

Feby

YCl_4^-
 $FeCl_4^-$

8B213. Спектры комбинационного рассеяния и экстракция растворителями. Ч. II. Спектры ионов четыреххлористого индия и четыреххлористого железа. W. o d w a r d L. A., T a y l o r M. J. Raman effect and solvent extraction. Part II. Spectra of the tetrachloroindate and tetrachloroferrate ions. «J. Chem. Soc.», 1960, Nov., 4473—4477 (англ.).—Исследованы спектры комб. рас. продуктов эфирной экстракции водных растворов хлористого индия и хлористого железа насыщенных хлористым водородом. В обоих случаях установлено, что экстракция содержит тетраэдрич. ионы $InCl_4^-$ и $FeCl_4^-$. Спектр $InCl_4^-$ (частоты в cm^{-1}): $\nu_1 = 321$ (поляризованное), $\nu_2 = 89$ (деполяризованное), $\nu_3 = 337$ (деполяризованное), $\nu_4 = 112$ (деполяризованное); $FeCl_4^-$ — $\nu_1 = 330$ (поляризованное), $\nu_2 = 106$, $\nu_3 = 385$, $\nu_4 = 133$. В спектре водного раствора хлористого индия, насыщенного хлористым водородом, до процесса экстракции наблюдается только одна широкая линия 983 см^{-1} , принадлежащая, вероятно, к симметричному колебанию связи $In—Cl$ в ионах $InCl_5^{2-}$ и $InCl_6^{3-}$. Библ. 16 назв. Ч. I см. РЖФиз, 1956, № 6, 17977.

В. Пивоваров

Ф. 1961.8

1960

99-88-11-3866

FeCl_4^{2-} - 24B2I4

Green A. M., McBeth K. L. ¹⁹⁶²

"Nature" Engl., 1962, 194, N4827
" стр. 468

Спектры поглощения ионов TiCl_6^{3-} ,
 TiCl_4 , CrCl_4^{2-} , FeCl_4^{2-} и CoCl_4^{2-}

X-I962-24

(δ -состояния), находящихся в хлорид-
ных расплавах.

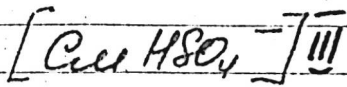
(TiCl_6^{3-})

FeCl₃

сродство
к ионам

VI-6230 1968
Kertes A.S. и др.

Israel Y. Chem
1968, 6, №, 463-470



FeAl₄ -

V_i

und.

u. - 7352

Sanyal N.K. et al. 1970
Indian J. Pure and
Appl. Phys., 8 (2), 72

(see. C₇H₄) III

$FeCl_4^{2-}$

1972

Narayanan V.A., Nagarajan G.

vi Monatsk. Chem. 1972, 103, 1349-59.

cu AsS_4^{3-} ; III

1973

* 4-3822

FeCl₄

7 Д125. Эффективный многоцентровый базисный набор численных АО для расчетов методом молекулярных орбиталей; применение к FeCl₄. Averill F. W., Ellis D. E. An efficient numerical multicenter basis set for molecular orbital calculations: application to FeCl₄. «J. Chem. Phys.», 1973, 59, № 12, 6412—6418 (англ.)

Рассматривается возможность в расчетах ССП МО дискретным вариационным методом (в котором все необходимые матричные элементы векового уравнения вычисляются заменой интегрирования суммированием с некоторыми весами по специально заданному распределению точек) использования численных хартри-фоковских АО. Поскольку хартри-фоковский гамильтониан имеет лишь ограниченное число связанных состояний и виртуальные АО получаются слишком диффузными, предлагается при расширении миним. базиса к хартри-фоковскому га-

расчет

метод

Ф1974 Н7

милльониану добавлять потенциал сферич. потенц. ямы. Параметры ямы подбираются так, чтобы локализовать виртуальные АО, но не слишком сильно испортить занятые АО. Предложенный способ выбора базиса проверен на примере расчета молекулы FeCl_4 в модели ячеечного потенциала в сравнении с расчетами методом ССП-Ха и дискретным вариац. методом с использованием АО слэтеровского типа. Проведены также расчеты дискретным вариац. методом без использования приближения ячеечного потенциала. Обсуждены ошибки приближения ячеечного потенциала и достоинства предложенного способа выбора базиса. А. Багатурьяни

(англ.)
ДОВ Г
черт.

40301.7223
Ph, Ch, Te.

FeCl₄

40892

1973

45-3822

Averill F.W., Ellis D.E.
An effect numerical multicenter basis
set for molecular orbital calculations:
application to FeCl₄.

"J. Chem. Phys.", 1973, 59, N 12, 6412-6418

(англ.)

0056 мкк

038 042

- 0 49

ВИНИТИ

FeCl_4^-

1973

21 Б55. Анализ колебаний тетрагалогенферратов типа $\text{FeCl}_{4-n}\text{Br}_n^-$. Bhavsar G. P., Sathianandan K. Vibrational analysis of tetrahaloferrates of the type $\text{FeCl}_{4-n}\text{Br}_n^-$. «J. Mol. Struct.», 1973, 16, № 2, 343—345 (англ.)

Vi
X
Vi
Выполнен расчет частот и форм нормальных колебаний ионов FeCl_4^- , FeBr_4^- , FeCl_3Br^- , $\text{FeCl}_2\text{Br}_2^-$ и FeClBr_3^- . Из лит. данных по значениям силовых постоянных и структурных параметров вычислены частоты колебаний и дано отнесение эксперим. частот к основным колебаниям этих ионов. М. Р. Алнев

* 45-1039

Х. 1973 N 21

(+2)

⊗

FeCl_4

1974

9 Д145. Электронная структура анионов FeCl_4 в модели Хартри — Фока — Слэтера. Ellis D. E., Averill F. W. Electronic structure of FeCl_4 anions in the Hartree—Fock—Slater model. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 7, 2856—2864 (англ.)

В приближении Хартри — Фока — Слэтера рассчитаны статич. спектры, плотности зарядов и параметры мёссбауэровского изомерного сдвига и квадрупольного расщепления для анионов FeCl_4 .

Электр.
структ.

Ф. 1474. № 9

41220. 8442

Ch, Ph, ETC

FeCl₂-34469

02

1974

*7635

Elumalai K., Radhakrishnan M.

Influence of atomic mass on the coriolis coupling constants in some XY₄-type molecules: XCl₄ molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1974,

12, N 6, 462-463

(англ.)

0261 ДИК

234 238 ,0203

ВИНИТИ

FeCl₄

1974

Sharma D.R.

Pandey A.N., et al

Sp. anim.
Korvet, L
Cm. No. 1.

Z. Naturforsch
1974, 29a N10

1504-6

(ver. TiCl₄; III)

50512.8459

Ch, TC, MGU

(adv. chem.)

41197

 FeCl_3

1975

* 4-8921

Shion 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 ГИИ ВИНТИ

Fe Cl_4^-

Noodleman L.

1976

xb. cuse.
paerem

"J. Chem Phys" 1976, 64,

N6, 2343-2349 (auru)

(cu H_2^+ ; III)

FeCl₄⁻

1978

Mohan S

Сум. поет.
поет. генерол.
расебзмен

Acta cienc. Indica
1978, 4 (4), 371-6.

(Сум. PD₄⁺; III)



Lomnick 10999 | 1980

Boča R., et al.

кв. мет.
пачет,

Int. J. Quant. Chem.

γ^- ; E
Универс

1980, 18, 1361-70.

(Cu. MnCl_4^{2-} ; III)

OMMUCK 11530

1981

$FeCl_3$

Fe_2Cl_6

$FeCl_4^-$

$FeCl_4^-$

$FeCl_2$

$FeCl_2^+$

Кв. экв.
расчет

ср. экв.

С. 4. 1981. 92. 120

94: 163064d Automatic geometry optimization for molecules with d orbitals. III. The EHT method with electrostatic corrections. Beran, S.; Slanina, Z.; Zidarov, D. (J. Heyrovsky Inst. Phys. Chem. Electrochem., Czech. Acad. Sci., 12138 Prague, 2 Czech.). *Int. J. Quantum Chem.* 1981, 19(4), 585-91 (Eng). A procedure is developed for automatic optimization of mol. structures in the EHT method with possible inclusion of electrostatic correction terms, operating with anal. formulas for the first deriv. of the total energy in Cartesian coordinates in the s, p, d basis of Slater orbitals. Illustrative examples are given of optimization of the structural parameters of $FeCl_3$, Fe_2Cl_6 , $FeCl_4^-$, $FeCl_4$, $FeCl_2$, and $FeCl_2^+$ and of optimization of the reaction pathways of the disocn. of Fe_2Cl_6 yielding the other species of the above set. The values are in good agreement with the available exptl. data; this agreement is discussed briefly in connection with the general applicability of the EHT method combined with automatic geometry optimization to theor. study of compds. contg. transition metal atoms.

FeCl_4^-

1981

Shamir Y., et al.

J. Raman Spectrosc.
Vi; 1981, 11(3), 215-220.

●
(Cr. AlCl_4^- ; III)

$[\text{FeCl}_4]^-$

Om. 14800

1982

98: 98103g Resonance Raman studies on tetrachloroferrate(III) and tetrabromoferrate(III) ions. Clark, Robin J. H.; Dines, Trevor J. (Christopher Ingold Lab., Univ. Coll. London, London, UK WC1H 0AJ). *Chem. Phys.* 1982, 70(3), 269-73 (Eng). The resonance Raman spectra of $[\text{Et}_4\text{N}][\text{FeCl}_4]$ in MeNO_2 soln. and of $[\text{Bu}_4\text{N}][\text{FeBr}_4]$ as a KBr disk at ~ 80 K were recorded. Each displays a long progression in the $\nu_1(a_1)$ mode, the former to $\nu_1 = 4$, the latter to $\nu_1 = 11$, together with subsidiary progressions of the sort $\nu_1\nu_1 + \nu_i$, where ν_i is another Raman-active mode. The following spectral parameters have been derived: for $[\text{FeCl}_4]^-$, $\omega_1 = 335.2$, $x_{11} = -0.54 \text{ cm}^{-1}$; for $[\text{FeBr}_4]^-$, $\omega_1 = 203.8$, $x_{11} = -0.35 \text{ cm}^{-1}$. The anomalous polarization of the ν_1 band of $[\text{FeBr}_4]^-$, the geometry of the ions in the 6T_2 excited state, and the bandwidths of the members of the overtone progressions are all discussed.

(ω_1, x_{11})

(+1) ~~12~~ $[\text{FeBr}_4]^-$

C.A. 1983, 98, N 12.

FeCl₄⁻ [Ommuck 16137] 1982

FeCl₄²⁻ Mohan S., Mukerthan A.

М. Н.,
авт. посей.,
среднее
аппрокс.
коэффици.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N 4, 315-317.



[Om. 18783]

1982

Pelikan R, Liška J

pacifier E,
Vi uzomur.

Collect. Czech. Chem

Commun., 1982,

47, N 6, 1556-1569.

(cu. MnCl_4^{2-} ; III)



1984

Nieke Christine,
Reinhold Joachim.

расчёт
спектра.

Theor. chim. acta,
1984, 65, N2, c. 99-108.

(ср. ● $[\text{CrCl}_4]^{2-}$; III)

FeCl_4^-

1988

Deeth R. J., Figgis B. N.,
et al.

a.n. Chem. Phys., 1988, 121,
N1, 115-130.

(comp. CoCl_4^{2-} ; III)

FeCl₄⁻

1990

112: 128329n Variable photon energy photoelectron spectroscopy on FeCl₄⁻. An unusual electronic structure for high-spin d⁵ complexes. Butcher, Kristine D.; Didziulis, Stephen V.; Briat, Bernard; Solomon, Edward I. (Dep. Chem., Stanford Univ., Stanford, CA 94305 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1990, 112(6), 2231-42 (Eng). Variable energy photoelectron spectroscopy (PES) is used to elucidate the valence band electronic structure and bonding in tetrahedral d⁵ FeCl₄⁻. PES spectra obtained over the photon energy range 25-150 eV show intensity changes in the valence band features which indicate that more metal character is present in the deepest bonding levels. This is inverted from the normal electronic structure description of transition-metal complexes. The lack of off-resonance intensity in the deep binding energy satellite, which corresponds to a 2-electron transition involving metal ionization plus ligand-to-metal charge transfer, indicates that little relaxation occurs on ionization. This result is confirmed by anal. of the satellite structure in the core level XPS Fe 2p spectra. PES spectra taken at the Fe 3p absorption edge, which provide insight into the bonding description of the ionized final state, show dramatic resonance intensity enhancement of the main band peaks as well as the satellite. The resonance enhancement of the main band indicates that it contains significant metal character after ionization and thus,

спомогательный
спектр,
энергетическая
структура

с.А.1990, 112, N14

provides further evidence that the relaxation is small. A CI anal. shows that the resonance profiles of the photoelectron peak intensities at the absorption edge are also consistent with an inverted ground-state bonding scheme with little relaxation occurring upon ionization. Quant. anal. of the resonance intensity data gives an exptl. est. of the covalent mixing in the HOMO as 38% Fe, 62% Cl. Both the inverted bonding scheme and the very small relaxation are reproduced by spin-unrestricted but not by the spin-restricted SCF- $X\alpha$ -SW calcns. The origin of this unusual electronic structure in high-spin d^5 complexes and its implications with respect to redox chem. are discussed.

$FeCl_4^-$

1990

24 Б1299. Исследования $FeCl_4^-$ методом фотоэлектронной спектроскопии с переменной энергией фотонов. Необычная электронная структура высокоспиновых d^5 комплексов. Variable photon energy photoelectron spectroscopy on $FeCl_4^-$: An unusual electronic structure for high-spin d^5 complexes / Butcher D. K., Didziulis V. S., Briat B., Solomon I. E. // J. Amer. Chem. Soc.—1990.—212, № 6.—С. 2231—2242.—Англ.

Исследованы фотоэлектронные спектры при возбуждении синхротронным излучением в диапазоне энергий 25—150 эВ и рентгеноэлектронные спектры (РЭС) Fe 2p в d^5 -состоянии. Установлено, что более глубокие валентные уровни имеют более ярко выраженный металлический характер, что противоречит обычно наблюдаемой электронной структуре комплексов переходных металлов. Анализ спектров валентных уровней и Fe 2p-РЭС позволил сделать вывод о малости энергии релаксации в этом случае. Экспериментально установлено, что в ВЗМО дают вклад 38% Fe и 62% Cl. Вывод об инверсности связей и малости релаксации подтвержден расчетами методом ССП X_α — рассеянных волн.

А. Н. Соколов

М.П.

Х. 1990, № 24