

Coeg. No.

Mo-kommunecor

Adams D. M.

1963

Gebbie H. A. - Peacock R D

Nature, 1963, 199, № 4890, 278

Скрипты и ноты, составленные некоторыми
коммунистическими родителями Мо
и в детской музыкальной
школе

См. W-коммунистический, 14

1965

Mo-oxalate
Bond angles in the binuclear molybdenum(VI) complex anion $\text{MoO}_2(\text{C}_2\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})_2\text{O}^{-2}$. Jerry Donohue (Univ. of Southern California, Los Angeles). *Inorg. Chem.* 4(6), 921-2(1965)(Eng). The O—O distances assocd. with each of the O—Mo—O bond angles were calcd. There is a wide variation among the bond angles, but, with the exception of the constrained oxalate group, the O—O distances are rather similar. They av. 2.78 Å., a value equal, within exptl. error, to twice the van der Waals radius of 2.80 Å. The bond angles at the Mo atoms in the complex appear to be detd. almost entirely by the nonbonded O—O contacts within it. The use of the H-like sp^3 eigenfunctions in discussing the mol. geometrics in relatively light atoms, such as C, N, Si, and Ge, seems to be valid, while the use of H-like d^2sp^3 eigenfunctions for many-electron atoms apparently is not.

Hugh T. Harrison

C.A. 1965. 63. 6

6329 ef

Мо-комплексы

Beck W., 11966
Melnikoff A., Stahl R.

Chem. Ber., 99, n/2, 3721.

Спектроскопические исследования
мо-комплексом соединений
IX. Интенсивности валент-
ных колебаний в ИК-спектрах
СО и NO и валентный угол
в металлах карбониле и

- нитрофикация:

(соч. СО-)

1) 17 Б138. Фосфоресценция ${}^2E_g \rightarrow {}^4A_{2g}$ -комплексов трехвалентного молибдена. Schläfer. H. L., Gausmann H., Witzke H. Phosphorescence ${}^2E_g \rightarrow {}^4A_{2g}$ of molybdenum (III) complexes. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 21, № 2, 125—129 (англ.)

При $t = -185^\circ$ обнаружена слабая узкая полоса фосфоресценции 3 комплексов Mo^{3+} : $[\text{Mo}(\text{Urea})_3\text{Cl}_3]$, $[\text{Mo}(\text{Urea})_3\text{Br}_3]$, $[\text{Mo}(\text{Thiourea})_3\text{Cl}_3]$ при 9140, 9050 и 9200 см^{-1} соответственно. Излучение обнаружено только у 3 комплексов, по-видимому, в связи с недостаточной чувствительностью приемника излучения в этой области. Излучение аналогично излучению Cr^{3+} и соответствует запрещенному по спине переходу ${}^2E_g \rightarrow {}^4A_{2g}$.

Приведена схема нижних уровней Mo^{3+} (конфигурация $4d^3$) в поле октаэдрич. симметрии. В спектрах отражения наблюдаются полосы поглощения, соответствующие переходам ${}^4A_{2g} \rightarrow {}^4T_{2g}$ ($20\,400\text{--}21\,500\text{ см}^{-1}$), ${}^4A_{2g} \rightarrow {}^4T_{1g}$ ($25\,000\text{--}26\,700\text{ см}^{-1}$) и ${}^4A_{2g} \rightarrow {}^2T_{2g}$ ($14\,500\text{--}14\,900\text{ см}^{-1}$). Полоса поглощения ${}^4A_{2g} \rightarrow {}^2E_g$ не идентифицирована в связи с тем, что в этой же области ($8064\text{--}9523\text{ см}^{-1}$) расположены полосы лигандов.

С. С. Бокша

Соединения Мо (св-ва) 1967
обзор VII 3020

Васок Г. С.,
Kirk - Othmer. Encycl. chem.
Technol., 2nd. Ed., 1967, 13, 645-59
Molybdenum compounds.

CA, 1968, 68 N6, 26368e Б, М, Ю

1968

Cargill and Co

Cargill and Co

(Cargill)

31677e Infrared absorption spectra of molybdenum and tungsten compounds with bridging and isolated metal-oxygen bonding. Buslaev, Yu. A.; Davidovich, R. L. (Inst. Obshch. Neorg. Khim. im. Kurnakova, Moscow, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1968, 13(5), 1254-60 (Russ). The spectra of $K_2[MoO_2F_4] \cdot H_2O$, $Rb_2[MoO_2F_4]$, $Cs_2[MoO_2F_4]$, $KMoO_2F_3$, $RbMoO_2F_3$, $CsMoO_2F_3$, $K_3Mo_2O_4F_7$, $Rb_3Mo_2O_4F_7$, $Cs_3Mo_2O_4F_7$; and $K_{10}Mo_6O_{11}F_{24}$ exhibit 2 bands at $900-1000\text{ cm}^{-1}$ and 2-3 bands at $400-600\text{ cm}^{-1}$ assigned to MoO and MoF stretching modes, resp. The frequency of MoO stretching vibration is shifted towards lower frequencies as the outer-sphere cation is changed in the order $K \rightarrow Cs$. The presence of the bridging Mo-O-Mo groups in $K_2MoO_2F_3$ is ascertained by the appearance of a band at 735 cm^{-1} . The spectra of $K_2[WO_2F_4]$, $K_2[WO_2F_4] \cdot H_2O$, $Rb_2[WO_2F_4]$, $Cs_2[WO_2F_4]$, $Rb_3W_2O_4F_7$, $Cs_3W_2O_4F_7$, $Rb_{10}W_6O_{11}F_{24}$, $Cs_{10}W_6O_{11}F_{24}$, $KW_3O_9F \cdot 0.8H_2O$, $Rb_2W_3O_9F_2 \cdot H_2O$, and $CsW_3O_9F \cdot H_2O$, similarly to

+ 1968

C.A. 1968. 69. 8



those of the corresponding Mo compds., show 2 WO and 2-3 WF stretching bands at 900-1000 and 450-580 cm^{-1} , resp. The appearance of 2 MoO(WO) bands supports the nonlinear structure of MoO_2^{2+} and WO_2^{2+} groups. The band at $\sim 880 \text{ cm}^{-1}$ in the spectra of $\text{M}_3\text{W}_2\text{O}_4\text{F}_7$ and $\text{M}_{10}\text{W}_5\text{O}_{11}\text{F}_{24}$ ($\text{M} = \text{K}, \text{Rb}, \text{and Cs}$) indicates the formation of an addnl. WO bond which increases the coordination no. of W to 6. Also, the spectra of complex acid fluorides $\text{K}_2[\text{MoOF}_4] \cdot \text{KHF}_2$ and $\text{K}_2[\text{WO}_2\text{F}_4] \cdot \text{KHF}_2$ were investigated. The appearance of bands characteristic for HF_2^- and Mo(W)O bonds indicates that the complex fluorides are formed from K^+ , complex anion $[\text{Mo}(\text{W})\text{O}_2\text{F}_4]^{2-}$, and HF_2^- . The complex fluorides of W are easily hydrolyzed, the hydrolysis product consists of $\text{W}=\text{O}=\text{W}=\text{O}$ chains in which the WO bond order is increased.

A. K. Janowski

молибдаты;
вольфраматы (Vi) $M_2M'_2O_7$, $M_2M'_4O_{13}$, $M_2M'_3O_{10}$, $298 M' = Mo, W$.
Caillet P.; Saumagne P. $M = K, Na, Rb, Cs$ 1969

J. Mol. Struct. 1969, 4(5-6), 351-9

Infrared spectra of anhydrous alkali-metal polymolybdates and polytungstates between 4000 and 200 cm^{-1} .

10
~~608885~~

Ch 1970, 72, N12, 608885

Мо - соединен. 1976

Manojlovic - Muir

Mol. Struct. Diff.

молек.
соедин.

Methods 1976, 4, 207-28

(eng)

● (см в - соедин; III)

Mo
(исследования)

Mo₂(OH)₂

Электронная
структура

Ф. Н. Ч. 1942

4 Д141. Подробное электронное описание тройных связей между атомами переходных металлов и проверка при помощи фотоэлектронной спектроскопии. Cotton F. Albert, Stanley George G., Kalbacher Barbara J., Green Jennifer C., Seddon Elaine., Chisholm Malcolm H. Detailed electronic description of triple bonds between transition metal atoms and verification by photoelectron spectroscopy. «Proc. Nat. Acad. Sci. USA», 1977, 74, № 8, 3109—3113 (англ.)

Методом ССП $X\alpha$ —РВ рассчитана электронная структура соединений, содержащих тройную связь $Mo \equiv Mo : Mo_2X_6$, где $X = OH, NH_2$ и NMe_2 . Приведены контурные диаграммы распределения электронной плотности для МО, играющих наибольшую роль в образовании связи $Mo-Mo$. Потенциалы ионизации, рассчитанные по методу переходного состояния, сопоставляются с фотоэлектронными спектрами соединений указанного типа с лигандами $X = O(CH_3)_3CCH_2$ и $N(CH_3)_2$. Для учета различия лигандов в рассчитанных и экспериментально исследованных соединениях все потенциалы ионизации сдвинуты на одну и ту же величину порядка 1 эв. Обсуждается характер электронной связи $Mo-Mo$. Библ. 26. Е. П. Смирнов

Соединение Мо

1984

13 Б1148. Доказательство наличия димерных форм шестивалентного молибдена в кислых растворах методом КР спектроскопии. Raman spectroscopic evidence of dimeric molybdenum (VI) species in acidic solutions. Himeño Sada yuki, Hasegawa Masatomo. «Inorg. chim. acta», 1984, 83, № 1, L5—L6 (англ.)

Измерены спектры КР (Ar^+ лазер, 488 нм) р-ров, содержащих 0,5 М Мо (6+) (исх. $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) и различные к-ты (HNO_3 0,8—6 М, HClO_4 3 М, H_2SO_4 3 М, HCl 3 М и конц.). Сделан вывод, что основной Мо-содержащей частицей в этих р-рах является $\text{O}(\text{O})\text{—Mo—O—Mo—}(\text{O})\text{O}$, характеризующаяся след. полосами в КР-спектре: $\sim 950 \text{ см}^{-1}$, симм. вал. MoO_2 ; $\sim 918 \text{ см}^{-1}$, асимм. вал. MoO_2 ; $\sim 825 \text{ см}^{-1}$, асимм. вал. MoOMo ; $\sim 450 \text{ см}^{-1}$, симм. вал. MoOMo ; $\sim 370 \text{ см}^{-1}$, $\delta \text{ MoO}_2$. В солянокислых р-рах наблюдались полосы в области $\sim 300 \text{ см}^{-1}$, отнесенные к колебанию молибден—хлор. В спектре сильно солянокислого р-ра отсутствовали полосы фрагмента MoOMo . В. М. Ковба

X. 1984, 19, 113

Mo Cr (O₂CH)₄

1984

ab initio
parcm

101: 157961r The ground state of molybdenum tetraformatochromate (MoCr(O₂CH)₄) at the ab initio SCF and CI levels. A symmetry adapted RHF energy functional with an artificial double minimum. Wiest, Roland; Benard, Marc (Inst. Le Bel, Univ. Louis Pasteur, F-67000 Strasbourg, Fr.). *Theor. Chim. Acta* 1984, 66(1), 65-75 (Eng). Ab initio RHF calcns. carried out on the ground state of MoCr(O₂CH)₄ lead to 2 distinct energy min. according to the initial guess made for the set of trial vectors. These 2 symmetry-adapted wavefunctions can be correlated with a 2-fold degenerate broken-symmetry soln. previously characterized for the related system of higher symmetry Cr₂(O₂CH)₄. Complete CI expansions were carried out from either RHF polarized wavefunction using as a basis the set of 8 frontier MO's with high metal character. These expansions yield poorly resymmetrized wavefunctions. A similar CI expansion was carried out from a wavefunction resymmetrized at the SCF level and corresponding to a saddle point of the RHF energy hypersurface. The total energy assocd. with this latter expansion is the lowest obtained.

c.A. 1984, 101, N 18

$\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$

1984

2 Д132. Основное состояние $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$ на уровне ССП и КВ, Приведенный по симметрии ОХФ функционал с артефактным двойным минимумом. The ground state of $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$ at the ab initio SCF and CI levels. A symmetry adapted RHF energy functional with an artificial double minimum. Wiest Roland, Bernard Marc. «Theor. chim. acta», 1984, 66, № 1, 65—75 (англ.)

Путем сравнения с аналогичными расчетами комплекса, в котором Мо заменен на второй атом хрома и который обладает синглетной хартри-фоковской нестабильностью, связанной с понижением симметрии с D_{4h} до C_{4v} , интерпретированы два различных полученных с помощью процедуры ССП решения в $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$. Как и два не вполне симметричных вырожденных стабильных решения в гомометаллич. системе, оба найденные решения характеризуются локализацией d -электронов, отвечающих интерметаллич. связи на атомах металла: σ и δ -электронов на одном из них, π — на

рас. М. П.,

и;

фр 1985, 18, N 2.

втором; во втором решении — наоборот. В отличие от гомоядерной системы оба решения не противоречат симметрии и почти одинаковы по энергии. Решение с делокализацией d -электронов, получаемое фиксированием пространства заполненных d -орбиталей и самосогласованием остальных, по утверждению авторов, отвечает седловой точке на поверхности потенц. энергии. Полное КВ, проведенное на 8 d -орбиталях как первого, так и второго ССП-решения, понижает энергию на 0,13 и 0,17 а. е. соответственно, но не ведет к существенной делокализации. Однако аналогичное КВ на орбиталях делокализованного решения сохраняет делокализацию и ведет к дальнейшему понижению энергии на 0,035 а. е. Библ. 40. М. М. М.

$\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$

1984

3 Б1037. Основное состояние $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$, полученное на уровне неэмпирического метода самосогласованного поля (ССП) и конфигурационного взаимодействия (КВ). Адаптированный по симметрии функционал энергии ограниченного метода Хартри—Фока (ОХФ) с искусственным двойным минимумом. The ground state of $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$ at the ab initio SCF and CI levels. A symmetry adapted RHF energy functional with an artificial double minimum. Wiest Roland, Benard Marc. «Theor. chim. acta», 1984, 66, № 1, 65—75 (англ.)

О основ. состоян.,
расчет электрон-
структуры

Неэмпирический расчет электронного строения смешанного биядерного комплекса $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CH})_4$ (I) с четырьмя мостиковыми лигандами проведен методами ОХФ и КВ. Для расчета использован базис (15s10p8d/6s4p4d) сгруппированных гауссовых ф-ций Mo, (13s8p6d/5s3p3d) Cr, (9s5p/3s2p) C и O и (4s/2s) H и рентгеноструктурные данные для комплекса $\text{MoCr}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4$. Электронная плотность локализованных

X. 1985, 19, N3.

на атомах металла граничных орбиталей описывается в хартри-фоковском приближении конфигурацией $\sigma^2\pi^4\delta^2$. В зависимости от выбора начального приближения процедура ССП приводит к одному из двух минимумов. Соотв. этим минимумам волновые ф-ции описывают локализацию π -орбиталей связи М—М на одном из атомов М, а σ - и δ -орбиталей — на др. атоме. Симметризованная ф-ция отвечает седловой точке энергетич. гиперповерхности метода ОХФ, но вносит основной вклад в соотв. абс. минимуму энергии функцию, полученную с полным учетом КВ в пространстве восьми граничных МО. Ей отвечает электронная конфигурация $(\sigma)^{1,86} (\pi)^{3,58} (\delta)^{1,54} (\sigma^*)^{0,46} (\pi^*)^{0,42} (\delta^*)^{0,14}$.

О. Гриценко



Соединения Мо

1985

Minelli Martin,
Enemark John H.,
et al.

(обзор)

Coord. Chem. Rev.,
1985, 68, 169-278.

(см. Соедин. Cr; III)

1996

F: Mo(CO)₆-Kr

P: 3

14B1291. Инфракрасная лазерная спектроскопия в пучках димеров гексакарбониллов переходных металлов с инертными газами. Infrared laser jet spectroscopy of transition metal hexacarbonyl-rare gas dimers / Hansford G. M., Davies P. B. [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 21. - С. 8292-8300. - Англ.

Записаны ИК-спектры высокого разрешения девяти комплексов M(CO)[6]-Rg (M=Cr, Mo, W; Rg=Ar, Kr, Xe), образующихся в сверхзвуковых пучках соответствующего состава. Показано, что симметрия комплексов - C[3v]. Оценены геометрические параметры, в рамках модели диполь-индуцированный диполь обсуждены наблюдаемые сдвиги начала полос в области колебаний карбонильных групп. Библ. 33.



РМТХ 1997

1996

F: $Md(CO)_6 \cdot Ar$
P: 3

14B1291. Инфракрасная лазерная спектроскопия в пучках димеров гексакарбониллов переходных металлов с инертными газами. Infrared laser jet spectroscopy of transition metal hexacarbonyl-rare gas dimers / Hansford G. M., Davies P. B. [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 21. - С. 8292-8300. - Англ.

Записаны ИК-спектры высокого разрешения девяти комплексов $M(CO)_6-Rg$ ($M=Cr, Mo, W$; $Rg=Ar, Kr, Xe$), образующихся в сверхзвуковых пучках соответствующего состава. Показано, что симметрия комплексов - $C[3v]$. Оценены геометрические параметры, в рамках модели диполь-индуцированный диполь обсуждены наблюдаемые сдвиги начала полос в области колебаний карбонильных групп. Библ. 33.

РЖХ 1997

1996

F: Mo(CO)₆-Xe

P: 3

14B1291. Инфракрасная лазерная спектроскопия в пучках димеров гексакарбониллов переходных металлов с инертными газами. Infrared laser jet spectroscopy of transition metal hexacarbonyl-rare gas dimers / Hansford G. M., Davies P. B. [Journal of Chemical Physics] // J. Chem. Phys. - 1996. - 104, N 21. - С. 8292-8300. - Англ.

PMX 1997

Записаны ИК-спектры высокого разрешения девяти комплексов $M(CO)_6-Rg$ ($M=Cr, Mo, W$; $Rg=Ar, Kr, Xe$), образующихся в сверхзвуковых пучках соответствующего состава. Показано, что симметрия комплексов - C_{3v} . Оценены геометрические параметры, в рамках модели диполь-индуцированный диполь обсуждены наблюдаемые сдвиги начала полос в области колебаний карбонильных групп. Библ. 33.

No (CD)5CX

(om. 38876)

1996

X=O, S, Se

Attila Bérces,

гармон.
колебл.
частоты,
сил. пост.

J. Phys. Chem., 1996, 100,
16538 - 44.