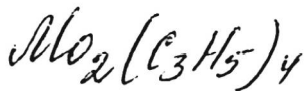
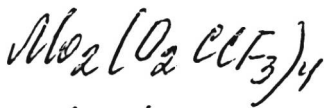


No-C-H



Commun 9354 / 1980



Berry M. et al



Chem. Phys. Lett.

γ ; gamma

1980, 70 (2), 350-52.

связь Mo-Mo.





1980

Bursten B.E., et al

расчет
м. строен.

J. Amer. Chem. Soc., 1980,
102, n 14, 4579-86.



$\text{Mo}(\eta\text{-C}_4\text{H}_6)_3$

1982

16 Б121. Фотоэлектронные спектры и теоретическое изучение трисбутадиеновых комплексов молибдена и вольфрама. Green J. C., Kelly M. R., Grebenik P. D., Briant C. E., McEvoy N. A., Mingos D. P. UV photoelectron spectral and theoretical studies on tris(butadiene)-molybdenum and -tungsten. «J. Organometal. Chem.», 1982, 228, № 3, 239—247 (англ.)

фотоэлектр.
спектр

Получены фотоэлектронные спектры $\text{Mo}(\eta\text{-C}_4\text{H}_6)_3$ (I) и $\text{W}(\eta\text{-C}_4\text{H}_6)_3$ (II). I и II получены соосаждением атомов металла и бутадиена из газ. фазы на охлажденную до -195°C подложку, очищены сублимацией. Анализ спектров проведен с использованием расчетов МО в приближении расширенного метода Хюккеля. Спектры и расчеты согласуются со значит. переносом электронной плотности с центрального атома металла на лиганды. Расчеты МО объясняют также, почему для I и II более выгодна геометрия тригон. призмы, чем октаэдрич. расположение лигандов вокруг металла.

⊗

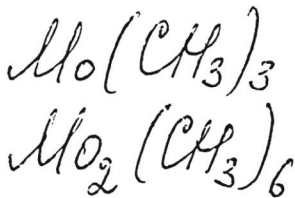
⊕

X. 1982, 19, N 16

Для I проведен рентгеноструктурный анализ. Кристалл I имеет гексагон. решетку; $a=b$ 7,264 А, c 11,904 А, $Z=2$. Для молекулы I найдены след. параметры: длины связей (А) Мо—С₁ 2,301, Мо—С₂ 2,317, С₁—С₂ 1,336, С₂—С₂ 1,560, где С₁ и С₂ — соотв. наружные и внутр. атомы углерода. Такое резкое различие в длинах центральной и боковых связей С—С необычно для бутадиеновых комплексов, в к-рых эти связи обычно выравнены. С привлечением данных расчета МО обсуждены возможные причины этого явления.

С. С. Букалов

1983



Ziegler Tom.

расчёт
теплоты,
структ.,
и.п., до;

J. Amer. Chem. Soc.,
1983, 105, N 26, 7543-
- 7549.

● (ср. CrH_3 ; III)

$\text{Mo}(\text{CH}_3)_3$

1983

Ziegler Tom.

теор. $\text{J. Am. Chem. Soc. 1983,$
расчёт. 105(26), 7543-9.

( Mo H_3 ; III)

MoCH_3 (DM-32942) 1989

MoCH_3^+ Bauschlicher Ch. W. (Jr),
Langhoff S. R., et al.,

at. n.,
meop.
pacrem J. Chem. Phys., 1989,
91, N4, 2399-2411.

1992

117: 258593h Ab initio CASSCF study of the electronic structure of the transition-metal alkylidene-like complexes Mo-M'H_2 ($\text{M}' = \text{carbon, silicon, germanium and tin}$). Marquez, Antonio; Fernandez Sanz, Javier (Fac. Quim., Univ. Sevilla, Sevilla, Spain E-41012). *J. Am. Chem. Soc.* 1992, 114(25), 10019-24 (Eng). A theor. investigation of the electronic structure of the high-valent, transition-metal, alkylidene-like complexes MoM'H_2 ($\text{M}' = \text{C, Si, Ge, and Sn}$) is reported. Based on ab initio calcns. carried out at the complete active space multiconfiguration SCF (CASSCF) level, the mol. structure of the ground state and some low-lying excited states have been detd. For $\text{M}' = \text{C, Si, and Ge}$, the ground state has C_{2v} symmetry (state $^3\text{B}_1$) and corresponds to pairing each electron of the M'H_2 triplet $^3\text{B}_1$ with an electron of Mo (^7S). In the case of MoSnH_2 , the lowest state is bent (C_s symmetry, state $^7\text{A}'$), the out-of-plane angle being 68° , and dissociates into SnH_2 ($^1\text{A}_1$) + Mo (^7S). Dissocn.

energies, potential energy profiles for the dissociation, harmonic constants in terms of internal symmetry coordinates, and vibrational frequencies are reported. The comparison of these properties with those of their pentacarbonylated homologous $(\text{CO})_5\text{M-M'H}_2$ complexes shows that the carbene-like (Fischer) type of complexation is stronger than the alkylidene-like one (Schrock).

Mo · CH₂

Октябрь. и
 химическое сообщ.
 СОСМ. - Спирит
 мур и сша
 Билл Косов,
 Уил. Косов, Проф.
 С.А. 1992, 117, N 26