

VOCl_3

V 836

1954

$\text{VOCl}_3, \text{ReO}_3\text{Cl}$ ($\text{V}_2, \text{Re}_2, 4 \frac{24}{2}$)

Eichhoff H. J., Weigel F.,

(C
4)

Z. anorgan. und allgem. Chem.,
1954, 275, 44-5, 267-272. (rec.) 4

... Verhältnis der Kationen-Größen
... VOCl_3 und ReO_3Cl .
...
... 1954, 113, 1365. 10

1957

VOCl_3

спектр.

F. A. Miller, W. B. White

Spectrochim. Acta 9, 98-100. 2

Электронный спектр VOCl_3 .

Спектр паров VOCl_3
(2440 - 3330 Å). Тонкой структуры
не обнаружено.

VII 1859

1957

VOCl_3 (Vi)

Miller F. A., Cousins L. R.

J. Chem. Phys., 1957, 26, u 2, 329-331.

PNEX, 1957, u 22,

ссылка р.к.

7092.1

8

10.

VII 1060

1959

$\text{VOSO}_4, (\text{NH}_4)_2\text{VO}(\text{C}_2\text{O}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O},$
 $\text{K}_2\text{MoOCl}_5, \text{K}_2\text{CrOCl}_5, \text{VOCl}_3,$
 $\text{CrO}_2\text{Cl}_2, \text{CrO}_2\text{F}_2, \text{V}_2\text{O}_5, \text{CrO}_3, \text{MoO}_3,$
 $\text{KMnO}_4, \text{KReO}_4, \text{K}_2\text{CrO}_4, \text{K}_2\text{CrO}_3\text{Cl}, \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 (\text{Vi})$

Barracclough C.G., Lewis J.,
Nyholm R.S.

J. Chem. Soc., 1959, Nov., 1552-55.

Частоты валентных колебаний двойных
связей металл-кислород.

RX., 1960, N13; 50857 J

ЕСТЬ Ф. Н.

VII 1327.

1959

$VO(NO_3)_3$, $VOCl_3$ (Vi)

Gerding H., Haak W. F.,
Vlies C. vander.

Rev. univers. mines, 1959, 15,

n 5, 452, 455.

see p. K.

PNEH, 1960, n 17, 68327.

HO.

VOCl_3

VII-5729

11960

1B64. Потенциальные постоянные VOCl_3 . Rao P. Babu, Murty K. Sreerama. Potential constants of VOCl_3 , «Current Sci.», 1960, 29, № 1, 14 (англ.).—Частоты колебаний типов симметрии A_1 и E молекулы VOCl_3 , равные 165; 408; 1035 и 129; 249; 504 см^{-1} , использованы для вычисления ее силовых постоянных. Получены следующие значения (в $10^5 \text{ дн} \cdot \text{см}^{-1}$): $\text{V}=\text{O}$ 7,85; $\text{V}-\text{Cl}$ 1,409; $\text{Cl}-\text{V}-\text{Cl} + \text{Cl}-\text{V}=\text{O}$ 0,451; $\text{V}=\text{O}$, $\text{V}-\text{Cl}$ 0,390; $\text{V}-\text{Cl}$, $\text{V}-\text{Cl}$ 0,741; $\text{Cl}-\text{V}-\text{Cl}$, $\text{Cl}-\text{V}-\text{Cl} + \text{Cl}-\text{V}=\text{O}$, $\text{Cl}-\text{V}=\text{O}$ -0,118. Вычисленные частоты совпадают с опытными с точностью до 1—2 см^{-1} . В расчете приняты следующие значения длин связей и углов: $\text{V}=\text{O}$ 1,56 Å; $\text{V}-\text{Cl}$ 2,12 Å; $\text{O}=\text{V}-\text{Cl}$ $108^\circ 12'$; $\text{Cl}-\text{V}-\text{Cl}$ $111^\circ 17'$. М. К.

ор-1961-1

VOCL₂

Nagarajan K.

1962

"Sci. and Cult." 1962, 28 №3,
140-141

Словные построения и терми-
динамические свойства окситрихл-
рида банада.

(см VOCL₂ II разд.)

VCl_4 , VOCl_3
(Vi)

VII 2517

1963

Grubb E.L., Beltord R.L.

Sympos. Molec. Struct. and Spectrise.,
Columbus, 1963 "Columbus, Ohio, sa 75.
Electronic absorption spectra of VCl_4 .
abstact.

RX., 1965, 6B203

J

hem 6 5-ke

~~9787~~

VI 574

7

1963

PdCl_6 ; PtCl_6 ; SeCl_6 ; SbCl_6 ; SbCl_6 ;

PbCl_6 ; SnCl_6 ; TiCl_6 ; VCl_6 ; PtBr_6 ;

SnBr_6 () ; () MoF_6 , ReF_6

Nagarajan G.

Current Sci., (India), 1963, 32,
64-65

Mean amplitudes ...

J

cert p.k.

VOCl₃ (VI)

Копылова Е.А., Рубан Н.Н., Виноградова И.А.
Тр. Ин-та металлургии и обогащения
АН Каз ССР, 1965, 12, 145-150



TiCl₄; VOCl₃ (мен. моц (?)) VII 3953 1965

Дієграфа C., Spectrochim. Acta.

1965, 21, N8, 1419-21

РРР 1966

92170

20

1968

VOCl₃

23 В15. Удобный метод получения окситрихлорида ванадия. Anand S. K., Multani R. K., Jain B. D. A convenient method for the preparation of vanadium oxytrichloride. «Chem. and Ind.», 1968, № 23, 743 (англ.)
Нагреванием с обратным холодильником V₂O₅ в SOCl₂ получен VOCl₃, очищенный перегонкой при 126—7° с выходом 72%. Т. Г. Иванова

X. 1968. 23

VOCl_3 Дижораф С.

1965

Spectrochim. acta, 21, № 1419.

Изучение спектров поглощения
реш. TiCl_4 и VOCl_3 .

✓
O



(ан. TiCl_4).

VII-4848

1969

VOCl_3

7 B256. Электронные переходы в молекуле VOCl_3 .
Dijkgraaf C. Electron transfer transitions in the
 VOCl_3 molecule. «Spectrochim. acta», 1969, A25, № 9,
1652—1654 (англ.)

Для молекул TiCl_4 и VOCl_3 выведены выражения для
интенсивностей дипольных электронных переходов. Срав-
нение вычисленных интенсивностей с экспериментально
наблюдаемыми показывает, что полоса поглощения при
 $29\,000\text{ см}^{-1}$ в спектре поглощения VOCl_3 может быть
объяснена переходом электрона из основного состояния
в два различных возбужденных состояния, а при
 $40\,400\text{ см}^{-1}$ — переходом в пять различных возбужден-
ных состояний.

Г. Ларин

Электрон.
переходы

X. 1970.7



500a

ВФ - 4780 - VII

1970

22 Б350. Колебательные спектры некоторых оксигалогенидов переходных элементов при особом внимании к спектроскопии комбинационного рассеяния в газовой фазе и монокристаллах. Beattie I. R., Livingston K. M. S., Reynolds D. J. Vibrational spectra of some oxide halides of the transition elements with particular reference to gas-phase and single crystal Raman spectroscopy. «J. Chem. Soc.», 1970, A, № 8, 1210—1216 (англ.)

Колебательный спектр

Исследованы спектры КР в трех агрегатных состояниях (газообразном, жидком и твердом VOCl_3 (I), VOF_3 (II), NbOCl_3 (III), MoO_2Cl_2 (IV), WO_2Cl_2 (V), MoO_2F_2 (VI), WOCl_4 (VII); исследованы также ИК-спектры поглощения VII, MoOF_4 (VIII), WOF_4 (IX), OsO_3F_2 (X). Спектры КР возбуждались линией 5145 Å Аг-ионного лазера или линией 6328 Å He-Ne-лазера. Исследование спектров КР, I, III, IV, VII в газовом состоянии во всех случаях подтверждает присутствие, в основном, мономерных молекул. Предложено отнесение наблюдавших-

X. 1970.

22

+9

X

ся в спектрах КР линий для I, III, VII. В тв. состоянии III имеет структуру бесконечных полимерных цепей, состоящих из центральных атомов Nb (КЧ 6), связанных между собой мостиковыми связями Nb—Cl—Nb и асимм. мостиковыми связями Nb—O—Nb. В крист. состоянии IV имеет, по-видимому, структуру аналогичную структуре V. В жидк. состоянии IV имеет, по-видимому, в основном мономерный состав. Для VI в крист. состоянии предположена мостиковая полимерная структура с КЧ 8 для атома Mo, для VII в газе и р-ре пирамидальная структура с квадратич. основанием и атомом O в вершине, аналогичная структуре TiOCl_4 . Обсуждены некоторые характеристики вал. кол. концевой связи M—O для I—X.

А. Александров

BQ - 4780 - VII

1970

VOCl₃

(19921e) Vibrational spectra of some oxide halides of the transition elements with particular reference to gas-phase and single-crystal Raman spectroscopy. Beattie, Ian R.; Livingston, Keith M. S.; Reynolds, David John; Ozin, Geoffrey A. (Chem. Dep., Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *J. Chem. Soc. A* 1970, (8), 1210-16 (Eng). The following species have been examd. in the Raman effect: (s = solid, l = melt, g = gas): VOCl₃(g), VOF₃(s), NbOCl₃(g,s), MoO₂Cl₂(g,l,s), WO₂Cl₂(s), MoO₂F₂(s), WOCl₄(g,s), MoOF₄(l,s), WOF₄, and OsO₂F₂(s). The results for the gaseous phase in all cases support the presence of principally monomeric species. In the solid state single-crystal Raman measurements on NbOCl₃ suggest that the space group is $P4_2nm$ not $P4_2/mnm$ as suggested from x-ray diffraction studies. Single-crystal Raman data are also reported for WOCl₄. In the case of the solid-state data a structure based on a 6-coordinate central atom is satisfactory for NbOCl₃ (with an asym. Nb-O-Nb bridge). For MoO₂Cl₂ a structure

Raman -
merip

C.A. 1970. 13-4

+9



analogous to that of WO_2Cl_2 is satisfactory. MoO_2F_2 can be satisfactorily interpreted as based on 8-coordinate Mo with all atoms bridging. For MoOF_4 and WOF_4 it is suggested that the compds. are F-bridged (in disagreement with results obtained from x-ray data for WOF_4). For OsO_3F_2 the data are not inconsistent with 6-coordinate Os with cis-F bridges, a terminal Os-F link, and a C_3 , OsO_3 residue. In the melt, MoO_2Cl_2 appears to be mol. while with MoOF_4 and WOF_4 there is evidence for terminal O atoms, with presumably cis-F bridges. RCGF

$\text{VOCl}_3(2)$

[Om. 22 605]

1971

Ngai L.H., Stafford F.E.,

M.N., KP

Adv. High. Temp. Chem.,
1971, 3, 213-270.

ВФ - 20 - XVII : 1972

VOCl_3

23 Б1093. Импульсный фотолиз паров треххлористой окиси ванадия. Некоторые новые электронные переходы VO . Briggs A. G., Kemp R. J. Flash photolysis of vanadium oxide trichloride vapour. Some new electronic transitions of VO . «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1972, № 12, 1223—1226 (англ.)

При импульсном фотолизе паров VOCl_3 в адиабатич. условиях наблюдалась полоса VO в видимой области (4630—6550 Å, переход $\text{C}^+\Sigma^- \rightarrow \text{X}^+\Sigma^-$), а также полосы в области между 2375 и 3740 Å и диффузная слабая полоса вблизи 3545 Å. Кроме того, в широком интервале длин волн обнаружены линии поглощения атомов V в основном и возбужденном состояниях. Обсуждается механизм фотолитич. и пиролитич. распада VOCl_3 .
А. Шведчиков

м.п.

Х - 1972 - 23

VOCl_3

5 Д406. Спектры комбинационного рассеяния окситригалогенидов ванадия в парах, растворах и твердом состоянии и смешанных окситригалогенидов. Clark R. J. H., Mitchell P. D. The Raman spectra of the vanadium oxytrihalides in the vapour, dissolved, and solid states, and of the mixed oxytrihalides. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1972, № 22, 2429—2433 (англ.)

Исследованы спектры комб. рас. VOCl_3 (I) в парах, растворах и твердом состоянии, VOBr_3 (II) в растворах и твердом состоянии и VOF_3 (III) в парах. Показано, что для I существует только одна твердая фаза, а для II — две или три. Газообразный II недостаточно стаби-

лен для получения спектра. Проведено отнесение колебаний в спектрах I, II, III по типам симметрии и к характеристич. колебаниям связей и групп. В спектрах смеси I и II и I и III в растворах идентифицированы полосы смешанных оксигалогенидов VOCl_2Br , VOClBr_2 и VOCl_2F . Приведены спектры и таблицы частот. Биол. 20. Э. В. Б.

Ф. 1973 N 5

1972

8

☒

(+3)

VOCl_3

16 Б303. Микроволновый спектр и структура ванадилхлорида (5+). Katakida Ken-ichi, Kuchitsu Kozo. Microwave spectrum and structure of vanadyl (V) chloride. «Chem. Lett.», 1972, № 4, 293—296 (англ.)

Исследованы МВ-вращательные спектры изотопич. разновидностей ванадилхлорида VOCl_3^{35} (I) ($4 \leq J \leq 16$), VOCl_3^{37} (II) ($12 \leq J \leq 17$) и $\text{VOCl}_2^{35}\text{Cl}^{37}$ (III) ($9 \leq J \leq 14$), в области $\sim 17\,400\text{--}56\,600$ Мгц. Определены из анализа МВ-спектров молек. постоянные: для I $B_0 = 1741,72 \pm 0,01$, $D_J = (0,53 \pm 0,02) \times 10^{-3}$, $D_{JK} = -(0,9 \pm 0,02) \times 10^{-3}$ Мгц, для II $B_0 = 1665,20 \pm 0,02$ Мгц, для III $A_0 = 1739,94 \pm 0,05$, $B_0 = 1692,17 \pm 0,05$, $C_0 = 1139 \pm 1$, $D_{JK} = -(0,9 \pm 0,2) \times 10^{-3}$ Мгц. Из вращательных постоянных I—III определены параметры r_0 -структуры $r(\text{V—O}) = 1,595 \pm 0,005$, $r(\text{V—Cl}) = 2,131 \pm 0,001$ А, $\angle \text{ClVCl} = 111,8 \pm 0,2^\circ$, хорошо согласующиеся с электронографич. данными (Palmer K. J., J. Am. Chem. Soc., 60, 2360, (1938)).

А. П. Александров.

структ.
м.в. спектр

X. 1973 N 16

1972

111/1
Bp - 200 - XV/1



VOCl_3

Bp-200 - XVII

1972

(A_0)

(C_0)

(Структ.

назад.)

-) 11842s Microwave spectrum and structure of vanadyl(V) chloride. Karakida, Kenichi; Kuchitsu, Kozo; Matsumura, Chi (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *Chem. Lett.* 1972, (4), 293-6 (Eng). The microwave spectrum of VOCl_3 gave the rotational consts. (MHz) as $B_0 = 1741.72$ for $\text{OV}^{35}\text{Cl}_3$; $B_0 = 1665.20$ for $\text{OV}^{37}\text{Cl}_3$; $A_0 = 1739.94$, $B_0 = 1692.17$, $C_0 = 1139$ for $\text{OV}^{35}\text{Cl}_2^{37}\text{Cl}$. For these consts., the r_0 structural parameters were detd.: $r(\text{V-O}) = 1.595$, $r(\text{V-Cl}) = 2.131 \text{ \AA}$, and $\angle(\text{Cl-V-Cl}) = 111.8^\circ$.

C. H. 1972. 77. 2.

VOCl_3

Stepanov P. Y. 1973
"Vestn. Mosk. Univ. Khim."
1973, 14(6) 645-8 (Russ)
Spectroscopic study of products
of the photolytic and electroly-
tic decomposition of vanadium
pentafluoride and vanadyl
trichloride molecules.

unur.
promas.

● (all V_2 ; III)

C.A. 1974. 80. N18.

1974

VOCl₃спектры
комб.
рассеян.

2 Д386. Обнаружение донорных свойств VOCl_3 по спектрам комбинационного рассеяния. Brunette J. P., Heimbürger R., Leroу M. J. F. Raman spectroscopic evidence of a donor behaviour for VOCl_3 . «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1974, 10, № 10, 903—907 (англ.)

При t -рах 300—77° К исследованы спектры комб. рас. в области 130—550 см^{-1} смеси SbCl_5 — VOCl_3 в жидком и кристаллич. состояниях. При комнатной t -ре спектры смешанных составов 1:1, 1:2 и 2:1 представляют собой наложение спектров двух компонент. При понижении t -ры в спектрах комб. рас. смесей появляются новые линии в области 425 и 350 см^{-1} , которые сопоставлены авторами с колебаниями групп SbCl_5O в комплексе, образующемся в результате координации SbCl_5 молекулами VOCl_3 . Таким образом установлено, что в смеси с SbCl_5 молекулы VOCl_3 могут выступать в качестве слабого донора. Библ. 15.

С. П.

ф. 1975. №2

VOCl_3

(w)

(com. 22604) 1974
Brockner W.
Hovdan H.

"Monatsh. Chem" 1974, 105,
N4, 750-754 (anal)

(cu VOCl₄; III)

x. 1975. N3

VOCl_3

Burroughs Peter
et al.

1974

opposed.
counter-act.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1974. Part 2,
70 N12, 1895-11.

● (see. RuO_4 ; III)

VOCl_3

1974

Clark R.J.M., Riddon D.M.,
Vol. Phys., 1974, 20,
N2, 505-519.

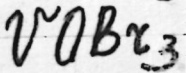
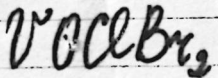
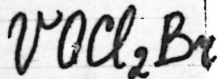
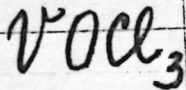
Di; m.n.

Clark R.J., Riddon D.M.,

(cm. PDF₃; III)

* 4-5688

1974



70340g Vibrational calculations on the isotopic species of vanadyl trichloride, vanadyl bromide dichloride, vanadyl dibromide chloride, and vanadyl tribromide and their molecular constants. Hovdan, H.; Cyvin, S. J.; Brockner, W. (Norges Tech. Haegsk., Univ. Trondheim, Trondheim, Norway). *Z. Naturforsch., Teil A* 1974, 29(5), 706-11 (Ger). A set of force fields was constructed for the isotopic species of VOCl_3 , VOCl_2Br , VOClBr_2 , and VOBr_3 . The conventional descriptions of the fundamentals were supported by the calcd. potential energy distribution in all cases. Certain mol. consts., e.g. mean amplitudes, their corresponding K values, the Coriolis coupling consts. of the $\zeta^2_{ia ib}$ type, and some thermodyn. quantities were calcd.

C.A. 1974 ; T.G. 9. 4. 12.

(+5)

(3-11.8.9)

C.A 1974 81 N12.

18

* 3 - 5688

1974

VOCl₃

(Д. М. И.)

23 Б232. Расчет колебаний изотопозамещенных молекул VOCl₃, VOBr₃ и соединений VOCl_nBr_{3-n}, а также некоторые молекулярные константы этих соединений. Новдан Н., Сувин С. Ж., Брокнер В. Schwingungsberechnungen der Isotopen VOCl₃-moleküle, des VOB₃ und der Verbindungen. VOCl_nBr_{3-n}, sowie einige Molekularkonstanten der Titelverbindungen. «Z. Naturforsch.», 1974, 29a, № 5, 706—711 (нем.; рез. англ.)

Проведен расчет нормальных колебаний и вычислены силовые постоянные для VOCl₃ (I) и VOB₃ (II). Определены величины изотопич. (Cl³⁵—Cl³⁷) расщепления частот в изотопозамещенных I. Наибольшие изотопич. сдвиги наблюдаются у частот симм. и анти-симм. вал. кол. V—Cl (~9 и 6 см⁻¹ соотв.). Силовые постоянные I и II использованы для расчетов колебаний VOCl₂Br (III) и VOClBr₂ (IV). Расчеты подтвердили отнесение колебаний III и IV, сделанное на основании эксперим. данных. Для I—IV вычислено распределение потенциальной энергии по нормальным координатам, средние амплитуды колебаний.

Е. Разумова

☒
 (+2)

х. 1974. №23

VOCl_3

*4-5688

1974

(и.п.)

11 Д196. Молекулярные постоянные изотопических разновидностей молекулы VOCl_3 и молекул VOCl_2Br , VOClBr_2 и VOBr_3 . Hovdan H., Cyvin S. J., Brockner W. Schwingungsberechnungen der isotopen VOCl_3 -moleküle, des VOBr_3 und der Verbindungen $\text{VOCl}_2\text{Br}_{3-n}$, sowie einige Molekularkonstanten der Titelverbindungen. «Z. Naturforsch.», 1974, 29a, № 5, 706—711 (нем.; рез. англ.)

По литературным данным для частот колебаний и структурных параметров вычислены силовые постоянные, распределение потенц. энергии по внутренним колебательным координатам, средние амплитуды колебаний, постоянные кориолисова взаимодействия и термодинамич. ф-ции для молекул VOCl_3 , VOBr_3 , VOCl_2Br , VOClBr_2 и трех ^{37}Cl -замещенных VOCl_3 . Дано отнесение частот по форме колебаний. М. Р. Алиев

(+2) ☒

Ф. 1974. N 11

$OVCl_3$

Вр -1560-XVII

1974

(15 Б286.) Микроволновый спектр и структура ванадилхлорида (5+). Matsumura Chi. «Tokē kogē sikanse hokoku, Tokyo kogyo shikensho hokoku, J. Nat. Chem. Lab. Ind.», 1974, 69, № 12, 499—501 (япон.; рез. англ.)

Исследован МВ-спектр трех изотопич. образцов ванадилтрихлорида: $^{16}O^{51}V^{35}Cl_3$ (I), $^{16}O^{51}V^{37}Cl_3$ (II) и $^{16}O^{51}VCl_2^{37}Cl$ (III) в области частот от 17 до 57 Ггц. Определены след. спектроскопич. постоянные для I (в Мгц) $B_0=1741$, $72 \pm 0,01$, $D_J=(0,53 \pm 0,02) \times 10^{-3}$, $D_{JK}=-(0,9 \pm 0,2) \times 10^{-3}$; для II $B_0=1665,20 \pm 0,02$; для III $A_0=1739,94 \pm 0,05$, $B_0=1692,17 \pm 0,05$, $C_0=1139 \pm 1$, $D_{JK}=-(0,9 \pm 0,2) \times 10^{-3}$. Вычислены параметры r_0 -структуры: $r(V-O)=1,595 \pm 0,005A$, $r(V-Cl)=2,131 \pm 0,001A$, угол $ClVCl=111,8 \pm 0,2^\circ$, к-рые в пределах точности измерения согласуются с лит. данными (РЖХим, 1973, 16Б303).

С. Н. Мурзин

М.П.
геометр.
структ.

Х. 1975 N15

⊕ Емочу!

⊗ ⊙

50508.6606

54969

1975

Ch, DB, TC

 $Cl_2V=O$

*4-8832

Oberhammer H., Strähle J. Die Molekülstruktur des Vanadium-(N-chlorimid)-trichlorids, $Cl_3V=NCl$, und des Vanadium-oxidtrichlorids, $Cl_3V=O$, in der Gasphase. "Z. Naturforsch.", 1975, 30a, N 3, 296-303 (нем., рез.англ.)



329 334 3 5 2 0360 пик ВИНТИ

*45-10362

1975

VOCl₃VOF₃

$$\Delta H_f^\circ \left(\begin{array}{l} \text{D V-O} \\ \text{D V-F} \\ \text{D V-Cl} \end{array} \right)$$

104311g Thermochemistry of vanadium oxytrichloride and vanadium oxytrifluoride by mass spectrometry. Flesch, Gerald D.; Svec, Harry J. (Ames Lab., Iowa State Univ., Ames, Iowa). *Inorg. Chem.* 1975, 14(8), 1817-22 (Eng). Mass spectral and ionization efficiency data were obtained for the pos. and neg. ions produced from VOCl₃ [7727-18-6] and VOF₃ [13709-31-4] by electron impact. From these data values were calcd. vertical ionization potentials *IP*, electron affinities *EA*, and heat of formation ΔH_f . $IP_v(\text{VOCl}_3) = 11.90 \pm 0.05$, $IP_v(\text{VOF}_3) = 13.88 \pm 0.05$, $EA(\text{VOCl}_3) \geq 3.6$, $EA(\text{VOF}_3) = 3.1 \pm 0.3$,

and $\Delta H_f(\text{VOF}_3(g)) = -12.8 \pm 0.3$ eV. Less precise values for these same parameters were calcd. for the obsd. pos. and neg. ion fragments and for the neutral fragments inferred to be produced in the mass spectrometer ion source. Estd. bond energies were $\bar{D}(\text{V-O})_{\text{VOCl}_3} = 5.5$, $\bar{D}(\text{V-Cl})_{\text{VOCl}_3} = 4.4$, $\bar{D}(\text{V-O})_{\text{VOF}_3} = 5.9$, and $\bar{D}(\text{V-F})_{\text{VOF}_3} = 5.8$ eV. Bond energy values are also reported for the pos. ion and neutral fragments.

C.A. 1975. 83 N12

(42)



51007.6750

TC, Ph, Ch

54907 GR

VOCl_3 (см. нос)

1975

№-9983

So S P Normal coordinate analysis
of vanadium oxytrihalides in the

Urey-Bradley force field. "Z. Phys.

Chem." (BRD), 1975, 97, N 1-2, 47-53

(англ.)

(см. VOF_3 ; III)
0465 пик

445 446

ВИНИТИ

VOCl_3

КР-спектр

1975
Завалишин Н.И.

Авторед. канд. дисс.
(Х.И.)

Исследование ИК-и КР-спектров..

VOCl_3

ЖЗ - 11482

1975

ВФ - 2078 - XVIII

NbOCl_3

(12 Б211) КР-спектры паров VOCl_3 и NbOCl_3 . За-
валишин Н. И., Мальцев А. А. «Вестн. Моск.
ун-та. Химия», 1975, 16, № 6, 741—743 (рез. англ.)

Получены спектры КР паров VOCl_3 и NbOCl_3 при
тах 200—350°, при возбуждении аргоновым лазером.
Отнесение полос выполнено на основании поляризац.
измерений и анализа контура вращательной структуры.
Получены след. значения частот колебаний $\nu_1(A_1)$,
 $\nu_2(A_1)$, $\nu_3(A_1)$, $\nu_4(E)$, $\nu_5(E)$, $\nu_6(E)$ VOCl_3 и NbOCl_3
(cm^{-1}): 1042, 409, 165, 503, 248, 125; 997, 395, 133, 448,
225, 107.

В. М. Ковба

Ж,

К.Р. спектр.

④ ☒

X 1976 N 12

1975

*4-11482

BQP-2078-XVII

VOCl₃NbOCl₃

(2i)

84: 157479v Raman spectra of vanadium oxide chloride (VOCl₃) and niobium oxide chloride (NbOCl₃) vapors. Zavalishin, N. I.; Mal'tsev, A. A. (Mosk. Gos. Univ. im. Lomonosova, Moscow, USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Khim.* 1975, 16(6), 741-3 (Russ). The Raman spectra for VOCl₃ and NbOCl₃ were recorded and the frequencies of the 6 fundamental modes were measured. For VOCl₃ the bands at 165 and 125 cm⁻¹ were assigned to the ν_3 and ν_6 frequencies, resp., in agreement with G. A. Ozin (1971). For NbOCl₃ the ν_3 frequency is obsd. at 133 cm⁻¹.

⊕

⊗



C.A. 1976 84 N22

VOCl_3

NbOCl_3

спектры
к.р.

ВФ-2078-XVII

1976

6 Д381. КР-спектры паров VOCl_3 и NbOCl_3 . За-
валишин Н. И., Мальцев А. А. «Вестн. Моск.
ун-та. Химия», 1975, 16, № 6, 741—743 (рез. англ.)
Исследованы спектры комб. рас. паров окситрихлори-
дов ванадия и ниобия при возбуждении линией 4880 Å
Ag-лазера. Отнесение полос в спектрах проведено на
основании поляризационных измерений и вида их кон-
туров. Все 6 нормальных колебаний молекул NbOCl_3
и VOCl_3 активны в спектрах комб. рас. Полученные
результаты свидетельствуют об ошибочности ранее вы-
полненного отнесения частот ν_3 и ν_8 молекулы VOCl_3 .
Для NbOCl_3 найдено значение частоты ν_3 , равное
133 см^{-1} , отличающееся от прежнего (110 см^{-1}).
Библ. 9. В. С. И.

XU-11482

Ф 1976 № 6

(71) □

VOCL₃

number 3792

1977

Matsumura

Shimanouchi T.

9.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 993-1102.

$OVCl_3$

omnuea 6359

1978

Almenningen A. et al.

Cu.1.1000

J. Mol. Struct., 1978,

48, 69-78

Vol₃

Commun 8416 1 1978

Asundi,

Asundi R.K. et al.

M.M.

Indian J. Pure and Appl. Phys.,

Pawan
Chand

1978, 16, p. 142- 150.

VOCl_3

1979

Drake M.C., Rosenblatt G.M.,
Raman spectroscopy in high
temperature chemistry.

CKP

10th Materials Research Sympo-
sium on characterization of
High temperature, Vapors and
Gases.

NBS Special Publication 561
Volume 1, 1979, 609-646.
(y Typbura)

VCl_3O

1981

(9)

95: 156835t Semi-empirical LCAO- $X\alpha$ theory for transition metal complexes. II. Application to ionization potentials. Sambi, Hideo; Felton, R. H. (Sch. Chem., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *Chem. Phys.* 1981, 59(3), 329-39 (Eng). Ionization potentials for 17 *nd*-transition metal complexes were calcd. by a semi-empirical LCAO- $X\alpha$ theory excluding $(n+1)s$ and $(n+1)p$ AO's. The results agree well with both photoelectron data and discrete-variational $X\alpha$ results, which include the $(n+1)$ AO's. Implications of the $(n+1)$ -AO exclusion are noted. Also, new assignments for photoelectron spectra of VCl_3O , $MnCl_3O$, $CrCl_2O_2$, and $MoCl_2O_2$ are proposed.

Kb. Mex. pacrum

C.A. 1981, 95, N 18.

VCl_3D

Common 12802 | 1981.

Sample H., Felton R.

gross.
enrich.

(5)

rev. acc.
factor

Chem. Phys., 1981,
59, 329-39

VCl_3O

1981

24 Б48. Полуэмпирический метод ЛКАО- X_α для комплексов переходных металлов. II. Расчет потенциалов ионизации. Sambe H., Felton R. H. Semi-empirical LCAO- X_α theory for transition metal complexes. II. Application to ionization potentials. «Chem. Phys.», 1981, 59, № 3, 329—339 (англ.)

С использованием предложенной авторами новой версии ЛКАО- X_α -метода (см. пред. сообщ.) выполнены расчеты электронного строения семнадцати комплексов металлов первого переходного периода (карбонилы, смешанные карбонилы, галогениды, оксогалогениды). Расчеты выполнены строго в рамках описанной ранее методики, за исключением того, что ns - и np -АО считались остовными, собственные значения к-рых определены эмпирически. Для остовных АО использованы одночленные ОСТ, а для валентных двучленные АО.

У, комп.тр.



Х. 1981, 19, № 24.

Линейные и нелинейные энергетич. параметры ур-ний ССП определены по МНК с использованием двухэкспонентных функций Клемента нейтр. атомов. Представлены данные по потенциалам ионизации валентных электронов. Для ряда молекул (VCl_3O , MnCl_3O , CrCl_2O_2 и MoCl_2O_2) предложены новые отнесения полос в их фотоэлектронных спектрах. Данные по ПИ для $\text{Ni}(\text{CO})_4$, $\text{Fe}(\text{CO})_5$, $\text{Cr}(\text{CO})_6$ и RuO_4 , сопоставленные с результатами X_α -ДВ-расчетов и с экспериментом, привели к согласию со средней точностью менее 1 эВ.

С. Долгин

$OVCl_3$

1982

Downs A. J., Gaskill

G. P., et al.

Vi, cur. Inorg. Chem., 1982,

no cur. 21, N 9, 3385-3393.

(cur. OPF_3 ; III)

OVCl_3

От. 15218

1982

1 Д563. Колебательные спектры молекул OVCl_3 в матрицах и газовой фазе и молекулярное силовое поле. Vibrational spectra (matrix and vapour phase) and molecular force field of OVCl_3 . Filgueira R. R., Fournier L. L., Varette E. L. «Spectrochim. acta», 1982, A 38, № 9, 965—969 (англ.)

С высоким разрешением исследованы спектры ИК-поглощения в области $400\text{—}1100\text{ см}^{-1}$ молекул OVCl_3 в газовой фазе и в твердых матрицах Ag и KBr (температура 10 K). Основное внимание уделено исследованию тонкой структуры, связанной со смешанным изотопич. составом по изотопам $^{35}\text{Cl}/^{37}\text{Cl}$. На основании измеренных значений колебательных частот и изотопич. сдвигов вычислены силовые постоянные межатомного взаимодействия в молекулах OVCl_3 , константы кориолисова взаимодействия и средние амплитуды колебаний. Библ. 22. К. Э. М.

спектр в
матрице,
 ν_1 , см. лост.

9. 1983, 18, №1

OVCl₃

Om. 15218

1982

98: 24856h Vibrational spectra (matrix and vapor phase) and molecular force field of oxovanadium trichloride. Filgueira, R. R.; Fournier, L. L.; Varette, E. L. (Dep. Fis., Univ. Nac. La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1982, 38A(9), 965-9 (Eng). The IR spectra of matrix isolated and vapor phase OVCl₃ were investigated. From these studies several vibrational isotopic splittings due to the natural abundance of ³⁵Cl/³⁷Cl were obsd. Force consts. were calcd. using vibrational frequencies, isotopic shifts, Coriolis coupling consta., and mean amplitudes of vibration.

uk crekp

8

Mampuse,

Chl. nom.

C. A. 1983, 98, N4.

OVC_l₃

Оттиск 15218

1982

4 Б252. Колебательные спектры OVC_l₃ в матрице и в парах и его молекулярное силовое поле. Vibrational spectra (matrix and vapour phase) and molecular force field of OVC_l₃. Filgueira R. R., Fournier L. L., Varette E. L. «Spectrochim. acta», 1982, A38, № 9, 965—969 (англ.)

Vi, см. посб.

Измерены ИК-спектры (100—1100 см⁻¹) газ. OVC_l₃ (I) при комн. т-ре и I, изолированного в матрицах Ar и Kr при т-ре 11—13 K и матричном разбавлении от 1/300 до 1/1500. В спектрах I в матрицах наблюдается изотопич. структура (4 компоненты) полос колебаний с участием атомов Cl с естественным содержанием ³⁵Cl/³⁷Cl. Рассчитано валентно-силовое поле I, с использованием значений частот колебаний и их сдвигов при изотопном замещении, постоянные корриолисова взаимодействия и среднеквадратичные амплитуды колебаний. Отмечено относительно высокое значение силовой постоянной взаимодействия связей OV и VCl ($0,61 \pm \pm 0,30$ мдин/А).

И. А. Гарбузова

X. 1983, 19, 4

$\text{VOCl}_3(2)$

1982

97: 136170r An electron impact mass spectrometry investigation of vanadium oxotrichloride ($\text{VOCl}_3(\text{g})$), vanadium trichloride $\text{VCl}_3(\text{g})$ and their dissociative fragments. Mason, Caroline F. V.; Behrens, Robert G. (Los Alamos Natl. Lab., Univ. California, Los Alamos, NM 87545 USA). *J. Less-Common Met.* 1982, 85(1), 21-6 (Eng). Knudsen effusion quadrupole mass spectrometry investigations on a mixt. of $\text{VOCl}_3(\text{g})$ and $\text{VCl}_3(\text{g})$ were performed. Mass spectra and electron impact appearance potentials for the singly charged ions formed from these mols. were obtained. Differences exist in the mass spectra and appearance potential values for fragment ions obtained in the present work and those reported in previous investigations.

(A.P., mass-
спектр.

VCl_3

c.A. 1982, 97, N 16

VOCl_3

A.P. VCl_3

Чехов

1

X. 1983, 19, № 2

1982

2 Б112. Исследование молекул VOCl_3 , VCl_3 и продуктов их диссоциации методом масс-спектрометрии электронного удара. An electron impact mass spectrometry investigation of $\text{VOCl}_3(\text{g})$, $\text{VCl}_3(\text{g})$ and their dissociative fragments. Mason Caroline F. V., Behrens Robert G. «J. Less-Common Metals», 1982, 85, № 1, 21—26 (англ.)

Диссоциативная ионизация молекул VOCl_3 и VCl_3 под действием электронного удара исследована посредством квадрупольного масс-спектрометра. Источником молек. пучка, содержавшего VOCl_3 и VCl_3 , служила нагретая до 640—650 К эффузионная ячейка из Al_2O_3 со смесью порошков V_2O_5 и MnCl_2 . Методом экстраполированных разностей определены Пт появления всех обнаруженных ионов — продуктов ионизации компонентов молек. пучка. В кач-ве стандарта для измерения Пт появления использован молек. ион H_2O^+ — продукт ионизации остаточного газа. Обсуждены расхождения полученных результатов с данными др. исследователей.

Д. В. Чеховской

VOCl_3

1983

Mohan S., Ravikumar
K. G., et al.

Vi, et. n.,
cell. no. 11.

Acta phys. pol.,
1983, A63, NS, 691-
- 700.

●
(cell. VOF_3 ; III)

VOL 3

(Om. 18811)

1983

Natarajan A., Somasun-
daram S.,

M.R.

Indian J. Phys., 1983,
B 57, N3, 234-240.

VCl₃O

[OM. 22242]

1984

Chopra J.R., Pandey A.N.,

суд.ном,
пачем.

Indian J. Phys., 1984,

B58, N 4-5, 376-383.

VOCl_3

[DM. 18812]

1984

Pellach E., Bancroft G. M., et al.

Me I и Me II
спектроскопический.

Inorg. Chim. Acta,
1984, 83, N2, 93-98.



$V(O)Cl_3$

[Dm. 22244]

1985

помощь
чекмп,
у Elbel S., Blanek A.,
Walther H., et al.,
J. Chem. Soc. Faraday Trans.,
1985, Pt 2, 81, N 6, 869-880.

VOCl_3

1985

Veichten D., Van.,

Bauer N., et al.

спектры
хелатов

J. Phys. Chem., 1985,
89, N 9, 1559-1561.

($\bullet$ $\text{Ce} \cdot \text{TiCl}_4$; III)

VCl₃

1990

УЗЫ1248. Молекулярные формы дихлоридов элементов первого переходного ряда на примере дихлорида ванадия. Molecular shapes of the first row transition element dichlorides with particular reference to vanadium dichloride / Beattie I. R., Jones P. J., Willson A. D., Young N. A. // High Temp. Sci.—1990.—29, № 1.— С. 53—62.— Англ.

Исследованы ИК-спектры поглощения дихлорида ванадия (I), изолир. в аргоновой матрице, предложена их интерпретация для линейной формы молекулы I, подтвержденная анализом изотопных расщеплений полос. Изучены квадрупольные масс-спектры продуктов выпаривания I, сделан вывод о возможности р-ции диспропорционирования I, о зависимости состава продуктов р-ции от условий выпаривания. Исследованы ИК-спектры поглощения изолир. в аргоновых матрицах тетрахлорида ванадия (II) и оксотрихлорида ванадия (III), проведена их интерпретация. Г. М. Курамшина

(42)

IX

X. 1991, N 3

VCl₂, VCl₄

М.П.

VOCl₃

1992

851026. Релятивистские
эффекты в физике и химии
элементов 105. III. Электрон-
ная структура оксигалогени-

дов элемента 105 как аналогов оксигалогенидов эле-
ментов V группы. Relativistic effects in physics and che-
mistry of element 105. III. Electronic structure of hahnium
oxyhalides as analogs of group 5 elements oxyhalides / Per-
shina V., Sepp W.-D., Bastug T., Fricke B., Ionova G. V.
// J. Chem. Phys. — 1992. — 97, № 2. — С. 1123—1131.
— Англ.

Релятивистским дискретно-вариационным методом Дирака —
Слейтера рассчитаны молекулы $MOCl_3$ и $MOBr_3$, где
 $M = V, Nb, Ta, Pa$ и элемент 105. На основе малликов-
ских заселенностей проанализирован характер связи

электрон.
структура,
теор. расчет

(+8)

X. 1993, № 8

в оксигалогенидах. Показано, что оксигалогениды элемента 105 близки по св-вам к оксигалогенидам Nb и Ta. Рассмотрена летучесть оксигалогенидов и галогенидов элементов I группы. Сообщ. II см. пред. реферат.

А. А. Сафонов



VOCl_3

[OM-36726]

1992

структура,
колебательные
расчеты,
теоретическое
расчет

Losa I., Andzelm J., et al.,
J. Phys. Chem. 1992, 96,
6630-6636.

1966

F: VOCl₃

P: 3

7Б141. Электронная структура и свойства оксигалогенидов элементов V группы / Ионова Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорганической химии. - 1996. - 41, N 4. - С. 632-636. - Рус.

Представлены результаты расчетов электронной структуры окситрихлоридов и окситрибромидов V, Nb, Ta, Pa и 105-го элемента, на релятивистским методом Дирака-Слейтера. Показано, что при переходе от VOCl₃ к NaOCl₃ связь M=O усиливается и наблюдается увеличение полной орбитальной заселенности и уменьшение ионности связи.

РМХ 1997

VOCl₃

1996

7Б141. Электронная структура и свойства оксигалогенидов элементов V группы / Ионов Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорганической химии. — 1996. — 41, № 4. — С. 632—636. — Рус.

Представлены результаты расчетов электронной структуры окситрихлоридов и окситрибромидов V, Nb, Ta, Pa и 105-го элемента, Na, релятивистским методом Дирака—Слейтера. Показано, что при переходе от VOCl₃ к NaOCl₃ связь M=O усиливается и наблюдается увеличение полной орбитальной заселенности и уменьшение ионности связи.

(15)



VOCl₃, NbOCl₃, NbOBr₃,
TaOCl₃, TaOBr₃,

X. 1997, № 7

Vollz

1996
Paritz, Jan-Christoph;
et al.,

(exp, Di) J. Phys. Chem. 1996,
100 (47), 18357-362

(cell. V_2O_5 ; III)

VOCl_3

1995

Russo T.V., Martin R.L.,
et al.

(vi)

J. Chem. Phys. 1995, 102
(23), 9315-21.

(see TiCl_4 ; III)

F: OVCl3

P: 3

133:273482 Matrix isolation study of the interaction
of HCl with CrCl2O2 and OVCl3.

Department of Chemistry, Ault, B. S. University of
Cincinnati Cincinnati, OH 45221-0172, USA J.

Mol. Struct., 526, 97-102 (English) 2000. 1:1

Hydrogen bonded complexes of HCl with CrCl2O2 and OVCl3
have been isolated in argon matrixes and characterized
by IR spectroscopy. For both complexes, the H-Cl
stretching mode was obsd., shifted 52 and 47 cm⁻¹,
resp., from parent HCl. Deuterium substitution, leading
a .nu.H/.nu.D ratio=1.38, verified the identification
and band assignment. For the OVCl3.cntdot.HCl complex,
the shifted V:O stretching mode was obsd., suggesting

2000

that the site of interaction for the hydrogen bond is with the oxo group. The shift of the H-Cl stretching mode is quite small compared to many HCl complexes and represents approx. a 3.5% decrease in the H-Cl stretching force const. These results suggest that the initial step in the oxidn. of many org. substrates contg. a heteroatom and an acidic hydrogen (e.g. CH_3OH) may be coordination of the substrate to the transition metal center rather than a hydrogen bonding interaction with the oxo group.
