

Mo - O - Cl

$[\text{MoOCl}_5]^{2-}$ - Om. 22967!

1963

Edwards D.A.,

электрох-
сисм

J. Inorg. Nucl. Chem.,
1963, 25, 1198-1199.

Оксигалогениды

1964

Mo и W

17 Б64 Д. Спектроскопическое исследование оксигалогенидов молибдена и вольфрама. Dorn Ludwig. Spektroskopische Untersuchungen an Oxidhalogeniden des Wolframs und Molybdäns. Diss., Dokt. Naturwiss. Techn. Hochschule, Stuttgart. 1964, 62S., ill. (нем.)



с. 1965. 17

MoOCl₄
MoOCl₃

[Om. 22486]

1965

Colton R., Tomkins I.B.,

Aust. J. Chem., 1965,
18, 447.

2 Mo=O
6 p-re

MoO_2Cl_2

B9P - 2602 - VII

1966

Spectral and structural studies of some Group VIa dioxydihalides. C. G. Barraclough and J. Stals (Univ. Melbourne). *Australian J. Chem.* 19(5), 741-50(1966)(Eng). The ir and mass spectra of MoO_2Cl_2 , MoO_2Br_2 , WO_2Cl_2 , and WO_2Br_2 in the gas phase have been studied. The vapors contain mostly monomeric mols., but there is also a small amt. of relatively unstable dimeric species present in each case. In inert solvents, MoO_2Cl_2 and MoO_2Br_2 are dimeric and the ir spectra were reported. In the solid state, all 4 compds. are polymeric and the absence of the characteristic M:O ir frequency suggests that only bridging O atoms can be present. X-ray powder diffraction data suggested that the 4 compds. are isomorphous. Herbert Schumann

+3 un

C.A. 1966.65.4

4852lc

X

MoO_2Cl_2

12 Д253. Спектральные и структурные исследования некоторых диоксигалогенидов VI-а группы. Bağdas-
lough C. G., Stals J. Spectral and structural studies
of some group via dioxidyhalides. «Austral. J. Chem.»,
1966, 19, № 5, 741—750 (англ.)

Исследованы ИК-спектры MoO_2Cl_2 (I), MoO_2Br_2 (II),
 WO_2Cl_2 (III) и WO_2Br_2 (IV) в различных агрегатных
состояниях. На основании ИК- и масс-спектров показана,
что в парах I, II, III, IV существуют главным образом
в виде мономеров с небольшим содержанием нестабильных
димеров. В твердом состоянии все соединения имеют
полимерную структуру, причем отсутствие в спектрах
характеристичных полос $\text{Mo}=\text{O}$ и $\text{W}=\text{O}$ указывает на
существование в них только мостиковых атомов кислорода.
Исследование ИК-спектров растворов I и II в инертных
растворителях показало, что последние существуют в виде
димеров. Б. Жаданов

No OCl₄

DM. 22557

1966

Edwards D. A., Woolf A. A.,

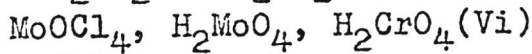
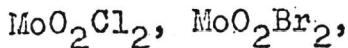
J. Chem. Soc. (A), 1966,
91-92.

21

OM. 365

VII 2729

1966



Jorns T.V., Stafford F.E.

J. Amer. Chem. Soc., 1966, 88(21), 4819-22.

Infrared spectra of some gaseous
molybdenum oxides and oxyhalides.

J,

CA, 1967, 66, N2, 6762j

MoOCl₄

[om. 22485]

1966

Larson M. L., Moore F. W.

crkmp

Inorg. Chem., 1966,
5, 801.

WOCl₄

[Om. 22485]

1966

Larson M.L., Moore F.W.
Inorg. Chem., 1966, 5,
801.

MoO_2Cl_2

[Om. 22485]

1966

MoOCl_3

Larson M.L., Moore F.W.,

crkmp

Inorg. Chem., 1966, 5,
801.

NOCl_4 (Vi, O^{IV}) : VII 3179 1968.

WO_2Cl_2 (O^{IV}) WOBr_4 , MoO_2Cl_2

Adams D. H., Churchill R. G., 4

J. Chem. Soc., A., 1968, (10), 2310-12 5

Vibrational spectra of some oxide
halides of molybdenum and tungsten

10

ЕСТЬ

См. Tab 8, 69, 526, 115-75 K

MoOCl₃(K) [Om. 22968] 1968
A-1214

Canterford J. H., Colton R.,
Tomkins J. B.,

Pi; Inorg. Nucl. Chem. Lett.,
1968, 1, 471-475.

MoOCl₄(x). Om. 22968 / A-1214 ¹⁹⁶⁸

Canterford J. H., Colton R.,
Tomkins J. B.,

Pi; Inorg. Nucl. Chem. Lett.,
1968, 1, 471-475.

MoO_2F_2 , MoO_2Cl_2 , MoO_2Br_2 , MoO_2I_2 , 1968
 WO_2Cl_2 , WO_2F_2 , WO_2Br_2 , WO_2I_2 VII 3202
 MoF_4 , MoOBr_4 , WOF_4 , WOBr_4 ,
 WOF_4 , $(\text{MoO}_3)_n$ (Vi)

Ward B. G. Stafford F. S.

10 ⊕

Inorg. Chem., 1968, 7(12), 2569-73 17
 Synthesis and structure of four- and five-
 coordinated, gaseous oxohalides of molybdenum
 and tungsten.

CA 116: 20, 25304 K

MoOCl_4
 MoOCl_3

ВФ-5146-VII

1970

ИК-спектр
поглощ.

11 Б221. Изучение инфракрасных спектров и реакции тетрахлористой окиси молибдена и треххлористой окиси молибдена с некоторыми распространенными растворителями. Barraclough C. G., Kew D. J. Infrared spectral studies and some reactions with common solvents of molybdenum oxide tetrachloride and molybdenum oxide trichloride. «Austral. J. Chem.», 1970, 23, № 12, 2387—2396 (англ.)

Изучен ИК-спектр поглощения MoOCl_4 (I) в газ. фазе: 1020 см^{-1} (плечо), 1015 см^{-1} (вал. кол. $\text{Mo}=\text{O}$), 1007 см^{-1} (плечо), 450 см^{-1} (вал. $\text{Mo}-\text{Cl}$) и 396 (вал. $\text{Mo}-\text{Cl}$); спектры согласуются с квадратно-пирамидальной структурой мономерных молекул I. Измерены спектры I в CCl_4 , хлф., и циклогексане; в спектрах наблюдаются те же самые полосы, характерные для газ. фазы (напр., в CCl_4 , 1010 , 450 и 396 см^{-1}), а также слабые полосы.

Х. 1971.

11

991 и 965 см^{-1} в случае недостаточно сухих р-рителей, к-рые могут относиться к димерам I, образующихся по р-ции $2\text{I} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Mo}_2\text{O}_3\text{Cl}_6 + 2\text{HCl}$. В ацетоне и Et_2O спектры более сложны ввиду р-ций этих р-рителей с I; рассмотрены возможные структуры образующихся при этом комплексов. Измерены также спектры MoOCl_3 в хлорбензоле, ац. и Et_2O ; высказано предположение, что в двух последних р-рителях MoOCl_3 образует димеры.

Б. В. Рассадин

MoOCl_4

MoOCl_3

ИК-спектр

ф. 1841.

7 Д393. ИК-спектры MoOCl_4 и MoOCl_3 и некоторые их реакции с простыми растворителями. Barraclough C. G., Kew D. J. Infrared spectral studies and some reactions with common solvents of molybdenum oxide tetrachloride and molybdenum oxide trichloride. «Austral. J. Chem.», 1970, 23, № 12, 2387—2396 (англ.).

Исследованы ИК-спектры MoOCl_4 (I) в газовой фазе и растворах инертных растворителей, спектры I и MoOCl_3 (II) в ацетоне (Ац) и диэтиловом эфире (ДЭ) и спектр II в моноклорбензоле (ХБ). Газовый спектр I подтверждает, что I существует в виде мономерных молекул с квадратно-пирамидальной структурой. Аналогичную структуру имеет I в растворах CCl_4 и циклогексана. В Ац и ДЭ I вступает в реакции с растворителями с образованием II и MoO_2Cl_2 . Молекулы II в Ац, ДЭ и ХБ существуют в виде димеров. В инертных растворителях молекулы I реагируют с добавками воды с образованием $\text{Mo}_2\text{O}_3\text{Cl}_5$ и $\text{Mo}_2\text{O}_4\text{Cl}_4$. Приведены таблицы частот и дано отношение полос к характеристич. колебаниям связей и групп. Библ. 25. Э. В. Б.

1970

111

9445

66

70

$\text{VOCl}_3, \text{NbOCl}_3, \text{MoO}_2\text{Cl}_2, \text{WOCl}_4(\text{V})$ 1970

Beattie J.R., Livingston K.M.S.,
Reynolds D.F., Ozin G.A., VII 4780
J. Chem. Soc., 1970, A, No 8, 1210-16 (annul.)

Vibrational spectra of some oxide ha-
lides of the transition elements with
particular reference to gas-phase
and single-crystal Raman spec-
troscopy.

to ~~get~~ ~~copy~~ ~~CA:1970,73,114,19921e~~

$\text{MoO}_2\text{Cl}_2(2)$. 10m, 22605 1971

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

Adv. High. Temp. Chem.,

U.N., Kp; 1971, 3, 213-270

MoOCl₂ (2) 10m. 22605 1971

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

M.R.,
Kp.;

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

MoOCl₄

Bcp - 230 - XVII

1972

21283v Molecular structures of molybdenum and tungsten oxide tetrachlorides by gas electron diffraction. Iijima, Kinya; Shibata, Shuzo (Fac: Sci., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan). *Chem. Lett.* 1972, (11), 1033-6 (Eng). In the gas phase, both the MoOCl₄ and WOCl₄ mols. have a square-pyramidal structure (point group C_{4v}); the metal atom lies ~0.5 Å out of the chlorine plane. The internuclear distances M-Cl, M-O, and Cl...O and the O-M-Cl angles, resp., for the gaseous MOCl₄ mols. are: M = Mo, 2.278, 1.670, 3.112 Å, 103.0°; M = W, 2.280, 1.684, 3.116 Å, 102.6°.

comp. g.

2. g. g.

C.A. 1973. 78. N4

(+1)

⊗

$\text{MoO}_2\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1972.

Schroder F, Krebs B.,
Mattes R.

(Vi)

"Z. Naturforsch.", 1972,
27b, v1, 22-25.

(see $\text{MoO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, III)

41031.6640

TC, Ch

(MoOCl₅)²⁻
(MoOCl₄)₉₅₂₇₅

1974

02

X4-7113

Collin R. J., Griffith W. P., Pawson D.
Vibrational spectra of nitrido and oxo
complexes. "J. Mol. Struct.", 1973,
19, N 2, 531-544

(англ.)

0224 пик

198 199

216

ВИНИТИ

MoOCl₄

1972.

23 Б113. Масс-спектрометрическое изучение окси- и тиогалогенидов переходных металлов. Singleton Donald L., Stafford Fred E. A mass spectrometric study of transition metal oxo- and thiohalides. «Inorg. Chem.», 1972, 11, № 6, 1208—1215 (англ.)

(Y.) На масс-спектрометре с молек. пучком при энергии ионизирующих электронов 70 эв изучены масс-спектры (МС) MoOCl₄ (I), WOCl₄ (II), WScCl₄ (III), ReOCl₄ (IV), OsOCl₄ (V), CrO₂F₂ (VI), MoO₂Br₂ (VII), MoO₂Cl₂ (VIII), ReO₃Cl (IX). Интенсивности молек. ионов (p^+) увеличиваются в ряду II (0,36%) < IV (18%) < V (26%). Максимальным в МС I—V являются пики ионов MYCl₃ (Y=O или S). Их интенсивность (ΣI_i) уменьшается в ряду II > IV > V. Потенциалы ионизации (ПИ) P^+ I—V близки к потенциалам появления (ПП) ионов MYCl₃⁺, причем чем ниже интенсивность P^+ , тем меньше разность ПП—ПИ.

Ю. С. Некрасов

X-1972-23

(+8)



Mo O₂ Cl

1974

фотом.
спектр.

Burroughs P., et al.,
J. Chem Soc., Faraday Trans. 2,
1974, 70, (124, 1895-911.

(see RuO₄; III)

1975

MoOCl_4

Годовой отчет за 1975
по гор. 17-41

MoO_2Cl_2

(и.к. спектра
поглощения
оценка и.п.)

Дир. ф.т. МЗУ
руковод. Тлатевский В.М.
Комплексное исследование
т.д. св. в и молек. паяс.

X 4-8819

1975

 MoOCl_4 геометр.
структ.

17 Б99. Молекулярная структура тетрахлорида окиси молибдена, изученная методом газовой электронографии. Iijima Kinya, Shibata Shuzo. Molecular structure of molybdenum oxide tetrachloride studied by gas electron diffraction. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1975, 48, № 2, 666—668 (англ.)

Строение молекулы тетрахлорида окиси молибдена выполнено методом газовой электронографии при т-ре сопла 80° . Найдено, что молекула представляет собой квадратную пирамиду со след. значениями расстояний и средне-квадратичных амплитуд колебания: $\text{Mo}-\text{Cl}$ 2,279 (3), 0,061 (3), $\text{Mo}-\text{O}$ 1,658 (5), 0,043 (12) Å и углом $\angle \text{OMoCl}$ 102,8 (0,7), $\angle \text{ClMoCl}$ 87,2 (0,3)°. Измеренные в р-ре ИК-спектры MoOCl_4 и данные электронографии подтверждают большое сходство с молекулой WOCl_4 в парах.

И. Рогова

17 Б100. Влияние внешних магнитных полей на масс

X 41 Ешбз

X 1975 N 17

MoOCl4

*3 - 8819

1975

XVII - 1576

комп.
 напав

163514c Molecular structure of molybdenum oxide tetrachloride studied by gas electron diffraction. Iijima, Kinya; Shibata, Shuzo (Fac. Sci., Shizuoka Univ., Shizuoka, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1975, 48(2), 666-8 (Eng). The mol. structure of MoOCl4 was detd. to be a square pyramid by a sector-microphotometer method of gas electron diffraction. The mol. parameters obtained by a least-squares method are: $r_q(\text{Mo-Cl}) = 2.279 \pm 0.003$, $r_e(\text{Mo-O}) = 1.658 \pm 0.005$, and $r_e(\text{Cl} \cdots \text{Cl(s)}) = 3.142 \pm 0.008$ Å. The structure of gaseous MoOCl4 is similar to that of gaseous WOCl4. The ir spectra of MoOCl4 were also measured in solns.

C. A. 1975, 82 N 24

ВФ - 1249 - XVII 1975

MoO_2Cl_2 ; MoO_2Br_2

10 Б165. Спектры комбинационного рассеяния паров MoO_2Cl_2 и MoO_2Br_2 . Ковба В. М., Мальцев А. А. «Ж. неорганич. химии», 1975, 20, № 1, 22—24

спектры
крит.
рассеяни

Получены спектры КР паров MoO_2Cl_2 и MoO_2Br_2 при 200—800° в кварцевой кювете с двумя зонами нагрева, дается отнесение полос. Согласно полученным данным, MoO_2Cl_2 термически устойчив, а MoO_2Br_2 разлагается с выделением брома, причем процесс в значит. степени обратим.

Резюме

x 1975 N10.

MoO_2Cl_2

MoO_2Br_2

..

Спектры
комб. рас.

Вр-1249-XVII 1975

(4 Д496) Спектры комбинационного рассеяния паров MoO_2Cl_2 и MoO_2Br_2 . Ковба В. М., Мальцев А. А. «Ж. неорган. химии», 1975, 20, № 1, 22—24

Получены спектры комб. рас. паров MoO_2Cl_2 и MoO_2Br_2 при 200—800°С в кварцевой кювете с двумя зонами нагрева. Дается отнесение полос. Согласно полученным данным, MoO_2Cl_2 термически устойчив, а MoO_2Br_2 разлагается с выделением брома, причем процесс в значительной степени обратим. Автореферат

ф. 1975 №

(+1)

(+1) Ембуг (+1) м.р.

✕

MoO_2Cl_2

Bp-1249-XVII

1975

MoO_2Br_2

(Di)

162139x Raman spectra of molybdenum oxychloride and molybdenum oxybromide vapors. Kovba, V. M.; Mal'tsev, A. A. (USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1975, 20(1), 22-4 (Russ). Raman spectra of MoO_2Cl_2 , and MoO_2Br_2 vapors were measured at 200-800° in a quartz cell with 2 zones of heating. The line assignments are shown in tables. New interpretations were made esp. for the lines $\gamma_4(A_1)$, and $\gamma_5(A_2)$, the data for which are in disagreement with the published values. According to the data obtained, MoO_2Cl_2 is stable at high temps. whereas MoO_2Br_2 decomps. yielding Br (the latter process being partly reversible).

H. Parizkova

(+1) ☒

C. A. 1975, 82 v 24

ВФ - 1563 - XVII 1975

 MoO_2Cl_2

14 Б102. Электронографическое исследование строения молекулы MoO_2Cl_2 . Жарский И. М., Засорин Е. З., Спирidonov В. П., Новиков Г. И., Купреев В. Н. «Координац. химия», 1975, 1, № 4, 274—276

геометр.
структ.

Методом газовой электронографии изучено строение молекулы MoO_2Cl_2 . Конфигурация молекулы представляет собой искаженный тетраэдр симметрии C_{2v} с атомом Mo в центре и атомами O и Cl в вершинах. В результате расшифровки, выполненной МНК, получены след. значения межъядерных расстояний средне-квадратичных амплитуд колебаний и валентных углов:
 $r_g(\text{Mo}-\text{O}) = 1,698$ (6); $l_g(\text{Mo}-\text{O}) = 0,045$ (7);
 $r_g(\text{Mo}-\text{Cl}) = 2,259$ (5) Å; $l_g(\text{Mo}-\text{Cl}) = 0,044$ (3) Å;
 $\angle \text{OMoO} = 104$ (2)°; $\angle \text{ClMoCl} = 112$ (1)°. Проведено сопоставление полученных данных с литературными.

Автореферат

X. 1975. N 14

1979
Molalla Drake M.C., Rosenblatt G.M.,

Raman spectroscopy in high
temperature chemistry.

CKP 10th Materials Research Symposi-
um on Characterization of
High temperature, Vapors
and Gases.

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

Modely

ВФ - XVII - 3064

1979

Modely

8 Б43. Экспериментальное и теоретическое исследование электронных спектров оксотетрахлоридов молибдена и вольфрама. Тополь И. А., Степанов Н. Ф., Ковба В. М. «Теор. и эксперим. химия», 1979, 15, № 6, 697—703

(2i)

В видимой и ближней УФ-области измерены спектры поглощения паров над оксотетрахлоридами молибдена и вольфрама. Методом ССП X_α рассеянных волн в модели перекрывающихся сфер проведены расчеты электронной структуры молекул $MoOCl_4$ и $WOCl_4$. В приближении переходного состояния вычислены средн. энергии оптич. переходов и проведено отнесение полос в спектрах. Установлено, что полосы, наблюдаемые в спектрах $MoOCl_4$ (650, 470, 270 нм) и $WOCl_4$ (480, 370, 230 нм), связаны с переходами с верхних занятых МО на первые вакантные МО (соотв. $5e \rightarrow 2b_2^*$, $3e \rightarrow 2b_2^*$, $5e \rightarrow 4b_1^*$). Эти переходы являются пер. с переносом заряда.

Аннотация

(+1) ☒

X. 1980 N8

MoCl₄

WOCl₄

Del. encap

(+1) ☒

B-9 - XVII - 3064 1979

✓ 92: 85282r Experimental and theoretical study of the electronic spectra of molybdenum and tungsten oxide tetrachlorides. Topol, I. A.; Stepanov, N. F.; Kovba, V. M. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1979, 15(6), 697-703 (Russ). In the visible and near UV regions, the absorption spectra were measured of vapors over MoOCl₄ and WOCl₄. By a scattered-wave method (self-consistent-field X α), in a model of overlapping spheres, electronic structures were calcd. In a transition-state approxn., the av. energy of optical transitions was calcd. and the spectral bands were assigned. Bands obsd. in the spectra of MoCl₄ (650, 470, 270 nm) and WOCl₄ (480, 370, 230 nm) are assocd. with transitions from upper occupied mol. orbitals to the 1st vacant mol. orbitals (corresponding to 5e $\rightarrow$ 2b₂^{*}, 3e $\rightarrow$ 2b₂^{*}, 5e $\rightarrow$ 4b₁^{*}). These transitions are transitions with charge transfer.

CA 1980 92 N10

$MoOCl_4$

$WOCl_4$

$\gamma; \beta;$

(+1) $\square$

X. 1981 N 3

3 Б44. Электронное строение и электронные спектры поглощения оксотетрахлоридов молибдена и вольфрама.

Topol Igor A., Stepanov Nikolaj F., Kovba Vasilij M. Electronic structure and electronic absorption spectra of molybdenum and tungsten oxotetrachlorides. «Theor. chim. acta», 1980, 56, № 4, 297—306 (англ.)

Измерены электронные спектры поглощения оксотетрахлоридов молибдена и вольфрама в газовой фазе и рассчитано электронное строение этих молекул методом ССП- $X\alpha$ рассеянных волн при эксперим. равновесной геометрии. Расчеты проводились в приближении перекрывающихся атомных сфер. Для $MoOCl_4$ оптимизация параметров сфер выполнялась по методу Нормана. В случае $WOCl_4$ параметры сфер переносились из молекулы $MoOCl_4$ с учетом изменения отношения радиусов сфер при переходе из молекулы в молекулу. В приближении переходного состояния вычислены потенциалы ионизации и энергии разрешенных по симметрии оптич. переходов в обеих молекулах. Анализ

1980
1981
1982
1983
1984
1985
1986
1987
1988
1989
1990
1991
1992
1993
1994
1995
1996
1997
1998
1999
2000
2001
2002
2003
2004
2005
2006
2007
2008
2009
2010
2011
2012
2013
2014
2015
2016
2017
2018
2019
2020
2021
2022
2023
2024
2025
2026
2027
2028
2029
2030
2031
2032
2033
2034
2035
2036
2037
2038
2039
2040
2041
2042
2043
2044
2045
2046
2047
2048
2049
2050
2051
2052
2053
2054
2055
2056
2057
2058
2059
2060
2061
2062
2063
2064
2065
2066
2067
2068
2069
2070
2071
2072
2073
2074
2075
2076
2077
2078
2079
2080
2081
2082
2083
2084
2085
2086
2087
2088
2089
2090
2091
2092
2093
2094
2095
2096
2097
2098
2099
2100
2101
2102
2103
2104
2105
2106
2107
2108
2109
2110
2111
2112
2113
2114
2115
2116
2117
2118
2119
2120
2121
2122
2123
2124
2125
2126
2127
2128
2129
2130
2131
2132
2133
2134
2135
2136
2137
2138
2139
2140
2141
2142
2143
2144
2145
2146
2147
2148
2149
2150
2151
2152
2153
2154
2155
2156
2157
2158
2159
2160
2161
2162
2163
2164
2165
2166
2167
2168
2169
2170
2171
2172
2173
2174
2175
2176
2177
2178
2179
2180
2181
2182
2183
2184
2185
2186
2187
2188
2189
2190
2191
2192
2193
2194
2195
2196
2197
2198
2199
2200
2201
2202
2203
2204
2205
2206
2207
2208
2209
2210
2211
2212
2213
2214
2215
2216
2217
2218
2219
2220
2221
2222
2223
2224
2225
2226
2227
2228
2229
2230
2231
2232
2233
2234
2235
2236
2237
2238
2239
2240
2241
2242
2243
2244
2245
2246
2247
2248
2249
2250
2251
2252
2253
2254
2255
2256
2257
2258
2259
2260
2261
2262
2263
2264
2265
2266
2267
2268
2269
2270
2271
2272
2273
2274
2275
2276
2277
2278
2279
2280
2281
2282
2283
2284
2285
2286
2287
2288
2289
2290
2291
2292
2293
2294
2295
2296
2297
2298
2299
2300
2301
2302
2303
2304
2305
2306
2307
2308
2309
2310
2311
2312
2313
2314
2315
2316
2317
2318
2319
2320
2321
2322
2323
2324
2325
2326
2327
2328
2329
2330
2331
2332
2333
2334
2335
2336
2337
2338
2339
2340
2341
2342
2343
2344
2345
2346
2347
2348
2349
2350
2351
2352
2353
2354
2355
2356
2357
2358
2359
2360
2361
2362
2363
2364
2365
2366
2367
2368
2369
2370
2371
2372
2373
2374
2375
2376
2377
2378
2379
2380
2381
2382
2383
2384
2385
2386
2387
2388
2389
2390
2391
2392
2393
2394
2395
2396
2397
2398
2399
2400
2401
2402
2403
2404
2405
2406
2407
2408
2409
2410
2411
2412
2413
2414
2415
2416
2417
2418
2419
2420
2421
2422
2423
2424
2425
2426
2427
2428
2429
2430
2431
2432
2433
2434
2435
2436
2437
2438
2439
2440
2441
2442
2443
2444
2445
2446
2447
2448
2449
2450
2451
2452
2453
2454
2455
2456
2457
2458
2459
2460
2461
2462
2463
2464
2465
2466
2467
2468
2469
2470
2471
2472
2473
2474
2475
2476
2477
2478
2479
2480
2481
2482
2483
2484
2485
2486
2487
2488
2489
2490
2491
2492
2493
2494
2495
2496
2497
2498
2499
2500
2501
2502
2503
2504
2505
2506
2507
2508
2509
2510
2511
2512
2513
2514
2515
2516
2517
2518
2519
2520
2521
2522
2523
2524
2525
2526
2527
2528
2529
2530
2531
2532
2533
2534
2535
2536
2537
2538
2539
2540
2541
2542
2543
2544
2545
2546
2547
2548
2549
2550
2551
2552
2553
2554
2555
2556
2557
2558
2559
2560
2561
2562
2563
2564
2565
2566
2567
2568
2569
2570
2571
2572
2573
2574
2575
2576
2577
2578
2579
2580
2581
2582
2583
2584
2585
2586
2587
2588
2589
2590
2591
2592
2593
2594
2595
2596
2597
2598
2599
2600
2601
2602
2603
2604
2605
2606
2607
2608
2609
2610
2611
2612
2613
2614
2615
2616
2617
2618
2619
2620
2621
2622
2623
2624
2625
2626
2627
2628
2629
2630
2631
2632
2633
2634
2635
2636
2637
2638
2639
2640
2641
2642
2643
2644
2645
2646
2647
2648
2649
2650
2651
2652
2653
2654
2655
2656
2657
2658
2659
2660
2661
2662
2663
2664
2665
2666
2667
2668
2669
2670
2671
2672
2673
2674
2675
2676
2677
2678
2679
2680
2681
2682
2683
2684
2685
2686
2687
2688
2689
2690
2691
2692
2693
2694
2695
2696
2697
2698
2699
2700
2701
2702
2703
2704
2705
2706
2707
2708
2709
2710
2711
2712
2713
2714
2715
2716
2717
2718
2719
2720
2721
2722
2723
2724
2725
2726
2727
2728
2729
2730
2731
2732
2733
2734
2735
2736
2737
2738
2739
2740
2741
2742
2743
2744
2745
2746
2747
2748
2749
2750
2751
2752
2753
2754
2755
2756
2757
2758
2759
2760
2761
2762
2763
2764
2765
2766
2767
2768
2769
2770
2771
2772
2773
2774
2775
2776
2777
2778
2779
2780
2781
2782
2783
2784
2785
2786
2787
2788
2789
2790
2791
2792
2793
2794
2795
2796
2797
2798
2799
2800
2801
2802
2803
2804
2805
2806
2807
2808
2809
2810
2811
2812
2813
2814
2815
2816
2817
2818
2819
2820
2821
2822
2823
2824
2825
2826
2827
2828
2829
2830
2831
2832
2833
2834
2835
2836
2837
2838
2839
2840
2841
2842
2843
2844
2845
2846
2847
2848
2849
2850
2851
2852
2853
2854
2855
2856
2857
2858
2859
2860
2861
2862
2863
2864
2865
2866
2867
2868
2869
2870
2871
2872
2873
2874
2875
2876
2877
2878
2879
2880
2881
2882
2883
2884
2885
2886
2887
2888
2889
2890
2891
2892
2893
2894
2895
2896
2897
2898
2899
2900
2901
2902
2903
2904
2905
2906
2907
2908
2909
2910
2911
2912
2913
2914
2915
2916
2917
2918
2919
2920
2921
2922
2923
2924
2925
2926
2927
2928
2929
2930
2931
2932
2933
2934
2935
2936
2937
2938
2939
2940
2941
2942
2943
2944
2945
2946
2947
2948
2949
2950
2951
2952
2953
2954
2955
2956
2957
2958
2959
2960
2961
2962
2963
2964
2965
2966
2967
2968
2969
2970
2971
2972
2973
2974
2975
2976
2977
2978
2979
2980
2981
2982
2983
2984
2985
2986
2987
2988
2989
2990
2991
2992
2993
2994
2995
2996
2997
2998
2999
3000
3001
3002
3003
3004
3005
3006
3007
3008
3009
3010
3011
3012
3013
3014
3015
3016
3017
3018
3019
3020
3021
3022
3023
3024
3025
3026
3027
3028
3029
3030
3031
3032
3033
3034
3035
3036
3037
3038
3039
3040
3041
3042
3043
3044
3045
3046
3047
3048
3049
3050
3051
3052
3053
3054
3055
3056
3057
3058
3059
3060
3061
3062
3063
3064
3065
3066
3067
3068
3069
3070
3071
3072
3073
3074
3075
3076
3077
3078
3079
3080
3081
3082
3083
3084
3085
3086
3087
3088
3089
3090
3091
3092
3093
3094
3095
3096
3097
3098
3099
3100
3101
3102
3103
3104
3105
3106
3107
3108
3109
3110
3111
3112
3113
3114
3115
3116
3117
3118
3119
3120
3121
3122
3123
3124
3125
3126
3127
3128
3129
3130
3131
3132
3133
3134
3135
3136
3137
3138
3139
3140
3141
3142
3143
3144
3145
3146
3147
3148
3149
3150
3151
3152
3153
3154
3155
3156
3157
3158
3159
3160
3161
3162
3163
3164
3165
3166
3167
3168
3169
3170
3171
3172
3173
3174
3175
3176
3177
3178
3179
3180
3181
3182
3183
3184
3185
3186
3187
3188
3189
3190
3191
3192
3193
3194
3195
3196
3197
3198
3199
3200
3201
3202
3203
3204
3205
3206
3207
3208
3209
3210
3211
3212
3213
3214
3215
3216
3217
3218
3219
3220
3221
3222
3223
3224
3225
3226
3227
3228
3229
3230
3231
3232
3233
3234
3235
3236
3237
3238
3239
3240
3241
3242
3243
3244
3245
3246
3247
3248
3249
3250
3251
3252
3253
3254
3255
3256
3257
3258
3259
3260
3261
3262
3263
3264
3265
3266
3267
3268
3269
3270
3271
3272
3273
3274
3275
3276
3277
3278
3279
3280
3281
3282
3283
3284
3285
3286
3287
3288
3289
3290
3291
3292
3293
3294
3295
3296
3297
3298
3299
3300
3301
3302
3303
3304
3305
3306
3307
3308
3309
3310
3311
3312
3313
3314
3315
3316
3317
3318
3319
3320
3321
3322
3323
3324
3325
3326
3327
3328
3329
3330
3331
3332
3333
3334
3335
3336
3337
3338
3339
3340
3341
3342
3343
3344
3345
3346
3347
3348
3349
3350
3351
3352
3353
3354
3355
3356
3357
3358
3359
3360
3361
3362
3363
3364
3365
3366
3367
3368
3369
3370
3371
3372
3373
3374
3375
3376
3377
3378
3379
3380
3381
3382
3383
3384
3385
3386
3387
3388
3389
3390
3391
3392
3393
3394
3395
3396
3397
3398
3399
3400
3401
3402
3403
3404
3405
3406
3407
3408
3409
3410
3411
3412
3413
3414
3415
3416
3417
3418
3419
3420
3421
3422
3423
3424
3425
3426
3427
3428
3429
3430
3431
3432
3433
3434
3435
3436
3437
3438
3439
3440
3441
3442
3443
3444
3445
3446
3447
3448
3449
3450
3451
3452
3453
3454
3455
3456
3457
3458
3459
3460
3461
3462
3463
3464
3465
3466
3467
3468
3469
3470
3471
3472
3473
3474
3475
3476
3477
3478
3479
3480
3481
3482
3483
3484
3485
3486
3487
3488
3489
3490
3491
3492
3493
3494
3495
3496
3497
3498
3499
3500
3501
3502
3503
3504
3505
3506
3507
3508
3509
3510
3511
3512
3513
3514
3515
3516
3517
3518
3519
3520
3521
3522
3523
3524
3525
3526
3527
3528
3529
3530
3531
3532
3533
3534
3535
3536
3537
3538
3539
3540
3541
3542
3543
3544
3545
3546
3547
3548
3549
3550
3551
3552
3553
3554
3555
3556
3557
3558
3559
3560
3561
3562
3563
3564
3565
3566
3567
3568
3569
3570
3571
3572
3573
3574
3575
3576
3577
3578
3579
3580
3581
3582
3583
3584
3585
3586
3587
3588
3589
3590
3591
3592
3593
3594
3595
3596
3597
3598
3599
3600
3601
3602
3603
3604
3605
3606
3607
3608
3609
3610
3611
3612
3613
3614
3615
3616
3617
3618
3619
3620
3621
3622
3623
3624
3625
3626
3627
3628
3629
3630
3631
3632
3633
3634
3635
3636
3637
3638
3639
3640
3641
3642
3643
3644
3645
3646
3647
3648
3649
3650
3651
3652
3653
3654
3655
3656
3657
3658
3659
3660
3661
3662
3663
3664
3665
3666
3667
3668
3669
3670
3671
3672
3673
3674
3675
3676
3677
3678
3679
3680
3681
3682
3683
3684
3685
3686
3687
3688
3689
3690
3691
3692
3693
3694
3695
3696
3697
3698
3699
3700
3701
3702
3703
3704
3705
3706
3707
3708
3709
3710
3711
3712
3713
3714
3715
3716
3717
3718
3719
3720
3721
3722
3723
3724
3725
3726
3727
3728
3729
3730
3731
3732
3733
3734
3735
3736
3737
3738
3739
3740
3741
3742
3743
3744
3745
3746
3747
3748
3749
3750
3751
3752
3753
3754
3755
3756
3757
3758
3759
3760
3761
3762
3763
3764
3765
3766
3767
3768
3769
3770
3771
3772
3773
3774
3775
3776
3777
3778
3779
3780
3781
3782
3783
3784
3785
3786
3787
3788
3789
3790
3791
3792
3793
3794
3795
3796
3797
3798
3799
3800
3801
3802
3803
3804
3805
3806
3807
3808
3809
3810
3811
3812
3813
3814
3815
3816
3817
3818
3819
3820
3821
3822
3823
3824
3825
3826
3827
3828
3829
3830
3831
3832
3833
3834
3835
3836
3837
3838
3839
3840
3841
3842
3843
3844
3845
3846
3847
3848
3849
3850
3851
3852
3853
3854
3855
3856
3857
3858
3859
3860
3861
3862
3863
3864
3865
3866
3867
3868
3869
3870
3871
3872
3873
3874
3875
3876
3877
3878
3879
3880
3881
3882
3883
3884
3885
3886
3887
3888
3889
3890
3891
3892
3893
3894
3895
3896
3897
3898
3899
3900
3901
3902
3903
3904
3905
3906
3907
3908
3909
3910
3911
3912
3913
3914
3915
3916
3917
3918
3919
3920
3921
3922
3923
3924
3925
3926
3927
3928
3929
3930
3931
3932
3933
3934
3935

зарядового распределения в MoOCl_4 и WOCl_4 проведен в рамках приближенного вычисления заселенностей МО и эффективных зарядов атомов. Оценка дипольных моментов в MoOCl_4 и WOCl_4 , составляющая $+1,5 - +0,4D$, согласуется с величинами полученных эффективных зарядов. На основании рассчитанных значений энергий оптич. переходов проведена интерпретация эксперим. спектров поглощения. В расчете правильно переданы изменения энергетич. положений основных спектральных структур, в частности коротковолновый сдвиг спектра WOCl_4 относительно спектра MoOCl_4 . Рассчитанные значения первых потенциалов ионизации MoOCl_4 и WOCl_4 (12,1 и 11,8 эВ, соотв.) согласуются с соотв-щими потенциалами появления молек. ионов $10,6 \pm 1$ и $10,8 \pm 0,5$ эВ.

И. А. Тополь

МоОСл₄
W O Cl₄

Исследования
расчет

Э.А. Смирнов

Е

№ 1949, 1120

1979
20 Б71. Расчеты электронного строения молекул MoOCl_4 и WOCl_4 методом ССП- X_α рассеянных волн. Тополь И. А., Степанов Н. Ф., Ковба В. М. «Конф. по теории атомов и молекул, Вильнюс, 1979. Тез. докл. Ч. 2». Вильнюс, 1979, 43

Измерены электронные спектры поглощения MoOCl_4 и WOCl_4 и методом ССП- X_α рассеянных волн в модели перекрывающихся атомных сфер рассчитано электронное строение этих молекул. Параметры атомных сфер определялись по методу Нормана. Анализ электронного строения и зарядового распределения в обеих молекулах проведен в рамках приближенного вычисления заселенностей молек. орбиталей и оценок эффективных зарядов атомов различными способами. В приближении переходного состояния рассчитаны потенциалы ионизации валентных электронов и средние энергии разрешенных по симметрии оптич. переходов. На основе расчетов энергий переходов установлены общие закономерности в эксперим. электронных спектрах поглощения молекул MoOCl_4 и WOCl_4 в газовой фазе, и проведено отнесение структур спектров поглощения. Резюме

1980



кв. мех.
расчет.

Weber Z., et al.,

Inorg. Chem. 1980,
19 (8), 2206-9.



MoOCl₄

[Ommux 13175]

1981

Levasor W., et al.

UK етекір,
ЕТрүктүрө

J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1981, N 12,
2501-2507.

AlO Cl₂ O₂

Comm. much 12802 / 1981

Sambe H., Feton R.

примод.
сметр

(7)

Chem. Phys., 1981, 59,
329-29.

MoDCy (om. 19640) 1981

Shishkin N. Ya., Zhar-
sky I. M., et al.

сирькм. 7. mol. Street, 1981,
73, 249-252.

MoO_2Cl_2

OM. 15498

1982

'97: 226195g Infrared and electronic spectra of matrix-isolated dichlorodioxo- and dibromodioxomolybdenum(VI) and tungsten(VI): Levason, William; Narayanaswamy, Ramaier; Ogden, J. Steven; Rest, Antony J.; Turf, Jeremy W. (Dep. Chem., Univ. Southampton, Southampton, UK SO9 5NH). *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1982, (10), 2009-13 (Eng). Prominent IR and UV-visible bands were assigned for MO_2X_2 ($\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$), isolated as monomers in low-temp. matrixes. For MoO_2X_2 , the vibrational isotope effect on the antisym. stretching mode $\nu(\text{M}=\text{O})$ leads to ests. of bond angles $\text{O}-\text{Mo}-\text{O}$ of 109° whereas for WO_2X_2 , relative band intensities predict $\text{O}-\text{W}-\text{O} = 107^\circ$. In the quant. assignment of the electronic spectra, the positions of the charge-transfer bands require lower values of optical electronegativities than are appropriate for octahedral complexes.

UK u 4P
Cnekmp

Мампуе

(+3) 

C.A. 1982, 97, N 26



MoO_2Br_2 ,
 WO_2Cl_2 , WO_2Br_2

MoO₂Cl₂

DM. 15498 1982

7 Б256. Инфракрасные и электронные спектры изолированных в матрице диоксодихлоридов и диоксодибромидов молибдена (6+) и вольфрама (6+). Infrared and electronic spectra of matrix-isolated dichlorodioxo- and dibromodioxo-molybdenum(VI) and -tungsten(VI). Levason William, Narayanaswamy Ramaier, Ogden J. Steven, Rest Antony J., Turffi Jeremy W. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1982, № 10, 2009—2013 (англ.)

Vi, M. N.

(43)

X, 1983, 19,
47

Измерены ИК- и электронные спектры поглощения молекул диоксодихлоридов и диоксодибромидов молибдена и вольфрама изолированных в Ar и N₂ матрицах. В ИК-спектрах (N₂ матрицы) наблюдались полосы след. колебаний (положение полос в см⁻¹): MoO₂Cl₂ — ν_1 (A₁, сим. вал. MoO₂) = 996; ν_6 (B₁, асим. вал. MoO₂) = 968, ν_2 (A₁, сим. вал. MoCl₂) = 434, ν_8 (B₂, асим. вал. MoCl₂) = 451, ν_3 (A₁ δ MoO₂) = 340; MoO₂Br₂ — ν_1 = 991, ν_6 = 963, ν_2 = 262, ν_8 = 351, ν_3 = 378; WO₂Cl₂ — ν_1 = 1014, ν_6 = 974, ν_8 = 425; WO₂Br₂ — ν_1 = 1009, ν_6 = 969, ν_2 = 258, ν_8 = 309, ν_3 = 363. В полосах ν_1 и ν_6 MoO₂Cl₂ и MoO₂Br₂ наблюдалась изотопная структура по молибдену. На основании изотопных сдвигов полос оценен угол <OMoO в

молекулах MoO_2Cl_2 и MoO_2Br_2 . Полученная оценка ($109 \pm 3^\circ$) больше, чем величина угла, найденного методом газовой электронографии ($104 \pm 2^\circ$). В случае диоксидхлорида вольфрама в спектре наблюдались также две полосы (1032 и 380 см^{-1}) WOCl_4 , образующегося в результате частичного диспропорционирования испаряемого WO_2Cl_2 . В электронных спектрах поглощения наблюдались полосы (N_2 матрица, положение полос в нм): MoO_2Cl_2 — 215, 225, 260; MoO_2Br_2 — 240, 250 (плечо), 300; WO_2Cl_2 — 235, 280; WO_2Br_2 — 205, 235, 260. Все полосы отнесены к переходам с переносом заряда с кислорода на металл (полосы в более коротковолновой области) и с галогена на металл. С использованием оптич. электроотрицательностей (χ) теоретически оценены нижние границы энергий переходов. Рассмотрены два набора χ для Cl, Br, O, Mo и W: I — 3,0, 2,8, 3,6, 2,1 и 2,0; II — 3,0, 2,8, 3,2, 1,7 и 1,6. Сделан вывод, что II лучше согласуется с экспериментом. В. М. Ковба

MoOCl_4 [om. 15498_{II}d¹) 1982

Pi. Levason W., Ogden J. S.,
et al.

J. Chem. Soc. Dalton
Trans.; 1982. N 9, 1877 -
- 1878.

(cor. OsOCl₄; III)

MoO_2Cl_2

(арт. 15466a)

1982

1 Д137. Электронное строение и одноэлектронные свойства молекулы MoO_2Cl_2 . Электронные спектры молекул MoO_2Cl_2 , MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 . Electronic structure and one-electron properties of the MoO_2Cl_2 molecule. Electronic spectra of the MoO_2Cl_2 , MoO_2Br_2 and WO_2Br_2 molecules. Topol I. A., Chesnyi A. S., Kovba V. M., Stepanov N. F. «Theor. chim. acta», 1982, 61, № 4, 369—377 (англ.)

расчет γ ,
 ϵ_i , ν_i

☒ Электронное строение молекулы MoO_2Cl_2 исследовано методом ССП $X\alpha$ -рассеянных волн с использованием модели перекрывающихся атомных сфер. Определены заряды атомов, диамагн. восприимчивость и моменты распределения электронной плотности основного состояния. Методом переходного состояния рассчитаны потенциалы ионизации, энергии и силы осцилляторов разрешенных электрических дипольных переходов. Полученный электронный спектр характеризуется двумя

(+2)

сп. 1983, 18, № 1

максимумами интенсивности при энергиях переходов 5,3 и 5,7—6,1 эВ. Сопоставление с экспериментом показало, что расчетные энергии переходов завышены на 0,2÷0,5 эВ, а расстояние между максимумами воспроизведено достаточно точно. Результаты расчетов использованы для интерпретации спектров поглощения MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 в газовой фазе. А. В. Зайцевский

MoO₂Cl₂

Оммух 15466a 1982

97: 171687m Electronic structure and one-electron properties of the molybdenum dioxodichloride (MoO₂Cl₂) molecule. Electronic spectra of the molybdenum dioxodichloride (MoO₂Cl₂), molybdenum dioxodibromide (MoO₂Br₂), and tungsten dioxodibromide (WO₂Br₂) molecules. Topol, I. A.; Chesnyi, A. S.; Kovba, V. M.; Stepanov, N. F. (USSR Res. Inst. Metrol. Serv., 117334 Moscow, USSR). *Theor. Chim. Acta* 1982, 61(4), 369-77 (Eng). The SCF-X_α-SW method in an overlapping at. spheres approxn. was used to calc. the electronic structure, ionization potentials, energies and oscillator strengths of the allowed optical transitions and also some of the 1-electron properties of MoO₂Cl₂. The electronic absorption spectra of vapors over Mo and W were measured. Interpretation of the exptl. electronic absorption spectra of the MoO₂Cl₂, MoO₂Br₂ and WO₂Br₂ mols. is discussed.

теорет.
расчет

Электронные
спектра

(+2) ☒

C. A. 1982, 97, N 20.

MoO_2Cl_2

Опт. 1546 баг

1982

1 Б44. Электронное строение и одноэлектронные свойства молекулы MoO_2Cl_2 . Электронные спектры молекул MoO_2Cl_2 , MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 . Electronic structure and ~~one-electron properties of the~~ MoO_2Cl_2 molecule. Electronic spectra of the MoO_2Cl_2 , MoO_2Br_2 and WO_2Br_2 molecules. Topol I. A., Chesnyi A. S., Kovba V. M., Stepanov N. F. «Theor. chim. acta», 1982, 61, № 4, 369—377 (англ.)

геометрия,
структура

(+2) 

Методом ССП- X_α рассеянных волн в приближении перекрывающихся атомных сфер рассчитано электронное строение молекулы MoO_2Cl_2 . Измерены электронные спектры паров над диоксобромидами молибдена и вольфрама. В приближении переходного состояния проведены расчеты энергий ионизации, энергий и сил осцилляторов разрешенных одноэлектронных оптич. переходов в молекуле MoO_2Cl_2 . Установлено, что все переходы, наблюдаемые в области эксперим. спектра поглощения в MoO_2Cl_2 относятся к переходам с переносом заряда. Распределение заряда в MoO_2Cl_2 ис-

Х. 1983, 19, N1

следовано в результате анализа заселенностей МО и данных расчетов эффективных зарядов атомов, дипольного момента, компонент квадрупольного момента и диамагнитной восприимчивости. Исследована зависимость вычисляемых величин от степени перекрывания атомных сфер. Суперпозиция сил осцилляторов оптич. переходов в MoO_2Cl_2 в виде гауссовых кривых позволила описать форму эксперим. спектра поглощения. С использованием данных расчетов зарядового распределения и оптич. переходов в MoO_2Cl_2 проведена интерпретация тенденций в изменении спектральных структур, наблюдаемых в соотв. эксперим. электронных спектрах поглощения молекул MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 . И. А. Т.

МООУ (от 22970) 1983

Бобкова В.А., Алексеев-
кова Ю.А.

сер.
исей.

Иванов. хим.-технол. ин-т.
Иванов, 1983, 16с., ил. Библиогр.

20 назв. (Рукопись деп. в
ВИНИТИ 18 июля 1983., №
4039-83 Деп.).

(сер. ОгОУ; III)

MoOCl_4^-

1983

Baran E. I., Cabello C. I.

Vi, curr.
noctm. Z. Naturforsch, 1983,
A38, N5, 563-565.

● (curr. TcOCl_4^- ; III)

МоОС₄

1983

Bobkova V. A., Alekshon-
kova Yu. A.

ср. пос.т.
сроне-
квadrat.
амплитуды
колебаний

Deposited Dec. 1983,
VINITI 4039-83, 17pp.

● (сер. СЗОФ₄; III)

MoO_2Cl_2

1 От. 17026

1983

23 Б37. Электронная структура и спектры молекул диоксидгалогенидов молибдена и вольфрама. Тополь И. А., Ковба В. М., Степанов Н. В., Чесный А. С. «Теор. и эксперим. химия», 1983, 19, № 3, 275—281

Методом ССП- $X\alpha$ рассеянных волн ($X\alpha$ -РВ) рассчитано электронное строение молекулы $\text{MoO}_2\text{Cl}_2(C_{2v})$. Исследована зависимость изменения энергетич. спектра МО, заселенностей МО, эффективных зарядов атомов, потенциалов ионизации, энергий оптич. переходов и ря-

расчет γ ,
м.л., геометр.,
структура

(+2)

Х. 1983, 19, № 23

да одноэлектронных св-в молекулы от небольших изменений степени перекрывания атомных сфер. В приближении переходного состояния рассчитаны силы осцилляторов одноэлектронных переходов, с использованием к-рых построено распределение интенсивности электронного спектра поглощения молекулы MoO_2Cl_2 . Показано, что теор. форма спектра, независимо от изменений, вызываемых варьированием параметров метода $X\alpha$ -РВ, правильно воспроизводит двухгорбую структуру эксперим. спектра. Измерены электронные спектры поглощения молекул MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 . На основании результатов расчета электронного строения молекулы MoO_2Cl_2 и подобия эксперим. спектров диоксигалогенидов Мо и W интерпретированы изменения энергетич. положения полос в спектрах MoO_2Br_2 и WO_2Br_2 и сделан ряд предположений об электронном строении этих молекул. И. А. Тополь

(+2) [X]



MoO_2Cl_2

Om. 17026

1983

99: 113218q Electronic structure and spectra of molecules of molybdenum and tungsten dioxide dihalides. Topol, I. A.; Kovba, V. M.; Stepanov, N. P.; Chesngl, A. S. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1983, 19(3), 276-81 (Russ). Electronic absorption spectra of MoO_2X_2 ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) and WO_2Br_2 were obtained and compared to the theor. spectrum of MoO_2Cl_2 . The calcs., which were conducted using an SCF $X\alpha$ -scattered wave method in the approxn. of overlapping at. spheres, gave also the energies, ionization potentials, and populations of MOs, as well as the effective at. charges, dipole moment, and components of the quadrupole moment tensor for MoO_2Cl_2 . The transition energies and oscillator strengths of allowed optical transitions of MoO_2Cl_2 were also obtained. The results are discussed in terms of electronic structure of Mo and W dioxide dihalides.

in chem
now used.

72

MoO_2Br_2

WO_2Br_2

C. A. 1983, 99, N 14

MoO_2Cl_2

1985

Лочиков И.В., Ковба В.И. и др.

Тримерные колебат. спек-
тры к неследов. меорган. и
координат. соедин. 10 Всес.
науч. совещ. Тез. докл. Б.И.,
1985, 24.

(ср. CrO_2F_2 ; III)

1985

МоОлу_у

Лочиков И. В., Ковба В. М. и др.

Применение колебат. спект-
ров к исслед. неорг. и
координат. соедин. 10 Всес.
науч. совещ. тез. докл. Б. М.,
1985, 24.
(см. CrO_2F_2 ; III)

ссыл.
пост.,
Vi;

$\text{MoO}_2 \text{Cl}_2$

1985

Осипова Т. Е., Коремко Д. Н.,
и др.

Изв. СО АН СССР. Сер.
Хим. Н., 1985, N 8/3,
8-13.

(сер. CrO_2F_2 ; III)

сер.
хим.,
Д. Е. и др.

$[Mo_3OCl_6]^{2+}$

1986

(Vi)

110126k Normal coordinate analysis of trinuclear molybdenum cluster unit $[Mo_3OCl_6]^{2+}$ in $H[Mo_3O(OAc)_3Cl_3] \cdot 3H_2O$. Chichang; Chen, Gong (Dep. Chem., Fuzhou Univ., Fuzhou, Rep. China). *Jiegou Huaxue* 1986, 5(1), 14-17 (Eng). IR spectra of $H[Mo_3O(OAc)_3Cl_3] \cdot 3H_2O$ were recorded on a Perkin-Elmer 983G spectrophotometer and a FTS 20E/D-V vacuum Fourier transform spectrometer using CsI pellets. The calcn. work of normal coordinate anal. was performed on a PDP-11/34 computer with the calcn. program of National Research Council of Canada. An Urey-Bradley force field was used in the calcn. The structural model of the unit for calcn. was considered a C_{3v} symmetry. According to C_{3v} symmetry, fundamental frequency bands were divided into $\Gamma = 6A_1 + 2A_2 + 8E$ (A, E , IR active, A_2 , IR inactive). Force consts. were selected by empirical method. The average of agreement between obsd. and calcd. frequencies was 1.15%. Final refined force consts., the obsd. and calcd. frequencies, potential energy distribution, and assignment of vibrational modes are given.

C.A. 1987, 106, N 14

MoCl_4

[om. 29832]

1987

Dobbs R.D., Mehre W.J.,

теор.
расчет
структ.
парам.
и D_i

J. Comput. Chem., 1987,
8, n 6, 880-93.

1988

МоОтСлн

Назаренко И. И.,

Юмчман В. С., Эжов Ю. С.

$m=1,2$

$n=1,2,3,4$

УН-т высок. температур

АН СССР.-М., 1988-29с-Библиогр.

Уб. произв.-Рус.-Деп. в ВИНТИ

28.09.88, N 7181-В88.

(св. CrOтFн $m=1,2$ $n=1,2,3,4$; III)

MoO₂Cl₂ (PM 35698)

MoO₂Cl₂

1991

114: 256026q The infrared spectra of the molybdenum monoxide dichloride, molybdenum dioxide dichloride, tungsten monoxide monochloride, tungsten dioxide dichloride, molybdenum dioxide, molybdenum trioxide, and molybdenum oxide (Mo₂O₃) gaseous molecules. Neikirk, D. L.; Fagerli, J. C.; Smith, M. L.; Mosman, D.; Devore, T. C. (Dep. Chem., James Madison Univ., Harrisonburg, VA 22807 USA). *J. Mol. Struct.* 1991, 244, 165-81 (Eng). The IR spectra of several gaseous molybdenum and tungsten oxides and oxychlorides which are thought to be transporting agents for these metals in halogen lamps were obtained. MoO₂Cl₂ and WO₂Cl₂ were obsd. in absorption and emission by heating the solid compd.; Mo₂O₃ was obsd. in absorption by heating the solid and by observing the products of the reaction between Mo and N₂O; MoO₂ and MoO₃ were obsd. as products from the reaction between Mo and N₂O; and MoOCl and WOCl were formed from the reaction between the metal and POCl₃. All spectra were obtained at a resoln. of 0.5 cm⁻¹ which permits the band shapes to be resolved and definite spectral assignments to be made.

UK-camp,

M.A.

(43) ~~A~~

C.A. 1991, 114, N 26

WO₂Cl₂, MoOCl,
WOCl

O Mollu

[OM · 36726]

1992

Sosa C., Andzelm J., et al.,

спуск
кондом-
ламент,
непрет-
рает

J. Phys. Chem. 1992, 96,
6630-36.

MOCLs

1992

Pershina V., Lepp W.D.,
et al.,

Электрон.
структура,
теор. рас-
чет.

J. Chem. Phys. 1992,
97, N2, 1123-1131.

(all. VOCl_3 ;  III)

MoO_2Cl_2

1992

№ 15 Б1113. Строение молекул дихлор- и дибром(диоксо)молибдена (6+) в газовой фазе. Близки ли в них длины связей $\text{Mo}=\text{O}$ и валентные углы $\text{O}=\text{Mo}=\text{O}$? Molecular structures of gaseous dichloro- and dibromo(dioxo)molybdenum(VI). Are the $\text{Mo}=\text{O}$ bond distances and the $\text{O}=\text{Mo}=\text{O}$ bond angles similar? /Thomassen Hanne, Hedberg Kenneth //J. Mol. Struct. —1992. —273. —С. 197—206. —Англ.

Электроннографически повторно изучены молекулы MoO_2Cl_2 (I) и MoO_2Br_2 (II) с целью проверки найденных ранее различий в длинах связей $\text{Mo}=\text{O}$ и в валентном угле $\text{O}=\text{Mo}=\text{O}$, достигавших 0,027 Å и 10°, соотв. Для I и II соотв. получены след. геометрич. параметры (расстояния r_o , углы r_a): расстояния $\text{Mo}=\text{O}$ 1,686(4) и 1,683(6), $\text{M}-\text{X}$ 2,258(3) и 2,403(3) Å, валентные углы OMoO 106,3(26) и 107,8(39), XMoX 113,9(23) и 111,7(12)°, где $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$. На основании сравнения с предыдущими результатами сделан вывод о том, что ранее при исследовании II была допущена ошибка. На основании проведенного колебат. анализа инвертировано отнесение частот ν_2 и ν_3 в II.

В. С. Мاستрюков

М.П.



(11)

Х, 1993, N 15

MoO_2Cl_2

1992

117: 258687s Molecular structures of gaseous dichloro- and dibromo(dioxo)molybdenum(VI). Are the Mo-O bond distances and the O-Mo-O bond angles similar? Thomassen, Ilanne; Hedberg, Kenneth (Dep. Chem., Oregon State Univ., Corvallis, OR 97331 USA). *J. Mol. Struct.* 1992, 273, 197-206 (Eng). The mol. structures of dichloro- and dibromo(dioxo)molybdenum(VI), MoO_2Cl_2 and MoO_2Br_2 , were restudied by electron diffraction at nozzle-tip temps. of 100 and 170°, resp. The purpose was to check to results of 2 earlier studies in which significant differences in the values of the Mo-O bond distance and the O-Mo-O bond angle were reported. The values of each of these parameters are similar in the 2 compds. The results ($r_e(\text{\AA})$ and $\angle_e(\text{deg})$ with estd. 2R uncertainties), based on assumed C_{2v} mol. symmetry, are listed.

copy from
N. A. G. G. G.
H. G. G.

⑩ MoO_2Br_2

C. A. 1992, 117, N26

Mo O₂

Deeth R.F.

1993

Vi, структура,
мерные
характер-
(мер. паевн)

J. Phys. Chem. 1993,
97 (45), 11625-7.

(all. O₂ F₂; III)

MoO_2Cl_2

1995

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

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

(c.c. Tilly ; III)

Mo OCl₄

1996

7Б142. Электронная структура и свойства оксигалогенидов элементов VI группы / Ионов Г. В., Першина В. Г., Герасимова Г. А., Михалко В. К., Кострубов Ю. Н., Сураева Н. И. // Ж. неорган. химии. — 1996. — 41, № 5. — С. 802—803. — Рус.

Рассчитана электронная структура соединений элементов VI группы MOCl_4 ($\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$ и Sg) и проанализирована их термодинамическая устойчивость. Расчеты показали, что закономерность изменения прочности связи металл—лиганд вдоль группы зависит от типа лиганда. В то время как связь $\text{M}=\text{O}$ усиливается, связь $\text{M}-\text{Cl}$ ослабляется при переходе от $\text{W}-\text{Cl}$ к $\text{Sg}-\text{Cl}$. Это должно привести к термическому разложению SgOCl_4 и образованию SgOCl_3 , имеющего меньшую летучесть.

и.п.

① ☒



W OCl₄

X. 1997, N 7

MoO_2Cl_2

1996

Pershina V.,
Fricke B.

стабильн.,
электрох.
среда.

J. Phys. Chem. 1996,
100(21), 8748-57.

●
(ср. CrO_2Cl_2 ; III)