

No Cl₄



MoCl₄

1967

24 Б34. Электронографическое исследование молекул тетрахлорида и тетрабромид молибдена. Спиридонов В. П., Романов Г. В. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1967, № 3, 118—119

Электронографическим методом проведено сектор-микрофотометрич. исследование строения молекул MoCl₄ и MoBr₄. Для получения молекул тетрагалогенидов в газовой фазе была использована р-ция диспропорционирования тригалогенидов молибдена, протекающая по схеме: $2\text{MoX}_3 (\text{тв.}) = \text{MoX}_2 (\text{тв.}) + \text{MoX}_4 (\text{газ.})$, где $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$. Найдено, что молекулы MoCl₄ и MoBr₄ имеют конфигурацию правильного тетраэдра и межъядерными расстояниями $r_g(\text{Mo}-\text{Cl}) = 2,23 \pm 0,02 \text{ \AA}$ и $r_g(\text{Mo}-\text{Br}) = 2,39 \pm 0,02 \text{ \AA}$.

Автореферат

Х. 1967. 24



1967

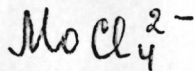
MoCl₄MoBr₄An. g. u. d. p.
c. p. g. u. d. p.

31045x Electron-diffraction study of molybdenum tetrachloride and molybdenum tetrabromide. Spiridonov, V. P.; Romanov, G. V. *Vestn. Mosk. Univ., Ser. II*, 1967, 22(3), 118-19 (Russ). The disproportionation reaction between MoCl₃ and MoBr₃ was used for obtaining electron diffraction patterns of the vapors of MoCl₄ and MoBr₄. The evaporator ampul was filled with the corresponding Mo trihalide and heated to 650-800°K. MoCl₄ and MoBr₄ have the configuration of a regular tetrahedron. The difference in the internuclear distances $r(\text{Mo}-\text{Br})-r(\text{Mo}-\text{Cl})$ is 0.16 Å., which agrees well with empirical data. The presence of 2d electrons in the valence shells of both Mo compds. could cause a Jahn-Teller distortion of the sym. structure. The regular tetrahedral structure shows that the Jahn-Teller effect is either absent or does not affect the structure detd. by the electron-diffraction method. L. Holl

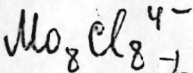
1.1.1.1.1.1.

C.A. 1968. 69.8





1973



164340x Electronic structure of the molybdenum-chloride ($\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$) metal cluster. Zacheslavskaya, R. Kh.; Korol'kov, D. V. (Leningr. Gos. Univ., Leningrad, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1973, 9(1), 21-6 (Russ). The electron d. distribution, bond orders, and bond energies of MoCl_2^{2-} and $\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$ clusters were calcd. by the extended Hückel MO method with the full valence basis using single exponential Slater AO's with optimized orbital exponents; 5s, 5p, 4d or 3s, 3p AO's of Mo or Cl were used in the calcs. Upper occupied MO's of $\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$ are of the metallic type and they are formed mostly by Mo 4d AO's. The Mo-Mo bond in $\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$ is quadruple and of a ($\sigma + \pi_1 + \pi_2 + \delta$) type. Two unoccupied MO's of Mo in $\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$ take part in the formation of 2 donor-acceptor MoO σ bonds in the lattice of $\text{K}_4\text{Mo}_2\text{Cl}_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. The energy of the Mo-Mo interaction in $\text{Mo}_2\text{Cl}_8^{4-}$ was calcd. as 12.90 eV.

Karel A. Hlavaty

Do
(Mo-Mo)

рацен

C. A. 1973, 78 v 26

Мо Сү

1980

Харитоков Г.О. А.
и др.

корреляция
между др.
связи и сел.
нось.

Корреляция. Религия
1980, 6, №11, 1672-76

Сел. HF Fy-II

Мол4

1986

Электрон-
спектры,
эксперим.
и теорет.
исследов.,
энергии

и
силы
осцилляторов

Компьютерное исследование
периодических св-в
с молекулярных посто-
янных (заключитель-
ный отчет), ИГУ,
Иркутск, 1986, стр.

32-36.

32-36

1989

10 Б1071. Электронная структура, спектры и систе-

матика возбужденных электронных состояний молекул MoCl_4 и MoBr_4 / Ковба В. М., Поляков В. И., Тополь И. А., Гельфер М. Я. // Теор. и эксперим. химия. — 1989. — 25, № 5. — С. 606—610. — Рус.

В спин-неограниченном, спин-ограниченном и квазирелятивистском вариантах метода $\text{ССП}-X_\alpha\text{-РВ}$ рассчитана электронная структура молекул MoCl_4 , MoBr_4 и CrCl_4 (конфигурация основного электронного состояния — $\dots e^2, X^3A_2$). В приближении переходного состояния вычислены энергии и силы осцилляторов одноэлектронных переходов молекул MoCl_4 и MoBr_4 . Рассчитанные электронные спектры поглощения в видимой и УФ-обл. качественно согласуются с измеренными экспериментально (молекулы MoX_4 (газ.) получались в результате диспропорционирования MoX_3 (тв.) при нагревании непосредственно в оптич. ячейке с отроостком). В случае MoBr_4 синтетич. спектр сдвинут на $\sim 1,2$ ЭВ в обл. больших энергий. Рассчитаны энергии нижних возбужденных электронных состояний молекул, связанных с конфигурациями $\dots e^2$ и $\dots et_2$: 3T_2 (конфигурация $\dots et_2$), $^1E(e^2)$, $^3T_1(et_2)$, $^1T_2(et_2)$, $^1T_1(et_2)$, $^1A_1(e^2)$: CrCl_4 — 0,84; 1,65; 1,89; 2,36; 2,62; 3,29; MoCl_4 — 1,05; 1,20; 1,76; 2,22; 2,30; 2,40; MoBr_4 — 0,94; 1,14; 1,61; 2,04; 2,14; 2,27 эВ.

В. М. Ковба

Мо Cl₄спектры,
структура

Р.М.Х. N10, 13

от 32.7.89

MoCl₄

(Om 32719)

1989

/ 112: 44681h Electronic structure, spectra and systematics of the excited electronic states of molybdenum tetrachloride and molybdenum tetrabromide molecules. Kovba, V. M.; Polyakov, V. I.; Topol, I. A.; Gel'fer, M. Ya. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1989, 25(5), 606-10 (Russ). In the visible and UV regions, the absorption spectra were measured of gaseous MoCl₄ and MoBr₄. The method of SSP-X_α-RV was used to calc. the electronic structure, the spectra, and the system of primary excited electronic states of the mols. The results are compared with literature data on mols. of CrCl₄ and CrBr₄.

чекмрт,

чекмрт-чекмрт.

(H) MoBr₄

c.A. 1990, 112, n 6