

WCL3

WCl₃

1985

структурн.
параметр,
электропровод.

104: 75542c Electron diffraction study of tungsten trichloride. Ezhov, Yu. S.; Komarov, S. A. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1985, 26(5), 178-80 (Russ). The mol. structure was studied of WCl₃ in the vapor phase by electron diffractometry at 800 K where only the monomer exists. The radial distribution function is described. The structure was solved using the least-squares method of Yu. Ezhov and A. Sarvin (1983). The mol. has C₃ symmetry. The bond angles are given.

с.А. 1986, 104, N10

WCl₃

1985

18 Б1088. Электронографическое исследование трихлорида вольфрама. Ежов Ю. С., Комаров С. А. «Ж. структур. химии», 1985, 26, № 5, 178—180

Структурные параметры WCl₃ при $T=800\text{ K}$ (r_g -структура) найдены равными $\text{W}-\text{Cl}_{\text{акс}}$ 2,325(12), $\text{WCl}_{\text{экв}}$ 2,171(12), $\text{Cl}_{\text{акс}}\text{Cl}_{\text{экв}}$ 3,17(1), $\text{Cl}_{\text{акс}}\text{Cl}_{\text{акс}}$ 4,49(3) Å; $\text{Cl}_{\text{акс}}\text{WCl}_{\text{экв}}$ 89°(1), $\text{Cl}_{\text{акс}}\text{WCl}_{\text{акс}}$ 150°(5), где в скобках погрешности 2σ_{мн}. Вычислены частоты колебаний WCl₃ (симметрия C_{2v}): $\nu_1(A_1)$ 410(30), $\nu_2(A_1)$ 320(20), $\nu_3(A_1)$ 150(30); $\nu_4(B_1)$ 320(20), $\nu_5(B_1)$ 240(40), $\nu_6(B_2)$ 180(20).
Е. Л. Розенберг

r_i , келметр,
структура

х. 1986, 19, № 8

WCl₃

1986

105: 30520y Statistical method for determining the molecular-
structure parameters from electron-diffraction data. Bazhanov,
V. I. (Inst. Vys. Temp., Moscow, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1986,
27(1), 34-8 (Russ). The exptl. distribution function of scattering
intensity is statistically analyzed and a method for decoding electron
diffraction data is developed. The method was used to det. the
structure of WCl₃. Errors of detn. of structural parameters were
estd.

Структурн.
параметры,
электроно-
графия

C. A. 1986, 105, N 4

WCl₃

1986

7 7 Д35. Статистическая методика определения структурных параметров молекул из электронографических данных. Бажанов В. И. «Ж. структур. химии», 1986, 27, № 1, 34—38

Проведен статистич. анализ распределения эксперим. ф-ции интенсивности рассеяния, на основании которого предложена методика расшифровки электронографических данных. С помощью этой методики проведена обработка молекулярной составляющей интенсивности молекулы WCl₃, получен набор структурных параметров и оценены ошибки их определения. Резюме

М.А.

ср 1986, 18, м 7

WCl₃

1986

Т5 Б1113. Статистическая методика определения структурных параметров молекул из электронографических данных. Бажанов В. И. «Ж. структур. химии», 1986, 27, № 1, 34—38

Проведен статистич. анализ распределения эксперим. функции интенсивности рассеяния, на основании которого предложена методика расшифровки электронографич. данных. С помощью этой методики проведена обработка молек. составляющей интенсивности молекулы WCl₃, получен набор структурных параметров и оценены ошибки их определения. Резюме

геометрия,
теор. расчет

X, 1986, 19, N 15.

WCl₃

1990

17 Б1182. Повторное электронографическое исследование строения молекул WCl₃, W₂Cl₆ и WCl₄ / Бажанов В. И., Ежов Ю. С., Комаров С. А. // Ж. структур. химии.— 1990.— 31, № 1.— Рус.

Выполнен расчет амплитуд рассеяния быстрых электронов атомом вольфрама с помощью последних данных квантовой химии. С помощью полученных таким образом амплитуд проведена повторная обработка приведенной молек. составляющей интенсивности рассеяния для молекул WCl₃, W₂Cl₆ и WCl₄. Показано, что новые значения модулей и фаз атомных амплитуд рассеяния приводят к др. величинам $R(W-Cl_a)$ и $R(W-Cl_3)$ в рассмотренных молекулах. Из электронографич. данных определены эти расстояния, а также силовые постоянные вал. кол. W—Cl и деформационного Cl_a—W—Cl₃.

Резюме

ll. A.

(42)

X. 1990, N 17

WCl_3

1990

Bazhanov V. I.,
Ezhov Yu. S. et al.

Zh. Strukt. Khim. 1990,
31 (1), 49-55.

2e, <,
cer.
no cer.

(cer. W_2Cl_6 ; iii)