

AlHCl_2



HAlCl_2

Имми 7191

1978

8 Б183. Реакция AlCl с HCl в матрице: ИК-спектр HAlCl_2 . Schnöckel Hg. Matrixreaktion von AlCl mit HCl : IR-Spektrum von HAlCl_2 . «J. Mol. Struct.», 1978, 50, № 2, 275—280 (нем.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры продуктов р-ции молекул AlCl и HCl в аргоновой матрице при 15К. В спектрах, зарегистрированных после формирования матрицы кроме полос AlCl и HCl (455 и 2800 см^{-1}) обнаружена широкая полоса 430 см^{-1} , к-рая связывается с ассоциатом AlCl и HCl . После фотолиза матрицы Hg-лампой низкого давления в течение 20 мин. в спектре обнаружена полоса 619 см^{-1} AlCl_3 , а также ряд новых полос, отнесенных к молекуле HAlCl_2 . Отнесение проводили на основании изучения изотопных сдвигов по хлору и во-

(2)

☒



2.10.79, N8

дороду. Предложена след. интерпретация спектра для изотопной модификации $\text{HAl}^{35}\text{Cl}_2$: $\nu_1=1967,6$, $\nu_2=481,3$, $\nu_4=578,9$, $\nu_5=654,5$ и $\nu_6=471,8$ см^{-1} . Для молекулы HAlCl_2 предложено плоское строение симметрии C_{2v} . Отсутствие в спектре деформационных частот ν_3 объясняется ее низким значением (оценено ниже 200 см^{-1}). Из полученных частот и изотопных сдвигов рассчитаны силовые постоянные: $F[\nu(\text{AlCl})]=2,5$, $F[\rho(\text{H})]=0,071$, $F[\nu(\text{AlCl})/\rho(\text{H})]=0,058$ [10^2 нм^{-1}]. Обсуждены др. наборы силовых постоянных, также согласующихся с эксперим. данными.

С. Б. Осин

OMMICK 7191

1278

HAlCl₂
~~0-1000~~

21

90:46195d Matrix reaction of aluminum monochloride (AlCl) with hydrogen chloride: IR spectrum of hydrogen

dichloroaluminate (HAlCl₂). Schnoeckel, H. (Anorg.-Chem. Inst., Univ. Muenster, Muenster, Ger.). *J. Mol. Struct.* 1978, 50(2), 275-80 (Ger). In an Ar matrix AlCl can react with HCl by excitation of a low pressure Hg lamp to HAlCl₂. Isotropic splitting (H/D and ³⁵Cl/³⁷Cl) and force const. calcs. show that the obsd. frequencies can be assigned to a planar mol. HAlCl₂. The bending mode δ (AlCl₂) could not be obsd.

CA. 1979, 90, N6

$AlH \cdot HCl$
 $AlH_2 \cdot HCl$
 $AlH_3 \cdot HCl$
 $AlCl \cdot HCl$
 $AlCl_2 \cdot HCl$
 $AlHCl_2 \cdot HCl$
 $AlH_2Cl \cdot HCl$
 $AlH_3 \cdot HCl$
 $Al \cdot H$

22 Б1053. **Стабильность и структура аддуктов льюисовского типа между гидридами алюминия и галогенидами.**
 Stability and structure of Lewis adducts of aluminum hydrides and halides /Wilson Marty, Coolidge Michael B., Mains Gilbert J. //J. Phys. Chem. —1992. —96, № 12. —С. 4851—4859. —Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базисе 6-31ГФ* проведены расчеты структуры и стабильности, а также колебат. частот аддуктов $A \cdot B$, где $A = AlH$ (I), AlF (II), $AlCl$ (III), AlH_2 (IV), AlF_2 (V), $AlCl_2$ (VI), AlH_3 (VII), AlF_3 (VIII), $AlCl_3$ (IX), $AlHF_2$ (X), $AlHCl_2$ (XI), AlH_2F (XII), AlH_2Cl (XIII), $B = HCl$ и HF . Энергетич. х-ки АВ уточнены с учетом энергий корреляции электронов по теории возмущений Меллера—Плессета вплоть до 4-го порядка. Найдено, что стабильные аддукты с В образуют II ($^3\pi$) и III ($^3\pi$). Из сопоставления энергий диссоциации АВ для $B = HF$ и HCl сделан вывод, что F в HF является лучшей льюисовской к-той, чем Cl в HCl. Энергии диссоциации аддуктов с HF убывают в след. порядке: $X > VIII > IX > XII > II$ ($^3\pi$) $> XI \approx XIII \approx V > III$ ($^3\pi$) $> VII > VI > I$ ($^3\pi$) $\approx IV > II$ ($^1\Sigma$) I ($^1\Sigma$) $\approx III$ ($^1\Sigma$). Порядок энергий диссоциации для HCl в основном такой же, но установлен с меньшей надежностью. Льюисовская кислотность В падает в

X. 1992, № 22-24

ряду VIII > X > IX > XII > XI > XIII > VII. Библ. 34.
Э. Д. Герман

ка

HAlCl_2

1993

Baran E. Z.

Среднеквадр.
амплитуды
колебаний

Monatsh. Chem. 1993,
124 (3), 287-9.

● (см. HBCl_2 ; I)

HALCl

Om. 38237

1996

Köppe R., Kasai P.H.,

J. Am. Chem. Soc., 1996,
118, 135-139.

HALCl and AlCl₃ : A Matrix
Isolation ESR study

1999

HAlCl_4
 HAlCl_3^+
 ClHAlCl_4

Chandler, W. David;
et al.,

сmp-ра
и
фремерика,
кв. мех.
панет

Inorg. Chem. 1999,
38 (9), 2050-56

