

Vcl5

VC₅

Спириндонов В.П.,
Романов Г.В.

1969

оценка
конструк-
тивных и
механич.
расч.

Вестн. Моск. ун-та,

Химия,

24, N1, 65

● (См. CrF₅) III

V11-4902 1940

VCl₅

41314f Vanadium pentachloride. Infrared spectra and reaction with acetonitrile. Slawisch, Adolf; MacCordick, I.; Jannopulos, Athanassios. (Gmelin-Inst., Max-Planck-Ges., Frankfurt/M., Ger.). *J. Less-Common Metals* 1970, 21(2), 137-41 (Ger). The ir spectrum of VCl₅ in the range 70-4000 cm⁻¹ is reported and the results are compared with the known ir spectra of NbCl₅ and TaCl₅. The reaction of VCl₅ with acetonitrile gives VCl₅.3MeCN. RCHN

V_i

Wk. 11/21/70

C.A. 1940 \$3.8

Vcl₅

VII-4902

1970

23 B206. VCl_5 , его инфракрасный спектр и реакция с CH_3CN . Slawisch A., Maccordick J., Jannopoulos A. VCl_5 : sein IR-Spektrum und seine Reaktion mit CH_3CN . «J. Less—Common Metals», 1970, 21, № 2, 137—141 (нем., рез. англ.)

Исследован ИК-спектр VCl_5 (I) в области 70—4000 cm^{-1} и проведено отнесение полос на основании сравнения со спектрами NbCl_5 и TaCl_5 . При взаимодействии I с MeCN в течение 1 недели, при комн. т-ре, в отсутствие влаги был выделен $\text{VCl}_3 \cdot 3\text{CNMe}$.

М. Дейчмейстер

ИК-спектр

X. 1970. 23

VCl₅

оттис. 11330

1975

оценка

Завалшин Н.И.,
Мавышев А.А.

Д.и.ч.с.
т.г.г.

Рук. ген. Виссир.
Ден. N 966-75
и. 1975.



см. VCl₅; II

VCl₅

(От. 22533) 1985

Алешонкова Ю. А.,
Бобкова В. А.

Иванов. хим.-технол. ин-т.
Иваново, 1985. 9с. Библиогр.

спектр,

Vi;

6 назв. (Рукопись деп. в ОН
УИТЭХим. г. Черкассы 29 апр.
1985 г., № 426хп-85 деп.)

(ссыл. PCl₅; III)

VF₅

1985

Mayilavelan S.

et. 17.

Indian J. Chem., 1985,
A24, N 8, 637-637.

(corr. VCl_5 ; III)

VCl₅

1985

6 Б1258. Молекулярные постоянные некоторых пентагалогенидов элементов V группы и колебательное отнесение. Molecular constants of some pentahalides of group V elements & vibrational assignment. Mayilavelan S. «Indian J. Chem.», 1985, A24, № 8, 636—637 (англ.)

Для 2 возможных вариантов отнесения колебаний симметрии e' молекул XY_5 (симметрия D_{3h} , $X = V, As, Nb, Sb, Ta$; $Y = F, Cl$) ν (акс. деф.) (β) $> \nu$ (экв. деф.) (α) и $\nu_\beta < \nu_\alpha$ рассчитаны силовые постоянные молекул ($f_v, f_R, f_{vv}, f_{RR}, f_\alpha, f_\beta$). Вычислены также значения средних амплитуд колебаний (25°) и постоянных кориолисова взаимодействия (результаты приведены только для $\nu_\beta > \nu_\alpha$). Сделана попытка проверить отнесение колебаний в рамках предложенной Гиллеспей теории отталкивания электронных пар валентных оболочек. Сопоставление результатов с эксперим. данными показывает, что $\nu_\beta > \nu_\alpha$. В. М. Ковба

М.П.

X(79)

X. 1987, 19, № 6

AsCl₅, NbCl₅, SbCl₅,

TaCl₅, ~~As~~VF₅, AsF₅, NbF₅, SbF₅,
TaF₅



V25

1990

5 Д150. Релятивистские молекулярные расчеты галогенидов Ha. Relativistic molecular calculations for halonium halides / Pershina V., Sepp W.-D., Fricke B. // GSI-Rept.— 1991.— № 91—1, Sci. Rept. 1990.— С. 275. — Англ.

Проведены релятив. расчеты методом Дирака—Слэтера для галогенидов элементов V группы, в частности XCl_5 ($\text{X} = \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Pa}, \text{Ha}$ и XBr_5). Для соединений Nb и Ta принята эксперим. геометрия симметрии D_{3h} . Для галогенидов трансактинидного элемента Ha предполагается, что они имеют ту же структуру. Длины связей Ha—лиганд рассчитаны многоконфигурац. методом Дирака—Фока. Расчеты галогенидов Pa показали, что они имеют структуру симметрии C_{4v} , что обусловлено гибридизацией $d-f$ -орбиталей. В результате расчетов получены данные по распределению зарядовой плотности (заряды на атомах, заселенность валентных орбиталей, перекрывание заселенностей, плотность состояний), а также энергетич. характеристики. Показано, что релятив. стабилизация $6p_{1/2}$ -орбиталей и сильная

M.A.

⊗ (47)

ф. 1992, № 5

дестабилизация $6p_{3/2}$ -орбиталей в случае галогенидов
На приводят к перекрыванию между p -орбиталями и
валентными орбиталями лигандов, промежуточному
между Nb и Ta.



VCl₅

Kang S.-K., Tang H., et al.,

1993

J. Amer. Chem. Soc., 1993,
115, 115, C. 1971-1981

M.A.

P.M.X. N4, 1994, 45-1055

Vcl5

1996

9Б131. Электронная структура и свойства галогенидов элементов IV, V и VI групп, включая транс-актиниды / Ионова Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорганической химии. — 1996. — 41, № 7. — С. 1190—1197. — Рус.

Рассмотрена электронная структура и свойства галогенидов IV, V и VI групп, включая 104-, 105- и 106-й элементы. Расчеты электронной структуры молекул MCl_5 и MBr_5 ($M = V, Nb, Ta, Pa$) подтвердили, что ганий является типичным представителем элементов V группы, причем его свойства определяются валентными орбиталями 6d и 7s. Сравнение результатов атомных и молекулярных релятивистских и нерелятивистских расчетов элементов V группы и их соединений (MCl_5) показало, что релятивистские эффекты определяют тенденции в химических свойствах. Результаты расчетов позволили сделать вывод, что высшие галогениды транс-актинидов проявляют уменьшение устойчивости по отношению к диссоциации связи $M-Cl$ при увеличении порядкового номера химического элемента. Библиография. 36.

М.П.



X. 1997, № 9

1996

F: VC15

P: 3

9Б131. Электронная структура и свойства галогенидов элементов IV, V и VI групп, включая транс-актиниды / Ионова Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорганической химии. - 1996. - 41, N 7. - С. 1190-1197. - Рус.

РЖХ 1997

Рассмотрена электронная структура и свойства галогенидов IV, V и VI групп, включая 104-, 105- и 106-й элементы. Расчеты электронной структуры молекул $\text{MCl}[5]$ и $\text{MBr}[5]$ ($\text{M}=\text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ha}$ и Pa) подтвердили, что ганий является типичным представителем элементов V группы, причем его свойства определяются валентными орбиталями 6d и 7s. Сравнение результатов атомных и молек. релятивистских и нерелятивистских расчетов элементов V группы и их соединений ($\text{MCl}[5]$) показало, что релятивистские эффекты определяют тенденции в хим. свойствах. Результаты расчетов позволили сделать вывод, что высшие галогениды транс-актинидов проявляют уменьшение устойчивости по отношению к диссоциации связи $\text{M}-\text{Cl}$ при увеличении порядкового номера хим. элемента. Библиография. 36.