

Mo-C-S, Se,

Te, Po

CS₂MoS₄

ВФ - 3950 - VII

1967

21 Б118. Электронные спектры поглощения тиомолибдат- и тиовольфраматионов. Сравнительное качественное рассмотрение природы связи в тетраоксо- и тетратиоанионах молибдена и вольфрама. Müller A., Rittner W., Nagarajan G. Die Elektronenabsorptionsspektren des Thiomolybdat- und Thiowolframations. Vergleichende qualitative Betrachtung der Bindungsverhältnisse in den Tetraxo- und Tetrathioanionen des Molybdäns und Wolframs «Z. phys. Chem.» (BRD), 1967, 54, № 5—6, 229—236 (нем.)

(см (μм)

x · 1967 · 21

Получены электронные спектры поглощения CS_2MoS_4 и CS_2WS_4 в области 800—220 мк. Рассмотрены электронные спектры анионов типа $[XY_4]^{2-}$, где $X=\text{Mo}, \text{W}; Y=\text{O}, \text{S}$ (симметрия T_d). К переходу типа $t_1 \rightarrow 2e (A \rightarrow ^1T_2)$ отнесены частоты $43\ 200 \text{ см}^{-1}$ у MoO_4^{2-} , $21\ 400 \text{ см}^{-1}$ ($\epsilon_{\text{макс}} = 1,3 \cdot 10^4$) у MoS_4^{2-} , $50\ 300 \text{ см}^{-1}$ у WO_4^{2-} и $25\ 500 \text{ см}^{-1}$ ($\epsilon_{\text{макс}} = 1,85 \cdot 10^4$) у WS_4^{2-} . К переходу типа $2t_2 \rightarrow 2l$ или $t_1 \rightarrow 3t_2 (A \rightarrow ^1T_2)$ отнесены частоты $48\ 000 \text{ см}^{-1}$ у MoO_4^{2-} , $31\ 500 \text{ см}^{-1}$ ($\epsilon_{\text{макс}} = 1,8 \cdot 10^4$) у MoS_4^{2-} и $36\ 100 \text{ см}^{-1}$ ($\epsilon_{\text{макс}} = 2,85 \cdot 10^4$) у WS_4^{2-} . Кроме этого, обнаружены полосы при $41\ 300 \text{ см}^{-1}$ ($\epsilon_{\text{макс}} = 2,95 \cdot 10^4$) в спектре MoO_4^{2-} и $\approx 45\ 000 \text{ см}^{-1}$ ($\epsilon_{\text{макс}} \approx 3,65 \cdot 10^4$) в спектре WS_4^{2-} , отнесение к-рых не сделано. Частоты электронных переходов у MoO_4^{2-} взяты из литературы. Обсуждена природа связи в этих соединениях на основании проделанных ранее квантово-хим. расчетов. Валентные силовые постоянные найдены равными $f_{\text{MoS}}=3,18$ и $f_{\text{ws}}=3,58 \text{ майн/А}$.

А. Я. Фридман

CS₂MoS₄

валентн.

силовые

постоянн.

11 Д323. Электронные спектры поглощения тиомолибдат- и тиовольфраматионов. Сравнительное качественное рассмотрение природы связи в тетраоксо- и тетратиоанионах молибдена и вольфрама. Muller A., Rittner W., Nagarajan G. Die Elektronenabsorptionsspektren des Thiomolybdat- und Thiowolframations. Vergleichende qualitative Betrachtung der Bindungsverhältnisse in den Tetraoxo- und Tetrathioanionen des Molybdäns und Wolframs. «Z. phys. Chem.» (BRD), 1967, 54, № 5—6, 229—236 (нем.)

Получены электронные спектры поглощения CS_2MoS_4 и CS_2WS_4 в области 800—220 мк. Обсуждена природа связи в этих соединениях на основании проделанных ранее квантовохимич. расчетов. Валентные силовые постоянные оказались равными $f_{\text{MoS}} = 3,18$ и $f_{\text{WS}} = 3,58$ мдн/Å.

А. Я. Фридман

99. 1967. 112

87

51031.3458

Библиотека

1975

Ch, TC

 $\text{MoO}(\text{S}_2)(\text{S}_2\text{CNPr}_2)_2$ 43-10503

Dirand-Jocelyne, Ricard Louis, Weiss Raymond. The reaction of $\text{MoO}_2(\text{S}_2\text{CNPr})_2$ and H_2S : preparation and molecular structure of a new disulfur complex: $\text{MoO}(\text{S}_2)(\text{S}_2\text{CNPr}_2)_2$. "Inorg. and Nucl. Chem. Lett.", 1975, 11, N 10, 661-664 (англ.)

450 454

3

0486 пик

ВИНИТИ

No-C-O-X

1980.

X = Xanthocorozig Englisch et al.

(vi)

Diss. Abstr. Zut.

1980, B41 (3), 949.



(cont. Cr-C-Xanthocor.; III)

Moll. Si (CN)₂ (Ottliek 15792)

1982

Delgado M., Alguacil F.,
et al.,

Chemie
Z. anorg. und allg. Chem.,
1982, 493, N 10, 187 - 192.



1982

9Д146. Исследование связей металл—металл в анионе $[\text{Mo}_2\text{S}_2(\text{CN})_8]^{6-}$. Studies on metal—metal bonds in the $[\text{Mo}_2\text{S}_2(\text{CN})_8]^{6-}$ anion. Szterenberg Ludmila, Jeżowska-Trzebiatowska Bogusława. «Bull. Acad. pol. sci. Sér. sci. chim.», 1981 (1982), 29, № 3—4, 219—224 (англ.; рез. рус.).

Электронное строение комплексного иона $[\text{Mo}_2\text{S}_2(\text{CN})_8]^{6-}$ изучено приближенным методом МО ЛКАО ССП Фенске—Холла. Расчеты проводились при эксперим. значениях геометрич. параметров в базисе хартри-фоковских орбиталей свободных атомов и атомных ионов. Установлено, что комплекс является диамагнитным, т. к. основное состояние синглетно (1A_g) и энергетич. разность между нижней виртуальной и верхней занятой МО велика (1,43 эВ). Центральную структуру комплекса образует цикл Mo_2S_2 с сильными связями Mo—S. Между атомами металла существует формально трехкратная связь ($\sigma^2 \pi^2 \delta^2$), причем δ -компоненты являются очень слабой. Атомы S практически не связаны между собой.

А. В. Зайцевский

расчет
структур.

оф. 1982, 18, № 9



1982

У17 Б60. Исследование связей металл-металл в анионе $[Mo_2S_2(CN)_8]^{6-}$. Szterenberg Ludmila, Jeżowska-Trzebiatowska Bogusława. Studies on metal-metal bonds in the $[Mo_2S_2(CN)_8]^{6-}$ anion. «Bull. Acad. pol. sci. Sér. sci. chim.», 1981(1982), 29, № 3—4, 219—224 (англ.; рез. рус.)

Приближенным неэмпирич. методом ССП МО Фенске—Холла проведены расчеты электронного строения аниона $[Mo_2S_2(CN)_8]^{6-}$ (I). Полученные результаты использованы для анализа природы связи Mo—Mo в этом соединении. I найден диамагнитным с основным синглетным состоянием 1A_g . А. Багатурьянц

Электронные
строение

X. 1982, 19, N 17.

MoCS

1994

Jeung Gwang-Hi.

meop.
paerem
eupykm.,
V1

Chem. Phys. Lett.

1994, 221 (3-4), 237 -
- 240.

(Cer. YCO; III)

No (CO)_n Cl (M. 37955)

1955
1995

Dapprich S., Pidken H.,
et al.,

neop.
paner Chem. Phys. Lett.,
1995, 242, 521-526

$\text{Mo}(\text{CO})_5\text{C}_5$

(OM-38478,Q")

1996

$\text{Mo}(\text{CO})_5\text{C}_8$

Attila Béres,

ZAPKOVÉ,
KONÍČAT.
JACOBIC,
CLIV.
NOCM.

J. Phys. Chem., 1996, 100,
16538-16544.