтвержден схожестью Fe LMM-ЭОС и РОС в железе и бориды и одинаковыми энергиями плазмонов, полученными из основных РЭС во всех образцах. Результаты проведенных экспериментов указывают на наличие локализованной связи между атомами B и FeB (ковалентная связь) и изолированными атомами B в Fe₂B. Связь B—Fe во всех исследованных соединениях является металлической. Форма РЭС валентной зоны также указывает на металлич. св-ва боридов. Валентная зона в бориды по сравнению с металлом Fe уширяется и появляется нек-рая ТС, обусловленная изменениями в *d*-подзоне. И. А. Тополь

1981



7 Б154. Электронное строение дижелезоферроборанов. Andersen E. L., DeKock R. L., Fehlinger T. P. Electronic structure of diiron ferraboranes. «Inorg. Chem.», 1981, 20, № 10, 3291—3298 (англ.)

Измерены фотоэлектронные спектры, возбужденные излучением He-I и Ne-I, и УФ-спектры поглощения $\text{Fe}_2(\text{CO})_6\text{B}_2\text{H}_6$ (I) и $1,2\text{-Fe}(\text{CO})_3\text{B}_3\text{H}_7$ (II). Интерпретация спектров основывалась на эмпирич. критериях и расчетах I и II методами МО Хюккеля и Фенске—Холла. Анализ первых потенциалов ионизации (ПИ) I (8,2, 8,8, 9,1, 10,1 и 11,9 эВ) и II (8,5, 9,0, 9,4, 10,0 эВ) показывает, что они обусловлены ионизацией 3d-АО атома Fe и 2p-АО атома B. Изменение ПИ при переходе от I к II объяснены различиями в зарядах атомов Fe. Это подтверждается обеими сериями квантовохим. расчетов, к-рые показывают, что заряд лежащего в плоскости боранового скелета атома Fe в II приблизительно равен зарядам атомов Fe в I, тогда

Электрон.
строение

Х. 1982, 19, 17.

как заряд другого атома Fe II в 1,5—2 раза меньше. Полосы поглощения I и II в видимой и ближней УФ-области относятся к переходам в фрагменте $\text{Fe}_2(\text{CO})_6$, их характер свидетельствует, что низшая вакантная МО является разрыхляющей орбиталью связи Fe—Fe.

В. Фаустов

Fe_2B
 FeB

ab initio
pacem

1981

/ 95: 192592a Study of the iron borides. IV. Relation of bonding to structure and magnetic behavior from photoemission experiments and ab initio calculations. Joyner, David J.; Johnson, Oliver; Hercules, David M.; Bullett, David W.; Weaver, John H. (Dep. Chem., Univ. Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1981, 24(6), 3122-37 (Eng). Angle-integrated-photoelectron-spectroscopy measurements with synchrotron radiation ($15 \leq h\nu \leq 160$ eV) were performed on the interstitial compds. Fe_2B and FeB . They show the Fe states for FeB within ~ 4 eV of E_F (Fermi level) and boron states at 6.6 eV (B 2p), 10.5 eV (B 2sp bonding), and 14.0 eV (B 2s). The B states for Fe_2B are less intense, with B 2s nearer E_F , and with greater overlap of B 2p-Fe 3d states. When corrections are made for relaxation effects there is a good agreement between the exptl. photoelectron-emission data, the B states obsd. in soft-x-ray-emission boron-K measurements, and the Fe and B states from an ab initio calcn. Electronic-structure models are proposed for Fe_2B and FeB which differ from earlier charge-transfer models. These include a change in the Fe 3d configuration (and valence band), a provision for covalent bonding in the B chain of FeB , greater Fe 3d-B 2p interaction in Fe_2B than in FeB , and a predominantly metallic binding in both borides. This model accounts for the metallic nature, the brittleness, the ferromagnetism, and the local moments of the Fe borides, and also appears applicable to amorphous Fe-B compds.

C.A. 1981, 95, N22.

Fe Al Lommuu 11358 1981.

Pechter K., et al.

мен;
2;
расчет

Monatshefte Chem.,
1981, 112, 317-33.

$\text{Fe Al}_2\text{Cl}_8 (2)$ (summa 12800) 1981.

Schäfer H., et al.

m.g. eb-ba,
mass - skript

Z. anorg. und allg.
Chem., 1981, 478,

57 - 64.

1- $\text{Fe}(\text{CO})_3 \text{B}_4 \text{H}_8$

1982

2- $\text{Fe}(\text{CO})_3 \text{B}_4 \text{H}_8$

De Kock R. L.,

1,2- $[\text{Fe}(\text{CO})_3]_2 \text{B}_3 \text{H}_7$

Fehlner T. P.

сироевее,

Polyhedron, 1982, 1,

N 6, 531-532.

теорет.

расчет

(сир. $\text{B}_5 \text{H}_9$; $\overline{\text{II}}$)

$[C_2B_3H_5Fe(CO)_3]$ 1982
 $[B_5(CO)_2H_3Fe(CO)_3]$ Pelin W. Kevin,
 $[B_4H_6\{Fe(CO)_3\}_2]$ Spalding Trevor R., et al.
 $[B_3H_5\{Fe(CO)_3\}_3]$ J. Chem. Res. Synop., 1982,
 $[B_5H_5Fe(CO)_3]^{2-}$ NS, 120. J. Chem. Res.
 $[B_5H_7Fe(CO)_3]$ microfiche, 1982, N13 -
 $[B_4H_4\{Fe(CO)_3\}_2]^{2-}$ N14, 1335-1356.
 во.вв.рмв,
 структура (ср. $B_6H_6^{2-}$; III)

$(\eta^5-C_5H_5)(CO)_2FeB_2H_5$

1983

9 Д580. УФ-фотоэлектронные спектры и электронная структура $(\eta^5-C_5H_5)(CO)_2FeB_2H_5$. Сравнение связи Fe—B со связью Fe—C в $(CO)_4FeC_2H_4$. UV photoelectron spectra and electronic structure of $(\eta^5-C_5H_5)(CO)_2FeB_2H_5$. Comparison of the Fe—B bonding with the Fe—C bonding in $(CO)_4FeC_2H_4$. DeKock Roger L., Deshmukh Prabodh, Fehlner Thomas P., Housecroft Catherine E., Plotkin Jeffrey S., Shore Sheldon G. «J. Amer. Chem. Soc.», 1983, 105, № 4, 815—822 (англ.)

У;

Изучены HeI- и NeI-фотоэлектронные спектры комплекса $(\eta^5-C_5H_5)(CO)_2FeB_2H_5$ (I). Вертикальные потенциалы ~~ионизации I~~ равны (в эВ): 8,61; 8,93; 9,63; 10,40; 11,45; 11,99; 13,94. Спектр I интерпретирован путем сравнения с фотоэлектронными спектрами родственных соединений, анализа относит. интенсивных по-

(H) 

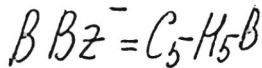
фр. 1983, 18, N 9

лос в HeI- и NeI-спектрах, на основе расчетов МО в формализме Фенске—Холла. Проведен сравнительный анализ электронных структур I и $(\text{CO})_4\text{FeC}_2\text{H}_4$ (II). Показано, что фрагмент B_2H_5 в I можно рассматривать как $\text{B}_2\text{H}_4^{2-}$. Приведены карты электронных плотностей для некоторых МО I и II, иллюстрирующие характер связывания лигандов с атомом Fe. Библ. 24.

Ю. В. Чижов



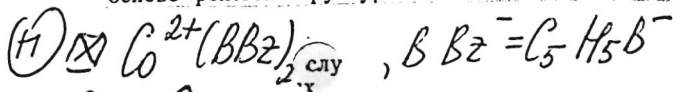
1983



9 Б1024. Изучение методом молекулярных орбиталей химической связи, структуры и реакций замещения бис(борабензол)железа. Molecular orbital study of bonding, structure, and substitution reactions of bis(borabenzene)iron. Kostić Nenad M., Fenske Richard F. «Organometallics», 1983, 2, № 10, 1319—1325 (англ.)

расчет

Методом ССП МО ЛКАО в приближении Фенске — Холла (Hall M. B., Fenske R. F. «Inorg. Chem.», 1972, 11, 768) проведены расчеты сэндвичевых комплексов $\text{M}(\text{BBz})_2$ (I), где $\text{M} = \text{Fe}^{2+}$ и Co^{2+} , а BBz^- — борабензольный анион $\text{C}_5\text{H}_5\text{B}^-$. Использованная процедура включала вычисление орбиталей отдельных фрагментов и их последующее объединение, контролируемое итерациями. Межатомные расстояния и углы приняты на основе рентгеноструктурных данных для $(\text{C}_5\text{H}_5\text{BCH}_3)_2$.



X. 1984, 19, № 9

Со. Согласно полученным результатам основную роль в I играют перенос π -электронов колец на орбитали металла и дативное взаимодействие δ -типа между электронами металла и колец. Заметный вклад в связь металл — лиганд вносят $4p$ -орбитали М. Энергетич. последовательность $3d$ -уровней М в I такова: $d_{\delta}(x^2-y^2) < d_{\delta}(xy) < d_{\delta}(z^2) \ll d_{\pi}(yz) < d_{\pi}(xz)$. На основе критериев максимума π - и δ -перекрывания и минимума энергии дана интерпретация эксперим. факта, согласно к-рому атом М в I расположен ближе к атому С (в пара-положении), чем к атому В. Предсказанная степень смещения колец в параллельных плоскостях борбензольных колец согласуется с экспериментальной для двух комплексов кобальта. Перекрывание Fe—VBz практически не меняется при вращении колец, поскольку соотв. МО имеют цилиндрич. симметрию, что не позволяет сделать выбор оптим. конфигурации ротамера. Сопоставление ротамеров по энергии указывает предпочтительность конформации, в к-рой атомы В обоих колец находятся в транс-положении. Кажущееся расхождение критериев максим. перекрывания и минимума энергии объяснено важной ролью нековалентных взаимодействий в I. Обсуждена р-ционная способность I по отношению к р-циям нуклеофильного и электрофильного замещения.

Э. Герман

Fe-B

1986

105: 87985h Moessbauer spectroscopic study on bonding characteristics of iron in iron-boron and iron-phosphorus amorphous alloys. Tanaka, Katsuhisa; Soga, Naohiro; Hirao, Kazuyuki; Kimura, Kunio (Fac. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan). *J. Appl. Phys.* 1986, 60(2), 728-31 (Eng). An expression for the temperature dependence of recoil-free fraction of Fe atoms was derived from the 2-band theory proposed previously by the present authors, and it was applied to investigate the bonding characteristics of Fe in amorphous $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$, $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$, and $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ alloys. The characteristic temps. were $\theta_1 = 605$ K and $\theta_3 = 230$ K for amorphous $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$, $\theta_1 = 655$ K and $\theta_3 = 185$ K for amorphous $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$, and $\theta_1 = 425$ K and $\theta_3 = 185$ K for amorphous $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$. The comparison between these values with those obtained from the specific-heat measurements showed a good agreement for θ_1 , which is a measure of interat. bond strength, indicating that metalloid atoms are not connected to each other in these Fe-metalloid binary amorphous alloys, but are bonded to Fe atoms. Based on this result, the force const. was estd. for Fe-B, Fe-P, and Fe-Fe bonds. The values of θ_3 obtained from the Moessbauer study were significantly different from those obtained from specific-heat measurements.

(+2) ☒

(Coul. norm-
clay)

C. A. 1986, 105, N10

Fe-P, Fe-Fe

FeAl

1987

структура,
теорет.
расчет



107: 183836x Electronic structure of aluminum compounds with 3d transition metals. Khalilov, I. Kh.; Abdurakhmanov, A. A.; Gavrilov, E. S.; Ninalalov, S. A. (Dagest. Politekh. Inst. Makhachkala, USSR). *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Fiz.* 1987, 30(3), 98-103 (Russ). The energy spectrum, d. of states, AO occupation nos., and electronic heat capacity of FeAl, NiAl, and CoAl compds with CsCl-type structure were calcd. by using a model Hamiltonian and an interpolation method. The stability of these compds. is discussed.

NiAl, CoAl (структура,
теор. расчет)

(45)

с. А. 1987, 107, N 20

FeAl, NiAl, CoAl
(ср. теорет.)

Fe_3BO_6

Дм. 25994

1987

Коваленко П. П., Лабун-
кин В. Р. и др.,

фазов.
переход,
 T_N

Физ. тверд. тела
(Ленинград), 1987,
593-596.

29, N2, ●

$Al_{71}Fe_{19}Si_{10}$ [Om. 26436]

1987

Maurer M., Van den Berg J.
et al.,

Gp;
Europphys. Lett., 1987,
3, N10, ● 1103-1108.

Fe3 B

(от 28777)

1988

Касюшкин С.Д., Толмачев И.
ΔH,
оценка изв. вузв. Чер. Металлур-
гии, 1988, №3, 4-6.

Прикладные
исследования
неких борцов

оценка методом
метастабиль-
ности МЗВ.

FeAlCl_6 Nalbandian L., 1988-1989
Papatheodorou G. N.,

спектр КР High. Temp. Sci. 1988-1989.
28 Spec. Vol. C. 49-65.

(с.с. ● FeCl_6 ; III)

AlFeCl_6

1989

©15 Б1196. Молекулярные колебания Fe_2Cl_6 (газ.) и AlFeCl_6 (газ.). Molecular vibrations of $\text{Fe}_2\text{Cl}_6(\text{g})$ and $\text{AlFeCl}_6(\text{g})$ / Nalbandian L., Papatheodorou G. N., Cyvin B. N., Brunvoll J., Cyvin S. J. // Spectrosc. Lett.—1989.— 22, № 1.— С. 1—13.— Англ.

Для димера Fe_2Cl_6 рассчитаны частоты нормальных колебаний, хорошо совпадающие с эксперим. лит. данными для ИК- и КР-спектров в газовой фазе. Измерены спектры КР AlFeCl_6 в газовой фазе, рассчитанные и измеренные частоты КР-активных колебаний этого димера находятся в хорошем согласии. Расчитаны амплитуды колебаний для молекул Al_2Cl_6 , AlFeCl_6 и Fe_2Cl_6 . С. Г. Казарян

М. А.

х. 1989, N 15.

(+2) 15

FeAlCl₆

Nalbandian L., Papat-¹⁹⁸⁹
heodorou & N.,

спектр
концентрац.
расчет-
Di, спектр.

High Temp. Sci. 1988,
(Pub. 1989), 28, 49-65

● (see FeAlCl₆, III)

FeBO_3

1992

117: 222245g Raman scattering in iron borate (FeBO_3) at high pressures: phonon coupled to spin-pair fluctuations and magnetodeformation potentials. Massey, M. J.; Merkle, S. M.; Girvin, S. M. (Harrison M. Randall Lab. Phys., Univ. Michigan, Ann Arbor, MI 48109-1120 USA). *Phys. Rev. Lett.* 1992, 68, 2299-302 (Eng). The first direct measurement of the modulation of the magnetic superexchange parameter J by optical phonons is reported. High-pressure Raman scattering studies of the compound FeBO_3 reveal an unexpectedly large interaction between the $(\text{BO}_3)^{3-}$ internal mode and spin-pair excitations. By pressure tuning J , resonant decay of the phonon into the two-magnon continuum and assoc. mixing were obsd. yielding a phonon-magnon coupling const. $g \approx (0.15-0.20)J$.

(CKP)

C. A. 1992, 117, N22

Fe₄B

1992

9 Б1021. Электронная структура атомного кластера Fe₄B /Shi Shuang-he, Wang Xu-wei, Chen Jin-chang //Wuli xuebao = Acta phys. sin .—1992 .—41 ,№ 6 .—С. 929—936 .—Кит. ;рез. англ.

Спин-поляризованным методом ССП X α -рассеянных волн рассчитана электронная структура кластера Fe₄B симметрии T_d. Приведены орбитальные карты электронной плотности, орбитальные диаграммы, графики плотностей одночастичных состояний. Обсуждено влияние атомов бора на структуру кластера. А. В. Немухин

М.П.

Х. 1993, N 9

Flex-y By

1992

Stepanyuk V.S.,
Grigorenko B.L. et al.

meop.
pavrim

NATO ASI Ser., Ser. C
1992, 374, 471-7.

(see. Ni_x ; III)

AlFe

1994

Behm J.M., Morse M.D.,

J. Chem. Phys., 1994, 101,
N8, 6800 - 6871.

re,
 $\chi^5 \Pi_i$

(all. AlMn; III)

Fe₃Al

1996

124:271847h Thermal expansion study of ordered and disordered Fe₃Al: an effective approach for the determination of vibrational entropy. Mukherjee, Goutam Dev; Bansal, C.; Chatterjee, Ashok (Sch. Phys., Univ. Hyderabad, Hyderabad, Ire. 500046). *Phys. Rev. Lett.* 1996, 76(11), 1876-9 (Eng). Thermal expansion measurements have been performed on chem. disordered and D0₃ ordered Fe₃Al alloy by using the capacitance dilatometric method. A semiclassical model was used to obtain the anharmonicity parameters and accurate values of the Debye and Einstein temps. An est. of the vibrational entropy difference between the ordered and disordered phases of the alloy is also obtained by using this approach.

(D₈)

C.A. 1996, 124, N20

$\text{Fe}(\text{CO})_5 \cdot \text{BF}_3$

1998

radius, Udo , et al.;

Do, Inorg. Chem. 1998,
racem 37(5), 1080 - 1090

(calc. $\text{Fe}(\text{CO})_5 \cdot \text{N}_2$; π)

1999

F: AlFeCl₆

P: 3

131:264095 Structure and vibrational spectra of
the vapour molecules Fe₂C AlFeCl₆. Akdeniz, Z.;
Tosi, M. P. Abdus Salam International Center
Theoretical Physics Trieste I-34014, Italy Z.
Naturforsch., A: Phys. Sci. 54(8/9), 477-481
(English) 1999 Melting of aluminum and iron
trichloride crystals is accompanied by a structural
transition from octahedral to tetrahedral
coordination of the ions, and a widely accepted
interpretation of their liq. structure is tha
mainly consists of strongly correlated dimeric
units. Such Al₂Cl₆ and Fe mols. are stable in the

vapor phase and coexist in gaseous mixts. together AlFeCl_6 mols. In this work we extend to Fe_2Cl_6 and AlFeCl_6 our earlier s the ionic interactions in Al_2Cl_6 [Z. Akdeniz and M. P. Tosi, Z. Naturforsch 54a, 180 (1999)], using a model which accounts for ionic deformability th (i) effective valences and (ii) electrostatic and overlap polarizabilitie main disposable parameters of the model are adjusted to the Fe-Cl bond le FeCl_3 monomer mol. and to the Fe-Fe bond length and a bond-stretching fre in the Fe_2Cl_6 mol. The results are used to evaluate the structure of the AlFeCl_6 mol., which has so far only been inferred from the obsd. Raman sp in mixed vapors. Extensive comparisons with data on mol. vibrational frequencies are also presented for Fe_2Cl_6 and AlFeCl_6 .

1999

F: FeAl

P: 3

132:15758 Electronic structure and physical properties of FeAl. Gao, Y.; J Zhong, X. P. Department of physics, Guangxi University Nanning 530004, Peop. Rep. China Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.), 12(4), 488-491 (English) 1999 The electronic structure of FeAl is detd. by a one-cell-state method and the potential energy curve, lattice const., cohesive energy, bulk elastic modulus, and the variation of the linear thermal expansion coeff. with t_e calcd.

C. A. 2000, 132

FeAlCl₆

[Om. 40260]

2000

Scholz F., Curtiss L.A.,

J. Mol. Spect. (Theochem)

2000, 507, 245-257.

констан-
тамент,
qb initio
param

Feb 2

2001

Vajcson P. et al.,

Phys. Rev. B: Condens.
Matter Mater Phys.

2001, 63 (4), 045115/1 —

045115/12

(cur. Se ● B₂ ; III)

неопределенно
некомп.
comp - m
и сб - б б
огр. фн.
сост.
Δ₅ H₁ Ge и др.

Fe B₃₆ N₃₆

2009

135: 157920d High-resolution electron microscopy and structural optimization of C₃₆, B₃₆N₃₆ and Fe@B₃₆N₃₆ clusters. Oku, T.; Suganuma, K. (Industrial Research, Osaka University, Ibaraki, Osaka,

Japan 567-0047). *Diamond Relat. Mater.* 2001, 10(3-7), 1205-1209 (Eng), Elsevier Science S.A. At. structures and the structural stability of C₃₆ and B₃₆N₃₆ clusters were investigated by high-resoln. electron microscopy and MO/mechanics calcns. The obsd. high-resoln. image was related to a Fe@B₃₆N₃₆ metallofullerene structure, and a structure model was constructed. Total energy calcns. of the clusters showed that the C₃₆, B₃₆N₃₆ and Fe@B₃₆N₃₆ are stable in this order. Image simulations of these clusters agreed well with obsd. images, which confirmed the proposed structure models.

CMY 79

Fe Al

[UM 41 295]

2002

D.A. Papaconstantopoulos and
C. Stephen Hellberg,

Phys. Rev. Lett., 2002,
89, N2, 029701-1.

Comment on , Correlation

Induced Paramagnetic
Ground State in FeAl.



FeAl

2000

F: Al-Fe-Si FeAl - спикаты (ΔH_f)

P: 1

02.06-19Б3.21. Энтальпии образования сплавов Al-Fe-Si ('tay'[5], 'tay'[10], 'tay'[1], 'tay'[9]). Enthalpy of formation of Al-Fe-Si alloys ('tay'[5], 'tay'[10], 'tay'[1], 'tay'[9]) / Li Y., Ochir P., Quivy A., Telolahy P., Legendre B. ТТ J. Alloys and Compounds. - 2000. - 298, N 1-2. - С. 198-20 Англ.

В калориметре Тиана-Кальве посредством растворения в алюминиевой ванне при температуре 800°C измерены энтальпии образования тройных сплавов Al-Fe-Si. После левитационного плавления сплавы были отожжены до их однофазного состояния, которое было исследовано методом РСТА, а с помощью атомной абсорбционной спектроскопии были определены точные составы сплавов. Приве значения энтальпий образования фаз 'tay'[5], 'tay'[10], 'tay'[1] и 'tay'[при температуре 298 К. Библ. 20.

FeB_2

om. 42089

2001.

ΔH_f ,
(paezei)

P. Vajeeston, P. Ravindran,
C. Ravi, R. Asokamani
Phys. Rev., B, v. 63, 2001 2,
63.045115. ctp 1-12.

Electronic structure, bonding
and ground-state properties
of AB_2 -type transition-metal
diborides

Fe Bx

Термоод.

ф-ции

F: Fe[n]B[m]
P: 1

FeBx (Термоод. ф-ции) 2001

02.04-19БЗ.4. Термодинамические свойства боридов железа / Зайцев А. И. / Ж(физ. химии. - 2001. - 75, N 10. - С. 1746-1749. - Рус.

Получены термодинамические функции боридов железа при исследовании сплаво разного состава в различных экспериментальных условиях. Они хорошо соглас с наиболее достоверными экспериментальными результатами и могут быть рекомендованы для термодинамических расчетов. Рекомендованные в справочны изданиях Knacke O., Kubaschewski O., Hesselmann K. Thermochemical Propert of Inorganic Substances. 2{nd} ed. Berlin: Springer-Verlag, 1991, Kubasch O., Alcock C. B., Spencer P. J. Materials Thermochemistry. 6{th} ed. Oxfo Pergamon Press, 1993, Chart T. G. Critical Assessment of Thermodynamic Da for the Iron-Boron System. National Physical Laboratory of U.K. Teddington Middlese. England, 1982. P. 6-1-6-19 величины расходятся с имеющимися экспериментальными данными. Библ. 16.

$\text{Al}_{0,28}\text{Fe}_{0,72}$

2001

F: $\text{Al}[0,28]\text{Fe}[0,72]$ (ΔH_f)
P: I

03.02-19Б3.22. Стандартная энтальпия образования $\text{Al}[0,28]\text{Fe}[0,72]$ при 298 Standard enthalpy of formation of $\text{Al}[0,28]\text{Fe}[0,72]$ at 298 K / Feutelais Y Legendre B., Guymont M., Ochin P. // J. Alloys and Compounds. - 2001. - 3 1-2. - С. 184-189. - Англ.

Определили стандартную энтальпию образования 'ДЕЛЬТА'[f]H[m, (298)] для соединения $\text{Al}[0,28]\text{Fe}[0,72]$ с помощью калориметра Tian-Calvet (Setaram) растворение железа в алюминиевой ванне при 800pC (1073 K). Монокристаллич сплав приготовили плавлением в подвешенном состоянии с последующим отжигом. Получили экспериментальное значение 'ДЕЛЬТА'[f]H[m, (298)] = -24645' + -'422 Дж/моль. Библ. 15.