

Mo-H

МОН

1972

Мастрюков В.С.

У

Ж. структ. химии,
1972, 13, № 3, 379-383.

● (См. ССН.) III

MoH

1977

Preston H. J. T., et al

Y; Ae

J. Quantum Chem.,
1977, 12(3), 471-84

(see - Mo; III)

Mo H6

1978

Pyykkö P, et al

recessus
auris

Chem. Phys, 1978, 34,
N2, 261-80.

см. С Н 4 - III

MoH-

1948

Rosmus M., Meyer W.

J. Chem. Phys., 1948, 62, 26,
2445-2451.

расчет
номеров
кривых

●
(see. LiH^- ; III)

Mo_2H_6

Lomica 9744

1980

Hall M.B.

μ_{acrf}

E; D₀;

μ_{acrf}

ch₂ Mo≡Mo.

μ_{acrf}

J. Amer. Chem. Soc., 1980,
102, (6), 2104-2106.

Bond Energy and
Conformation of the ...

Мотт6

[Ommuck 12599] 1981

geomep.

Rykkö P., et al.,
Chem. Phys. Lett. 1981,
83, N 3, 432.



Mo₂ H₆

1982

Hall Michael B.

кв. ссх.
расчеты,
обзор.

Electron Distrib. Chem.
Bond, [Proc. Symp.]
1981 (Pub 1982), 205-20.

(сск. B₂ H₆ ; III)

Mo₂H₆

Om. 16855

1983

98: 95975g Electronic structure and dissociation energy of the molybdenum-to-molybdenum triple bond. Kok, Randall A.; Hall, M. B. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *Inorg. Chem.* 1983, 22(5), 728-34 (Eng). Generalized MO (GMO) and CI calcns. are reported for the series N₂, P₂, As₂, Sb₂, and Mo₂H₆ in a large Gaussian basis set. Similar calcns. are reported for Mo₂H₆ and Mo₂(NH₂)₆ in a smaller Gaussian basis set. The potential energy curve for Mo₂H₆ at the GMO-CI level has a min. at 2.194 Å in excellent agreement with the Mo-Mo distance in a range of systems: Mo₂(OCH₂CMe₃)₆ at 2.222 Å, Mo₂(NMe₂)₆ at 2.214 Å, and Mo(CH₂SiMe₂)₆ at 2.167 Å. By comparing the calcd. dissocn. energies of the triply bonded diatomics and Mo₂H₆, a dissocn. energy of 284 kJ/mol is predicted for the Mo-Mo triple bond. The results indicate the importance of including the differential correlation energy, which in Mo₂H₆ contributes 70 kJ/mol to the dissocn. energy. The larger basis set increases the calcd. dissocn. energy by 40 kJ/mol. Changing the hydride ligand of Mo₂H₆ to an amino ligand in Mo₂(NH₂)₆, increases the dissocn. energy by 117 kJ/mol. A significant fraction of this increase is due to the π -donating ability of the NH₂ ligand, which results in an expansion of the Mo orbitals and a stronger bond. The relationship between the donor strength of the ligand and the expansion of the Mo orbitals may be responsible for much of the variation in the Mo-Mo triple-bond lengths.

neop.
racem

44

C.A. 1983, 28, N12

Sb_2, N_2, P_2, As_2

MoH₃

1983

100: 12884n Theoretical study of the triple metal bond in d³-d³ binuclear complexes of chromium, molybdenum, tungsten by the Hartree-Fock-Slater transition state method. Ziegler, Tom (Dep. Chem., Univ. Calgary, Calgary, AB Can. T2N 1N4). *J. Am. Chem. Soc.* 1983, 105(26), 7543-9 (Eng). Hartree-Fock-Slater (HFS) calcs. are reported for the metal fragments MoL₃ and CrL₃ (L = H, CH₃, Cl, NH₂, and OH). The ML₃ systems all have a trigonal planar geometry with the metal-to-ligand bond strength in the order OH > Cl > NH₂ > CH₃ > H. The bonding energies of MoL₃ are somewhat larger than the corresponding energies of CrL₃. HFS calcs. are also reported for the Mo₂L₆ and Cr₂L₆ systems. The staggered conformation is the preferred geometry for all the systems. The optimized metal-metal bond distances are in the range 2.22 to 2.25 Å for the Mo systems and 1.91-1.95 Å for the Cr systems. The strength of the metal-metal bonds follows the order Mo-Mo (468-414 kJ/mol) > Cr-Cr (301-217 kJ/mol). A study of W₂H₆ showed that the inclusion of relativistic effects increased the metal-metal bond energy from 422 to 535 kJ/mol.

moop. paper

2

100
79

C.A. 1984, 100, 12

Mo₂ H₆

1984

1) 15 Б1053. Конформационная предпочтительность в комплексах Mo₂L₆. Conformational preferences in Mo₂L₆ complexes. Dobbs Kerwin D., Francl Michelle M., Hehre Warren J. «Inorg. Chem.», 1984, 23, № 1, с. 24—26 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе ОСТ-3 ГФ проведен расчет электронного строения и равновесной геометрии биядерных комплексов молибдена типа Mo₂L₆, L=H (I), F (II), H₂O (III). Рассчитаны равновесные длины связей Mo—Mo (R_e): I—R_e=2,134 А, II—R_e=2,235 А, III—R_e=2,258 А. Укоро-

геометрия,
структура

(+2) ☒

Mo₂F₆, Mo₂(H₂O)₆

х. 1984, 19, № 15

чение связи Mo—Mo при переходе от III и II к I объяснено усилением π -связывания Mo—Mo . Конформации I и II с шахматным взаимным расположением групп MoL_3 , устойчивее заслоненных конформаций. Расчитанный барьер вращения группы MoL_3 вокруг связи Mo—Mo в случае I составляет 7,6 ккал/моль, а в случае II—1,0 ккал/моль. В случае III заслоненная конформация на 0,5 ккал/моль устойчивее шахматной. Анализ корреляц. диаграмм и карт электронной плотности показал, что барьер вращения в I обусловлен отталкивательным взаимодействием орбиталей ковалентных связей Mo—H , тогда как соответствующие орбитали II и III более локализованы на атомах F и O.

О. Гриценко

MoH(17)

(Om. 21908)
(Om. 22190)

1985

Sallans L., Lane K.R.,
Squire R.R., Freiser B.S.,

Do J. Amer. Chem. Soc., 1985, 107, N15,
4379-4385.

Generation and Reactions of Atomic Metal Anions in the Gas Phase. Determination of

the Heterolytic and Homolytic
Bond Energies for. VH , CrH , FeH ,
 CoH and NiH .

Mohr (2)

[M. 22 261, A¹]

1985

Squires R. R.,

J. Amer. Chem. Soc., 1985,

107, N 15, 4385-4390.

No

MoH

1986

Elkind J. I.,
Armentrout P. B.

No; Inorg. Chem., 1986, 25,
N 8, 1078-1080.

(cer.  ScH⁺; III)

Mo₂H₆

1986

/ 106: 56213w Multiple metal-metal and metal-carbon bonds. Hall, Michael B. (Dep. Chem., Texas A and M University, College Station, TX 77843 USA). NATO ASI Ser., Ser. C 1986, 176 (Quantum Chem.: Challenge Transition Met. Coord. Chem.), 391-401 (Eng). Ab initio, generalized MO, CI calcns. are reported for Cr-Cr quadruple bonds, for Mo-Mo triple bonds, and for Nb-C and Mo-C double bonds. The results for the potential energy curves of Cr-Cr quadruple bonds suggest that the nature of the bridging ligand is a major factor in detg. the Cr-Cr bond distance. The predicted disocn. energy of the model Mo triple bond mol., Mo₂H₆, is 284 kJ mol⁻¹. This value is at the lower range of the possible exptl. values. The difference in the chem. and bonding between the Fischer-type carbene, Mo(CO)₅(C(OH)H), and the Schrock-type carbene, Nb(η⁵-C₅H₅)Cl₂(CH₂), arise from the nature of the metal fragments. The Mo(CO)₅ fragment with ligand stabilized π orbitals causes the carbene to be electrophilic. The pivoting of the methylene in the electron deficient Nb complex is examd. and involves both a rotation of the Nb-C bond and a direct Nb-H interaction.

Do, meopen.
(pacem)

c.A. 1987, 106, n8

MoH(2)

(OM-25129)

1986

Tolbert M.A., Beauchamp
J. L.,

Do

J. Phys. Chem., 1986,
90, N21, 5015-5022.

МОН

(М. 26591)

1987

Langhoff S. R., Pettersson
L. G. et al.,

М.П.Муж-
них электр.
состояний,
теорет.
расчет

J. Chem. Phys., 1987,
86, n1, 268-278.

MoH_2^+

(OM-27681)

1987

Schilling J. B., Goddard
W. A., et al.

геометр.,
электрон.
структ.,
теорет.
расчет.

J. Phys. Chem., 1987,
91, N 17, 4470 - 4476.

MoH⁺

[OM. 27787]

1987

Schilling J.B., Gooddard
W.A. III, et al.,

meopem.
pacrem

J. Amer. Chem. Soc.,
1987, 109, N19, 5565-73.



MoH_2^+

PM. 841571

1989

Das K.K., Balasubrama-
nian K.

поверх.
поверхн.

J. Chem. Phys., 1989,
91, N 10, 6254-6268.

MoH_2^+

1989

Das Kalyan K.,
Balasubramanian K.

ser. n. J. Chem. Phys. 1989. 91,
N10, C. 6254-6268.

( NbH_2^+ ; iii)

MoH6

(OM 33964)

1990

Anderson W.P.,
Candori T.R. et al.

рецепт.
печень.

Inorg. Chem. 1990,
29, N 1, 1-3.

X. 1990, N 6.

MoH
MoH⁺

М.Н.

Х. 1990, № 21

DM 34108 1990
7 21 Б1037. Спектроскопические свойства и потенциальные кривые MoH и MoH⁺. Spectroscopic properties and potential energy curves of MoH and MoH⁺ / Balasubramanian K., Li Jungqing // J. Phys. Chem.— 1990.— 94, № 11.— С. 4415—4419.— Англ.

В базисе гауссовых ф-ций (3s3p4d) для Mo и (3s1p) для H (внутренние оболочки Mo описывались в приближении эффективного релятивистского основного потенциала) методами многоконфигурац. ССП и конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями рассчитаны потенциальные кривые и спектроскопич. постоянные девяти низколежащих состояний MoH и семи состояний MoH⁺. Основные состояния MoH и MoH⁺ имеют симметрию ⁶Σ⁺ и ⁵Σ⁺ соотв. Для всех состояний найдены зависимости дипольного момента от межъядерного расстояния и проведен анализ заселенностей по Малликену. На основании этих данных сделаны качеств. заключения о характере связи в изученных системах.

А. А. Бучаченков

Moh

[om. 35966]

1990

Balasubramanian K.,

et al. J. Chem. Phys. 1990, 93,
N11, 8061-8072.

The low-lying states of the second-row transition metal hydrides
(YH-CdH).

MoH
MoH⁺

(Am 34108)

1990

Ti, xv. Mex.
p. 112

112: 240711g Spectroscopic properties and potential energy curves of molybdenum hydrides (MoH and MoH⁺). Balasubramanian, K.; Li, Jungeing (Dep. Chem., Arizona State Univ., Tempe, AZ 85287-1604 USA). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(11), 4415-19 (Eng). Complete active space SCF followed by multireference singles plus doubles CI (MRSDCI) calcs. are carried out on nine low-lying electronic states of MoH and seven electronic states of MoH⁺. The entire potential energy curves of these states were obtained by using the CASSCF/MRSDCI method. In addn., the spin-orbit coupling is introduced for the ground states of MoH and MoH⁺. Many spectroscopic transitions in the 12000-20000-cm⁻¹ region for MoH and 7000-22000-cm⁻¹ region for MoH⁺ are predicted which are yet to be obsd. Dipole moment curves for the low-lying states of MoH as a function of internuclear distance are constructed. Mulliken population analyses of all the electronic states investigated are carried out.

C.A. 1990, 112, N26

MOH

1990

Balasubramanian K.

u. n.,
meop.
pacum

J. Chem. Phys. 1990,
93 (11), 8061-72.

(c.c. ● YH; III)

MoH_2

1994

Siegbahn Per E. M.

ситабильн.

Theor. Chim. Acta

и ееружий.

1994, 87 (6),

теор. расет

441-52.



(see. YH_2 ; III)

Молз

(OM 40608)

2000

стр-ра,
комбат.
гиданка,
as Intro
расет

Nikolai B. Balabanov,
et al.,

г. физ. Chem.
2000, A104, 7370-
74