

Fe-S

1965

A-678

$$\text{Vi}(\text{MSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}, \quad \text{M}=\text{Ni}, \text{Mg}, \text{Co}, \text{Zn}, \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Cu})$$

$$\text{M}'\text{SeO}_4, \quad \text{M}=\text{Co}, \text{Zn})$$

Oswald H.R.

Helv.chim.acta, 1965, 48, N3, 600-08

Über die Bindung der Wassermolekül in den Verbindungen $\text{MeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ und $\text{MSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$. 11

Infrarotspektroskopische und kernmagnetische
Resonanz-Unter-Suchungen (M=Mg, Ni, Cu, Co, Fe,
Zn, Mn) .

PJX, 1967, 10 177

J.

есть ср.к

1968

He-S-содЧаркин О.П.,
Деткина Л.Е.He-S-OHe-S-HalМ. Структ. Химии,
1968, 9, № 4, 675,

Рассматриваются строение
ион. ионов типа MX_2^+ , MY_2^+ , $MX'X^+$,
 $MX'Y^+$, MY_3^+ , $MYX'X^+$, $MX'X''X'''X^+$, $MY'Y'^+$,
 $MX'Y^+$, где $X =$  Cl, Br, I, Y, Si, Z , а
 $Y = O, S, Se, ...$ (См. В-Нал) III

$\text{Fe}(\text{OH})\text{SO}_4$

Shokarev M.M.
et. al.

1972

(vi)

"Zh. Neorg. Khim."
1972, 17(9), 2474-9.

● $\text{Cu} \cdot \text{FeOOH}$; III

Fe_2S_6

1973

17 Б14. О геометрии и электронных свойствах центра Fe—S ферредоксинов с двумя атомами железа. Hagaman J. A., Shupack S. I. On the geometry and electronic properties of the Fe—S site of the two-iron ferredoxins. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 19, № 2, 195—196 (англ.)

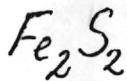
Геометр.

В рамках расширенного метода Хюккеля с самосогла-
сованием зарядов и конфигураций рассчитаны волно-

Х. 1973 N 17

X
org

вые функции основных состояний конформеров активного центра Fe_2S_6 окисленной формы ферредоксина, где каждый атом Fe приблизительно тетраэдрически окружен атомами S (двумя цистеиновыми S_c и двумя мостиковыми S_b). Четыре цистеиновых остатка учтены добавлением к модели двух электронов (0,5 электрона на остаток). Геометрич. вариации включали расстояния Fe—Fe и S_b — S_b , а также валентные углы S_cFeS_c в пределах общей симметрии D_{2h} центра Fe_2S_6 . Полученные волновые функции использованы для расчета тензора градиента поля, откуда определены квадрупольное расщепление и параметр асимметрии. Опытные значения этих величин, найденные из мессбауэровских спектров, служили критерием для выбора «лучшей» геометрии центра, именно $R(\text{Fe—Fe})=2,9$ А, $R(\text{S}_b\text{—S}_b)=3,0$ А, угол S_cFeS_c 90° ; все длины связей 2,1—2,2 А, угол $\text{S}_b\text{FeS}_b \sim 90^\circ$. Эта геометрия совершенно отлична от рассчитанной ранее (РЖХим, 1972, 11Б36; 1973, 1Б26) сходным методом, где критерием «лучшей» геометрии служил, однако, минимум полной энергии конформера. Приведены аргументы в пользу большей разумности результатов данного расчета. Е. Шусторович



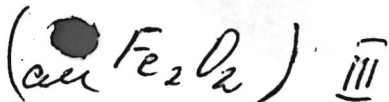
Leibovici Claude

1973

"J. Mol. Struct."

1973, 16, №1, 158-160.

геометр.



1974

 SO_2Fe_2 (конденс.)

19 Б247. Колебательные спектры SO_2Fe_2 в конденсированных фазах. Nolin C., Tremblay J., Savoie R. Vibrational spectra of SO_2F_2 in the condensed states. «J. Raman Spectrosc.», 1974, 2, № 1, 71—79 (англ., рез. франц.)

(Di)

Получены спектр КР жидк. SO_2F_2 при 150°K , ИК-спектр метастабильной тв. фазы при 77°K и ИК- и КР-спектры двух тв. фаз при 77 и 10°K . Фаза I наиболее устойчива, но редко образуется непосредственно при охлаждении жидк. фазы. Фазы I и II имеют высокую упорядоченность, но весьма сложны. Кристаллы, вероятно, центросимметричны и содержат по крайней мере 8 молекул в элементарной ячейке в общих положениях. Кристаллы относятся к триклинной или моноклинной системе. Данные исключают возможность кубич. симметрии для фазы II. В области 545 см^{-1} обнаружено 3 полосы, отнесенных к основным кол. O_2F_2 : двум маятниковым кол. и деф. кол. OSO .

А. П. Курбакова

X. 1974
N 19

S-Fe

OFF. 4824

1975

(Do)

Kerr J. A., et al.

Handbook Chem. Phys.;
55th Ed., 1974-75.

FeS₆¹⁰⁻

omnium 5570

1977

Tossell J. A.

Микро-
Спектр.

Fe-S
распад.

J. Chem. Phys.

1977, 66, 1412,

5712 - ~~5712~~ 5719

FeS_4^{5-}

1980

4 Б44. Электронное строение и сверхтонкие взаимодействия в тетраэдрических дитиоферратах (III) щелочных металлов, рассчитанные методом рассеянных волн. Taft C. A., Braga M. Electronic structure and hyperfine interactions in tetrahedral alkali-dithioferrates (III) as calculated by the multiple-scattering method. «Phys. Rev. B: Condens. Matter», 1980, 21, № 12, 5802—5807 (англ.)

электрон.
строение

Методом ССП— X_α рассеянных волн в модели касающихся атомных сфер в спин-неограниченном приближении рассчитано электронное строение кластера FeS_4^{5-} , моделирующего дитиоферраты щел. металлов KFeS_2 , RbFeS_2 и CsFeS_2 . Энергии оптич. переходов, определенные по разностям орбитальных энергий в основном состоянии, хорошо согласуются с эксперим. энергиями оптич. переходов в KFeS_2 . Величина ферми-контактного взаимодействия на ядре Fe в кластере, вычисленная по разностям спиновых плотностей на ядре Fe, равная —250 кГц, согласуется с эксперим. величиной



р. 1981/14

215 кГц в KFeS_2 . Сильное уменьшение величины ферми-контактного взаимодействия в кластере по сравнению со свободным ионом Fe^{3+} (-783 кГц) объяснено изменением заселенностей $3d$ - и $4s$ -орбиталей Fe в кластере. Заселенность $4s$ -МО в кластере составила 45% и согласуется с величиной 35%, полученной по данным измерений мессбауэровских спектров в KFeS_2 . Величина эффективного заряда атома Fe в кластере $+1,2$ также согласуется с оценками (1,5—1,6) по данным мессбауэровских спектров.

Уменьшение числа неспаренных $3d$ -электронов от 5 в ионе Fe^{3+} до 3,77 в кластере хорошо согласуется с оценкой 3,83, полученной из анализа данных по измерению магнитной восприимчивости в KFeS_2 .

И. А. Тополь

$\text{FeO}_3 \text{ S}_3$

1982

Ahn Sangwoon, Park
Eui Suk., et al.

теорет.
расчет
гип. мом.

Bull. Korean Chem.
Soc. 1982, 3 (3), 98-103.

(сир. $\text{Cr O}_3 \text{ S}_3$; III)

Уммуек 13536

1982

Fe - суньорук

Моссбауэр.
спектр

Goodenough Y.B.,
Fatseas G.A.,
J. Solid State Chem.,
1982, 41, N1, 1-22.

FeS_6^{10-}
(кластер)

[Оммуек 13990] 1982

Harris S.,

кв. сек.

расчёт,
электрон.
структура

Chem. Phys., 1982,
64, n 2, 229-237.

(см. MS_6^{n-} ; I)

FeS_4^{5-}

Ошм. 14570

1982

23 Б39. Исследование радиальных плотностей в кластере FeS_4^{5-} , рассчитанных X_α -методом рассеянных волн. Lie S. K., Taft C. A. An investigation of the radial densities in the FeS_4^{5-} cluster as calculated by the multiple scattering X_α method. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 89, № 6, 463—467 (англ.)

В рамках спин-неограниченного варианта метода ССП- X_α рассеянных волн (X_α -РВ) с использованием приближения касающихся атомных сфер рассчитано электронное строение кластера FeS_4^{5-} . Распределение электронного заряда в кластере и механизм хим. связи исследован в результате расчетов интегрального распределения заряда в сферах, а также радиальных электронных плотностей (РЭП) в подсистемах одно-электронных состояний с проекциями спина α и β . Для сравнения кластерные РЭП сопоставлены с соотв. РЭП в свободном ионе Fe^{3+} . Основные отличия в распределении электронной плотности атома Fe в класте-

расчет
Электрон-
строение

X. 1982, 19, N 23

ре и в ионе заключаются в том, что в кластере $3d\beta$ -уровни заполняются (число заполнения 1,1) и $4s$ -уровни заняты лишь частично ($4s\alpha^{0,43}$ $4s\beta^{0,42}$). Заселенности $3d\alpha$ -уровней 4,94 в кластере и ионе практически совпадают. Для валентных занятых $3d$ - и $4s$ -МО в кластере исследовано влияние изменения РЭП $3d$ -электронов на экранирование $4s$ -электронов. Анализ РЭП $3d$ -электронов в сфере Fe показал, что заселенность $3d\beta$ -уровней 1,1 приводит к уменьшению эффективного магнитного момента, наблюдаемому экспериментально. Вычисленные значения полной электронной плотности на ядре Fe в кластере FeS_4^{5-} , а также в др. кластерных соединениях железа использованы для определения калибровочной константы мессбауэровского изомерного сдвига на ядрах Fe, составившей $-0,25$. И. А. Тополь



1985

103: 223353p. A normal coordinate analysis of the dianion dithioxotetrachlorodisferrate ($[Fe_2S_2Cl_4]^{2-}$). Hu, Yongxu; Zhang, Linna; He, Lingjie; Lin, Zhengyan (Dep. Oceanogr., Xiamen Univ., Xiamen, Peop. Rep. China). *Jiegou Huaxue* 1985, 4(1), 20-3 (Eng). In a normal coordinate anal. of $[Fe_2S_2Cl_4]^{2-}$ the force consts., calcd. frequencies, main potential energy distributions, and assignments of the normal vibrational modes in comparison with exptl. frequencies are given. The assignment of stretching vibrations $\nu(Fe-S)$ and $\nu(Fe-Cl)$ and the rationality of the stretching force consts. K_{Fe-S} and K_{Fe-Cl} are discussed.

(Coul. norm.,
Di)

C.A. 1985, 103, N 26

$\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

1985

103: 77020j Standard enthalpy of formation of crystalline iron(II) sulfate heptahydrate at 298.15 K. Vasil'ev, V. P.; Dmitrieva, N. G.; Vorob'ev, P. N.; Vasil'eva, V. N.; Yashkova, V. I. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Zh. Neorg. Khim.* 1985, 30(7), 1685-9 (Russ). The heats of soln. of $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (c) in HClO_4 solns. of H_2O_2 were measured at 298.15 K. The std. heat of formation was derived.

($\Delta_{\text{soln}} H$, $\Delta_f H$)

C.A. 1985, 103, N 10.

1989

110: 45721s A gas-phase study of FeS_n^+ ($n = 1-6$). MacMahon, T. J.; Jackson, T. C.; Freiser, Ben S. (Dep. Chem., Purdue Univ., West Lafayette, IN 47907 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1989, 111(2), 421-7 (Eng). The series FeS_n^+ ($n = 1-6$), generated from sequential reactions of Fe^+ with ethylene sulfide in the gas phase, were studied by using photodissocn., collision-induced dissocn., ion-mol. reactions, and kinetic expts. FeS_n^+ ($n = 0-5$) reacted with ethylene sulfide by linear pseudo-1st-order kinetics for >2.5 half-lives, indicating that the ions were formed predominantly in their ground states and in 1 isomeric form for each ion studied. FeS_5^+ , however, did not react with ethylene sulfide. $D^\circ(\text{Fe}^+-\text{C}_2\text{H}_2) = 32 \pm 6$ kcal/mol was detd. by ion-mol. reactions. Photodissocn. thresholds gave the following bond energies directly: $D^\circ(\text{Fe}^+-\text{S}) = 61 \pm 6$, $D^\circ(\text{Fe}^+-\text{S}_2) = 48 \pm 5$, $D^\circ(\text{FeS}^+-\text{S}_2) = 49 \pm 5$, $D^\circ(\text{FeS}_2^+-\text{S}_2) = 49 \pm 5$, and $D^\circ(\text{FeS}_3^+-\text{S}_2) = 43 \pm 5$ kcal/mol. Photodissocn. and ion-mol. reactions were used to assign $D^\circ(\text{FeS}_4^+-\text{S}_2) = 38 \pm 5$ kcal/mol. These bond energies yield a variety of other thermochem. data. The implications of these results to ion structure are discussed.

$D^\circ(\text{Fe}^+-\text{S})$

(44) 187

C.A. 1989, 110, N6

FeS_n^+

$n=1-6$

1989

→ 24 Б1313. Исследование FeS_n^+ ($n=1-6$) в газовой фазе. A gas-phase study of FeS_n^+ ($n=1-6$) / MacMahon T. J., Jackson T. C., Freiser B. S. // J. Amer. Chem. Soc.— 1989.— 111, № 2.— Англ.

С использованием масс-спектрометров с фурье-преобразованием исследованы фотодиссоциация, диссоциация, индуцированная столкновениями, ионно-молек. р-ции и кинетика р-ций FeS_n^+ ($n=1-6$), полученных в результате последовательных р-ций Fe^- и FeS_n^+ ($n=1-5$) с этиленсульфидом в газ. фазе. Из данных о ионно-молек. р-циях и о порогах фотодиссоциации получены след. значения энергий диссоциации связей: $D^\circ(Fe^+-S_2)=48\pm 5$ ккал/моль; $D^\circ(Fe^+-S)=61\pm 6$ ккал/моль; $D^\circ(FeS^+-S_2)=49\pm 5$ ккал/моль; $D^\circ(FeS_2^+-S_2)=49\pm 5$ ккал/моль; $D^\circ(FeS_3^+-S_2)=43\pm 5$ ккал/моль; $D^\circ(FeS_4^+-S_2)=38\pm 5$ ккал/моль и $D^\circ(Fe^+-C_2H_2)=32\pm 6$ ккал/моль.

В. Ф. Байбуз

De

X. 1989, N 24

$\text{Fe}^{2+}\text{S}_4^{6-}$

1990

Starrev K., Kyrnev K.,
et al.

сдел.
носеи,
расеи

J. Phys. Chem. Solids
1990, 51 (5), 475-6.

(сдел.  Mn^{2+}S_4 ; III)

FeS₄

1991

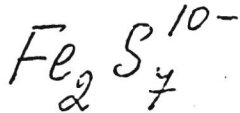
14 Б1042. Электронное распределение в четырехъядерных железо-серных кластерах. Electronic distribution in four-nuclear iron-sulfur clusters: [Abstr.] 5th Int. Conf. Bioinorg. Chem., Oxford, Aug. 4—10, 1991 / Borshch S. A. // J. Inorg. Biochem.— 1991.— 43, № 2—3.— С. 250.— Англ.

В рамках вибронной теории изучено распределение электронной плотности в четырехъядерных кластерах со смешанной валентностью. Анализ адиабатич. потенциала свидетельствует, что в четырехъядерных кластерах наименьший энергетич. барьер для переноса электрона меньше, чем в биядерных кластерах при той же величине междоцентрового и вибронного взаимодействия. Поэтому в четырехъядерных кластерах более вероятна делокализация электронов. В таких системах возможно также сосуществование состояний с локализованным и делокализованным распределением электронов. Обсуждено влияние обменного взаимодействия, представленного в виде суперпозиции гейзенберговского и двойного обмена.

Н. В. Харчевникова

М.П.

Х. 1992, N 14



1992

Starrev K.,

Nikolov G. et al.

cent. nocē., J. Phys. Chem.
muop. pacēm. Solids 1992, 53(8),
1139-41.

( $\text{Mn}_2\text{S}_7^{10-}$; III)

Сурьпуго Fe

1995

Bauschlicher Ch. W., Jr.
Maitre Ph.

meop.
pacrim

Theor. Chim. Acta
1995, 90 (2/3), 189-203

( cer. ScO ; III)

$Fe_m S_n$

$m, n \leq 6$

77. Справочник
Fe, Meep.
расчет

1996

125: 68275y Structure and magnetism of iron-sulfur clusters. Li, Zhi-Qiang; Ohno, Kaoru; Kawazoe, Yoshiyuki (Institute Materials Research, Tohoku University, Sendai, Japan 980-77). *Sci. Rep. Res. Inst., Tohoku Univ., Ser. A* 1996, 41(2, Materials Design by Computer Simulation III), 211-214 (Eng). The electronic structures of $Fe_m S_n$ ($m, n \leq 6$) clusters are studied by the first-principles spin-polarized calcns. within the local-d.-functional formalism. The bond lengths of all clusters are optimized by minimizing the binding energies and the optimized structures are compared with the exptl. investigations and those of iron-sulfur clusters in proteins. The relation of the structures of FeS clusters with those of the pure iron and pure sulfur clusters are discussed. The magnetic moments and electronic structures of the clusters are also presented.

C. A. 1996, 125, N6

F: FeS+

P: 3

131:162029 On the Structural Dichotomy of Cationic,
Anionic, and Neutral Schroeder, Detlef; Kretzschmar,
Ilona; Schwarz, Helmut; Rue, Chad; Armentrout, P. B.
(Institut fuer Organische Chemie, Technischen Universit
Berlin, Berlin D-10623, Germany). Inorg. Chem., 38(15),
3474-3480 (Engli 1999 Structural and thermochem.
aspects of the FeS₂⁺ cation are examd. by different mass
spectrometric methods and ab initio calcns. using d.
funct theory. Accurate threshold measurements provide
thermochem. data for FeS FeS₂⁺, and FeCS⁺, i.e., D₀(Fe+-
S) = 3.06 .+- . 0.06 eV, D₀(SFe+-S) = 3.59 0.12 eV,
D₀(Fe+-S₂) = 2.31 .+- . 0.12 eV, and D₀(Fe+-CS) = 2.40

.+- . 0.12 Fortunate circumstances allow a refinement of the data for FeS^+ by means ion/mol. equil., and the resulting $D_0(\text{Fe}^+-\text{S}) = 3.08 \pm 0.04$ eV is among most precisely known binding energies of transition-metal compds. The pr results agree with previous exptl. findings and also corroborate the comp data for FeS^+ and FeS_2^+ . Ab initio calcns. predict a sextet ground state for FeS_2^+ with a cyclic structure. The presence of S-S and Fe-S bonds ac for the fact that not only reactions involving the disulfur unit but also sulfur-atom transfer can occur. In contrast, the FeS_2^- anion is an acycl disulfide. In the gas phase, neutral FeS_2 may adopt either acyclic or cy structures, which are rather close in energy according to the calcns.