

Mo - Se, S, Te, Po

VII 3057

1961

Notes (2e)

Knop, D., Mac Donald R.D.

Canad. J. Chem., 1961, 39, 4,

897-904.

PNEC, 1962, 95176

Семь опус.  
Мск.

VII 3064

1961

$\text{MoTe}_2$  (ze)

Puotinen D., Newnham R.G.

Acta crystallogr., 1961, 14, 6,  
691-692.

RHEX, 1962, 35197.

Семь опус.  
Мел.

Vi, struktura

(krist:  $M_2MoS_4, M_2WS_4,$

$M = K, Rb, Cs, NH_4, Tl)$

VII 867

1965

$MoS_4^{2-}, WS_4^{2-}$  (vi)

Gattow G., Franke A., Muller A.

Naturwissenschaften, 1965, 52, N14,  
428-29.

Infrarotspecten der Tetrathiomolybdate  
and Tetrathio wolframate.

RF., 1966, 6D440

J

Е С Т Ъ Ф. Н.



MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>

1966

шлюкке  
посит.

1) 8Б139. Исследование колебательных спектров неорганических твердых тел. XII. Валентные колебания металл — сера в тиоанионах переходных металлов. Müller A., Krebs B. Schwingungsspektroskopische Untersuchungen anorganischer Festkörper. XII. Die Metall—Schwefel—Valenzschwingung in Thioanionen der Übergangsmetalle. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1966, 344, № 1—2, 56—62 (нем.; рез. англ.)

На основании рассмотрения симм. и асимм. вал. кол. связей М—S в VS<sub>4</sub><sup>3-</sup>, MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>, WS<sub>4</sub><sup>2-</sup>, MoO<sub>2</sub>S<sub>2</sub><sup>2-</sup>, W<sub>2</sub>S<sub>2</sub><sup>2-</sup> и ReO<sub>3</sub>S<sup>-</sup>, расположенных в области 400 и 550 см<sup>-1</sup>, (у соотв-щих оксопроизводных в области 900—1100 см<sup>-1</sup>) и расчетов приближенных силовых коэф показано, что в исследованных тиоанионах, в отличие от AsS<sub>4</sub><sup>3-</sup> и SbS<sub>4</sub><sup>3-</sup>, связь Me—S имеет значительно большую степень двоясвязности. Сообщ. XI см. РЖХим, 1966, 21Б119. Резюме авторов

ВР

X. 1967. 8

(сер. VS<sub>4</sub><sup>3-</sup>) III

$\text{MoS}_4^{2-}$

ЗД-111-2469

1966

7 Б127. Силовые коэффициенты  $\text{MoS}_4^{2-}$  и  $\text{WS}_4^{2-}$ .  
Müller Achim, Fadini Alois. Kraftkonstanten  
von  $\text{MoS}_4^{2-}$  und  $\text{WS}_4^{2-}$ . «Z. Naturforsch.», 1966, 21b,  
№ 6, 585—586 (нем.)

силы  
коэф.

При помощи литературных данных по частотам основ-  
ных колебаний ионов  $\text{MoS}_4^{2-}$  и  $\text{WS}_4^{2-}$  вычислены силовые  
коэф. модифицированного валентно-силового поля:  
 $f_d = 3,21 (3,50)$ ,  $f_{dd} = 0,26 (20)$ ,  $f_\alpha = 0,14 (0,14)$ ,  $f_{\alpha\alpha} =$   
 $= 0,3 (0,01)$ . В скобках даны значения  $f$  для  $\text{WS}_4^{2-}$ .  
М. Алнев

ж. 1967. 7.

129

MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>

BP - VII - 2469

1966

Calculation of force constants of inorganic compounds. V. Force constants of MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup> and WS<sub>4</sub><sup>2-</sup>. Achim Mueller and Alois Fadini (Univ. Goettingen, Ger.). *Z. Naturforsch.*, b 21(6), 585-6(1966)(Ger); cf. CA 65, 9753c. The force consts. of the above compds. were calcd. using a modified valence force system and a general valence force system. The force consts. are given in the table.

Ion	$f_d$	$f_{dd}$	$f_\alpha$	$f_{\alpha\alpha}$
MoS <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	3.21	0.26	0.14	0.03
WS <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	3.50	0.20	0.14	0.01

Force consts. of a modified valence force system in millidynes/A.

Ion	$f_d$	$f_{dd}$	$f_\alpha - f'_{\alpha\alpha}$	$f_\alpha - f_{\alpha\alpha}$	$f_{d\alpha} - f'_{\alpha\alpha}$
MoS <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	3.23	0.26	0.14	0.12	0.01
WS <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	3.51	0.20	0.14	0.13	0.00

Force consts. of a general valence force system in millidynes/A.

Margarete Lindsley

tl

C.A. 1966. 65. 12

17707 dec



1967

$MoO_2S_2^{2-}$   
 $WO_2S_2^{2-}$

7 Д340. Предварительные исследования строения ионов  $MoO_2S_2^{2-}$  и  $WO_2S_2^{2-}$  с помощью спектров комбинационного рассеяния. Legeroy Maurice J. F., Kaufmann Gérard. Étude préliminaire de la structure des ions  $MoO_2S_2^{2-}$  et  $WO_2S_2^{2-}$  par spectroscopie Raman. «C. r. Acad. sci.», 1967, С 265, № 23, 1322—1324 (франц.)

Исследованы спектры комб. рас.  $(NH_4)_2MoO_2S_2$  и  $(NH_4)_2WO_2S_2$ . В качестве источника возбуждения спектров использован лазер He—Ne. Приведен анализ полученных спектров в предположении о симметрии  $C_{2v}$  ионов  $MoO_2S_2^{2-}$  и  $WO_2S_2^{2-}$  и дано отнесение полос к типам симметрии и колебаниям связей и групп. Указано, что идентификация полос деф. кол. O—Me—S не может быть проведена однозначно. Приведены спектры и таблицы частот.  
Э. В. Б.

ср. 1968. 7D

19

1967

ВФ - 3948 - VII

~~Me<sub>2</sub>MoS<sub>4</sub>~~ - 2

7 Д480. ИК-спектры кристаллических тетратиомолибдатов и тетратиовольфраматов. Müller A., Krebs B., Gattow G. Infrarotspektren von kristallinen Tetrathiomolybdaten und Tetrathio wolframaten. «Spectrochim. acta», 1967, A23, № 11, 2809—2811 (нем; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры кристаллич. солей типа Me<sub>2</sub>MoS<sub>4</sub> и Me<sub>2</sub>WS<sub>4</sub> в области 4000—300 см<sup>-1</sup>. Все кристаллы исследованных солей, за исключением солей тал-

vi

+2

ВФ. 1968. 72

X

лия, имеют группу симметрии  $D_{2h}$  с  $Z=4$ . Полученные данные сведены в таблицы, там же приведены данные по спектрам комб. рас. ионов  $\text{MoS}_4^{-2}$  и  $\text{WS}_4^{-2}$ . Приведены силовые константы этих ионов, вычисленные тремя способами. Дан групповой анализ колебаний  $\text{MoS}_4^{-2}$  и  $\text{WS}_4^{-2}$ . Колебание  $\nu_1$ , запрещенное из-за симметрии молекул ( $T_d$ ) в ИК-спектре, наблюдалось только в тимолибдате и у  $\text{Tl}_2\text{WS}_4$ . Вырождение с трехкратно вырожденного колебания  $\nu_3$  практически снимается только у солей таллия. Сдвиг частот вал. кол. солей таллия в сторону больших длин волн указывает на наличие ковалентной доли у связи таллий — кислород. Библ. 10.

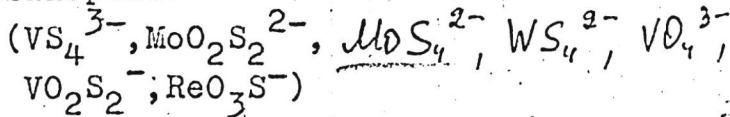
Ю. В. Фадеев

VII 1215



19.07

Mol. post.,  
sil. post.



Muller A., Krebs B., Rettner W.,  
Stockburger M.

Ber. Bunsenges. phys. Chem, 1967, 71, N2, 182-89.  
Spectroskopische Untersuchungen an Chalkogeno-  
metallaten: Elektronenabsorptionsspektren von  
 $VS_4^{3-}$ ,  $MoO_2S_2^{2-}$ ,  $WO_2S_2^{2-}$  und  $ReO_3S^-$  Schwingungs-  
spektren, Kraft konstanten und...  
RX, 1967, 20, 179 J

1968

$(MoSe_4)^{2-}$

$(NH_4)_2MoO_2S_2$

$\nu_1$

см. нот.

6 Д415. Колебательные спектры и силовые постоянные тетраселенмолибдатов и тетраселенвольфраматов (VI). Спектры комбинационного рассеяния  $(NH_4)_2MoO_2S_2$  и  $(NH_4)_2WO_2S_2$ . Müller A., Krebs B., Kebabcioglu R., Stockburger M., Glemser O. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten des Tetraselenumolybdates (VI) und des Tetraselenumwolframats (VI). Raman-Spektren von  $(NH_4)_2MoO_2S_2$  und  $(NH_4)_2WO_2S_2$ . Spectrochim. acta», 1968, A 24, № 11, 1831—1837 (нем.; рез. англ.)

Получены ИК-спектры и спектры комб. рас.  $(NH_4)_2MoSe_4$ ,  $(NH_4)_2WSe_4$ ,  $(NH_4)_2MoO_2S_2$ ,  $(NH_4)_2WO_2S_2$ , а также спектр комб. рас.  $(NH_4)_2MoS_4$  при возбуждении с помощью лазера He—Ne. Отнесены частоты основных колебаний тетраэдрич. анионов  $MoSe_4^{2-}$ ,  $WSe_4^{2-}$ ,  $WO_2S_2^{2-}$ ,  $MoO_2S_2^{2-}$ . Для  $MoSe_4^{2-}$  и  $WSe_4^{2-}$  произведен расчет силовых постоянных. Показано, что валентная силовая постоянная связи  $Mo(W) - X$  ( $X = Se, S, O$ ) возрастает линейно с увеличением электроотрицательности атома X. Библ. 12.

Л. Д. Щерба

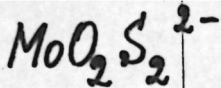
09.1969.6A



+3






$$\nu_i$$

Müller A. u. gp.  
Spectrochim. acta,  
A24, N11, 1831

1968

(Cell. MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>) III

$MoO_3S^{2-}$

4 Д387. Электронные спектры  $MoO_3S^{2-}$  и  $WO_3S^{2-}$  и их сравнение со спектрами  $MoO_xS_{4-x}^{2-}$  и  $WO_xS_{4-x}^{2-}$ . Müller A., Diemann E., Ranade A. C., Aymonino P. J. Übergangsmetallchalkogen-Verbindungen. Electronic spectra of  $MoO_3S^{2-}$  and  $WO_3S^{2-}$  and their comparison with the spectra of the ions  $MoO_xS_{4-x}^{2-}$  and  $WO_xS_{4-x}^{2-}$ . «Z. Naturforsch.», 1969, 24b, №10, 1247—1249 (англ.)

Эл. спектр

Получены и интерпретированы электронные спектры поглощения ионов  $MoO_3S^{2-}$  и  $WO_3S^{2-}$  в водном растворе. Спектры сравнены со спектрами других тиомолибдатов и тивольфраматов. Резюме

1969

7-888-111

09.1970.

42

$\text{AsS}_4^{3-}$ ,  $\text{SbS}_4^{3-}$ ,  $\text{VS}_4^{3-}$ ,  $\text{MoS}_4^{2-}$ ,  $\text{WS}_4^{2-}$  (<sup>7</sup> <sup>13</sup> cur. nos.) 1969

Sanyal N.K., Pandey A.N., Singh H.S.,

J. Mol. Spectrosc., 1969, 30(1), 144-6. VII 3730

Orbital valence force field constants  
of decahedral metal thioanions.

10

8

CA, 1969, 70, 526, 118197c

1970

MoOS<sub>3</sub><sup>2-</sup>

3)

11 Б251. Электронные спектры ионов  $\text{VOS}_3^{3-}$ ,  $\text{MoOS}_3^{2-}$  и  $\text{WOS}_3^{2-}$ . Diemann E., Müller A. Elektronenspektren des  $\text{VOS}_3^{3-}$ ,  $\text{MoOS}_3^{2-}$  und  $\text{WOS}_3^{2-}$ -ions. «Spectrochim. acta», 1970, A26, № 1, 215—219 (нем.; рез. англ.)

Исследованы электронные спектры в области  $10\,000$ — $45\,000\text{ см}^{-1}$  водн. р-ров  $\text{Cs}_2\text{MoOS}_3$  (I),  $\text{Cs}_2\text{WOS}_3$  (II) и  $1\text{ M NaOH}$  р-ра  $\text{Na}_3\text{VOS}_3$  (III). На основании упрощенной диаграммы MO, полдысы  $\nu_1$  I, II и III при  $21500$ ,  $26700$  и  $19200\text{ см}^{-1}$  соотв. отнесены к переходу  ${}^1A_1 \rightarrow {}^1E$ . Между  $\nu_1$  и потенциалом ионизации в ряду  $\text{OWX}_3^{2-}$  ( $\text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}$ ) наблюдается линейная зависимость, что подтверждает отнесение электронного перехода к типу  $\text{X} \rightarrow \text{W}$ .  
М. Дейчмейстер

Зеленый,  
синий

+2

X. 1970. 11

X

$\text{V}_2$  ( $\text{TiS}_3$ ,  $\text{ZrS}_3$ ,  $\text{NbS}_3$ ,  $\text{US}_3$ ,  $\text{VS}_4$ , 1970  
 $\text{NbS}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{NbS}_2\text{Br}_2$ ,  $\text{NbS}_2\text{I}_2$ , 7  
 $\text{Mo}_2\text{S}_5\text{-Cl}_3$ ,  $\text{Mo}_2\text{S}_5\text{-Br}_3$ ) VII 4889 8

Perrin - Billot C., Perrin A., Prigent J,  
Chem. Commun., 1970, VII, 676-677 (aun).

A vibrational study of the S-S group  
in transition-element compounds.

Sci Xun, 1970, 225295

W

~~20~~ 16

$\text{CrO}_4^{3-}$ ,  $\text{Mn}^{18}\text{O}_4$ ,  $\text{VVO}_4$ ,  $\text{MoSe}_4^{2-}$ ,  $\text{WSe}_4^{2-}$  1970  
VII 5051 (среднеквадр. амплитуд. колебаний)

Sanyal N.K., Pandey A.N., Singh H.S.,  
Singh B.P.

J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans-  
fer, 1970, 10, N° 12, 1343-5 (англ.)

Generalized mean-square am-  
plitudes of vibration in some  
XY<sub>4</sub> type ions.

10

2

CA, 1971, 74, N4, 17623 f

$VSe_4^{3-}$ ;  $MoSe_4^{2-}$ ;  $WSe_4^{2-}$  (eur. no. m.) 1972

Müller A., Schmidt K.H. <sup>Di</sup> VII 644

Tytko K.H., Bouwnina J., Jelinek F.

Spectrochim. Acta, 1972, A28, N2,

381-91 (HEM.)

Vibrational spectra (ir and laser Raman) and normal coordinate analysis of various transition-metal tetrathio- and tetraseleno-

metallates.

CA, 1972, 76, N14, 78695u

$\text{MoO}_2\text{S}_2$

1972

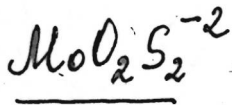
Синтез.  
исслед.

50101q Raman spectra of ammonium thiomolybdate,  $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_2\text{S}_2$ , with molybdenum-92 and molybdenum-100. Mueller, A.; Weinstock, N.; Schmidt, K. H.; Nakamoto, K.; Schlaepfer, C. W. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1972, 28(11), 2289-93 (Ger). The Raman spectra of  $(\text{NH}_4)_2\text{MoO}_2\text{S}_2$  with  $^{92}\text{Mo}$  and  $^{100}\text{Mo}$  as well as with the naturally occurring isotope mixt. were measured. The  $\text{MoO}_2\text{S}_2$  force consts. were detd. with approx. force fields. In order to test the validity of the approxns. in calcg. the force field, the  $^{92}\text{Mo}$  and  $^{100}\text{Mo}$  isotope shifts were also evaluated. The exptl. obsd. shifts are in good agreement with calcd. ones.

P. A. Larsen

C.A. 1973. 78. N 8





Müller A., Schmidt K.,  
Mohan N.

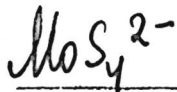
1972

(γ, cur. n.)

"J. Chem. Phys.", 1972, 57  
N 4, 1752-1757.

(cur. OsO<sub>4</sub>, III)

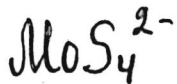
1972



26889m Vibrational spectra and force constants of the isotopic molybdate ions [ $^{92}\text{MoO}_4^{2-}$  and  $^{100}\text{MoO}_4^{2-}$ ] and thiomolybdate ions [ $^{92}\text{MoS}_4^{2-}$  and  $^{100}\text{MoS}_4^{2-}$ ]. Mueller, A.; Weinstock, N.; Mohan, N.; Schlaepfer, C. W.; Nakamoto, K. (Dep. Chem., Marquette Univ., Milwaukee, Wis.). *Z. Naturforsch. A* 1972, 27(3), 542-3 (Eng). The vibrational frequencies of the title ions were measured by recording the ir and Raman spectra of isotopic salts  $\text{Na}_2\text{MoO}_4$  and  $\text{K}_2\text{MoS}_4$ . From the frequencies, the force consts.  $F_{33} = 2.84 \pm 0.12$  and  $5.14 \pm 0.21$ ,  $F_{34} = -0.01 \pm 0.07$  and  $-0.22 \pm 0.21$ , and  $F_{44} = 0.203 \pm 0.011$  and  $0.38 \pm 0.03$  were calcd. for  $\text{MoS}_4^{2-}$  and  $\text{MoO}_4^{2-}$ , resp.

$\nu_i$   
 un. unet.

C.A. 1972. 77.4



Mohan N., ugp.

1972

"J. Mol. Struct.", 1972,

13, n. 2, 155-162.

(c.n)

(c.u. CH<sub>4</sub>, III).



Mueller, A.;  
et al.

1972

(Vi; c.n)

" Spectrochim Acta, Part A  
1972, 28 (2), 381-91.

● (cu.  $\text{VS}_4^{3-}$ ; III)

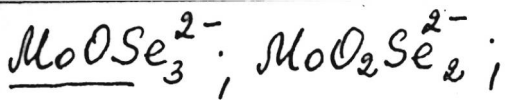
$MoS_4^{2-}$

1972

Narayanan V. S., Nagarajan G.

V; Monatsh. Chem. 1972, 103,  
1349-59.

●  $AsS_4^{3-}$ ; III

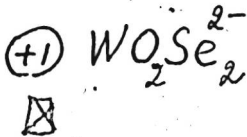


1972

(Vi)  
(C.A. no. 1)

9629e Vibrational spectra and normal coordinate analysis of MoOSe<sub>3</sub><sup>2-</sup>, MoO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub><sup>2-</sup>, and WO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub><sup>2-</sup>. Schmidt, K. H.; Mueller, A. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part. A* 1972, 28(10), 1829-40 (Ger). The ir and Raman spectra of MoOSe<sub>3</sub><sup>2-</sup>, WOSe<sub>3</sub><sup>2-</sup>, MoO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub><sup>2-</sup>, and WO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub><sup>2-</sup> are reported and discussed. The frequency assignments of MoO<sub>2</sub>S<sub>2</sub><sup>2-</sup>, WO<sub>2</sub>S<sub>2</sub><sup>2-</sup>, MoO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub><sup>2-</sup>, and WO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub><sup>2-</sup> are verified with simple modified-valence-force-field-model calcs. A normal coordinate anal. for all mentioned ions is reported, and the force consts. and the bond strengths are compared with those of similar ions (mainly in the series MO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, MO<sub>2</sub>S<sub>2</sub><sup>2-</sup>, MOS<sub>3</sub><sup>2-</sup>, MS<sub>4</sub><sup>2-</sup>; M = Mo, W).

C.A. 1973, 78. N 2.



Мо-сульфиды  
=  
MoS<sub>2</sub>; MoS<sub>3</sub>

1973

8 Б173. Электронная спектроскопия сульфидов молибдена. Ratnasamy P. Electron spectroscopy of molybdenum sulphides. «Indian J. Chem.», 1973, 11, № 7, 695 (англ.)

Методом рентгеноэлектронной спектроскопии определены энергии связи электронов в ди- и трисульфиде молибдена. В молекуле трисульфида атом серы и атом молибдена показывают более высокие значения энергий связи. Резюме

Энергия  
связи  
электронов

Х. 1974 N 8



Mo Se<sub>4</sub><sup>3-</sup>

Оммнер 2583

1974

суд. номер.  
номер.  
номер.

Sanyal N.K. Pawar Ahmad et al.  
Indian J. Pure and Appl. Phys.  
1974, 12, N2, 155-156.

(see  $VS_4^{3-}$ , III)



41014.1817

Ch, TC, Ph

MoS<sup>2</sup>-  
y34469

Ch

1974

2583

Sanyal Nitish K., Parvez Ahmad, Dixit L.  
Kinetic & potential constants of tetrahedral thio & seleno anions.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1974,  
12, N 2, 155-156

(англ. 0210 пж)

172 179

ВИНИТИ

40716.4853

TC, Ch, Ph

MoS<sub>4</sub><sup>3-</sup> naerin

MoS<sub>4</sub><sup>3-</sup> 02  
Py 54969

1974

Xy 5692

Sanyal Nitish K., Ahmad Parvez. Intramo-  
lecular [REDACTED] force field of some  
tetrahedral thio and seleno anions.

"Z. Naturforsch."; 1974, 29a, N 5,

826-828

(англ.) (coll. PS<sub>4</sub><sup>3-</sup>; III)  
0152

122 124

= 1 4 4

ВИНИТИ

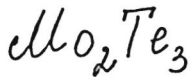
MoOS<sub>3</sub><sup>2-</sup>

1974

Сил. пост.  
номенк.  
р-уш

29669h Rapid means of simplification of the representation of potential energy of molecules. Sieskind, Manuel (Lab. Spectrosc. Opt. Corps Solide, Univ. Louis Pasteur, Strasbourg, Fr.). C. R. Acad. Sci., Ser. B 1974, 278(13), 559-61 (Fr). A method of redn. based on the linearity of operators is applied to different types of mol. potentials. Linear mols., valence fields, and Urey-Bradley-Shimanouchi potentials are considered for mol. ions, where applicable (such as MoOS<sub>3</sub><sup>2-</sup>). L. Deutsch

C.A. 1974. 81. N 4

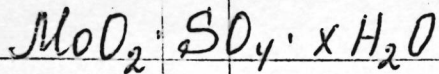


(Tr)

сверхпровод  
соедин.

Matthias Bernd T. 1975  
"Int. J. Quantum Chem  
Symp" 1975, n 9, 579-580 (англ)

(см Nb<sub>3</sub>Ge; I)



1975

Манефо К. Д.,  
и др.(Vi)  
и.к. специф.Научн. тр. Всес.  
Н.-И. и проектн.  
ин-та химии и инв.  
Сибир. 1975, N 15,  
256-61.(сер.  $\text{H}_2\text{MoO}_4$ ; III)

MoS<sub>2</sub>

1976

Garg A.K.

Phys. status solidi (b),  
1976, 76 N1, 171-4.

(и.к. электр.  
сш. швей.)

(сш MoS<sub>2</sub>) 171

1976

MoS<sub>2</sub>  
MoSe<sub>2</sub>  
MoTe<sub>2</sub>  
(твёрд.)

и. к. спектр,  
сил. пост.

(42)

X1977 №2

2 Б205. Инфракрасные спектры поглощения дихалькогенидов молибдена в виде прессованных таблеток. Garg A. K. Pressed-pellet infrared absorption spectra of molybdenum dichalcogenides. «Phys. status solidi (b)», 1976, 76, № 1, 171—174 (англ.; рез. нем.)

Исследованы ИК-спектры крист. MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub> и MoTe<sub>2</sub> (таблетки в CsJ) в диапазоне 500—200 см<sup>-1</sup>. Во всех спектрах присутствуют по две полосы, относящиеся к нормальным колебаниям решеток тригон. призматич. типа: интенсивная полоса типа E⊥C(E<sub>1u</sub>) (для перечисленных в-в, соотв., 383, 285 и 235 см<sup>-1</sup>) и полоса малой интенсивности типа E∥C(A<sub>2u</sub><sup>1</sup>) (соотв., при 466, 348 и 287 см<sup>-1</sup>). На основании модели Витинга для колебаний решеток, состоящих из линейных цепей, по значениям частот нормальных колебаний решетки рассчитаны силовые постоянные вдоль цепи (Mo—X) и между слоями решетки (X—X). При переходе от MoS<sub>2</sub> к MoTe<sub>2</sub> силовые постоянные Mo—X уменьшаются (постоянная растяжения — от 1,66·10<sup>5</sup> до 1,14·10<sup>5</sup> дин/см, постоянная сжатия — от 2,46·10<sup>5</sup> до 1,69·10<sup>5</sup> дин/см), а силовые постоянные взаимодействия между слоями растут (постоянная растяжения — от 0,08·10<sup>4</sup> до 1,044·10<sup>5</sup> дин/см, постоянная сжатия — от 2,44·10<sup>4</sup> до 3,031·10<sup>5</sup> дин/см).

Ю. В. Киссин

1976

MoTe<sub>2</sub>

Garg A K

Phys. status solidi (B)  
1976, 76, N1, 171-4

(u.k. evap  
cell work.)

(cell MoS<sub>2</sub>) III



MoS<sub>2</sub>

(смерз  
к.р.)

1976  
Ishii Motoniko -

Бунсаки . 1976, N 19  
450-5

(all. TiO<sub>2</sub>; III)

$\text{MoS}_3\text{Se}^{2-}$

X 4-13208

1978

$\text{WS}_4\text{Se}_3^{2-}$

20 Б138. Колебательные спектры и силовые постоянные  $\text{MoS}_3\text{Se}^{2-}$  и  $\text{WSe}_3^{2-}$ . Müller A., Schmidt K. H., Zint U. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten von  $\text{MoS}_3\text{Se}^{2-}$  und  $\text{WSe}_3^{2-}$ . «Spectrochim. acta», 1976, A32, № 4, 901—905 (нем., рез. англ.)

Измерены ИК-(500—50  $\text{cm}^{-1}$ ) и КР-спектры тв.  $\text{Cs}_2\text{MoS}_3\text{Se}$  и  $\text{Cs}_2\text{WSe}_3$ . Дано отнесение колебаний ионов  $\text{MoS}_3\text{Se}^{2-}$  (I) и  $\text{WSe}_3^{2-}$  (II) симметрия I и II —  $C_{3v}$ . Вычислены силовые постоянные I и II в приближении  $L$ -матриц и методом Фадини, а также используя силовые постоянные тетраэдрич. ионов  $\text{MS}_4^{2-}$  и  $\text{MSe}_4^{2-}$  ( $M = \text{Mo, W}$ ). Частота вал. кол.  $M = \text{S}$  лежит в области 550—400  $\text{cm}^{-1}$ , вал. кол.  $M = \text{Se}$  — в области 350—250  $\text{cm}^{-1}$ .

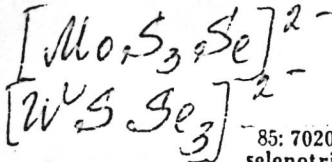
Е. Разумова

(71)



X, 1978, N 20.

1976



\* 65-13208

85:70203x Vibrational spectra and force constants of selenotrithiomolybdate and triselenothio tungstate anions. Mueller, A.; Schmidt, K. H.; Zint, U. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1976, 32A(4), 901-5 (Ger). The ir and Raman spectra of  $Cs_2MoS_3Se$  and  $Cs_2WSSe_3$  were recorded and assigned using model calcns. Force constns. of  $[MoS_3Se]^{2-}$  and  $[WSSe_3]^{2-}$  were also detd.

cu. nct.  
Vi



C.A. 1976. 85 N10

70407.4231

Ph, Ch, TC, MGU

42530

Mos2

1976

\* 4-17758

Weiss Kay, Phillips James M.

Calculated specific surface energy of  
molybdenite ( $\text{MoS}_2$ ). "Phys. Rev. B: Solid  
State", 1976, 14, N 12, 5392-5395  
(англ.)

0846 пик

803 817 3 3.1

ВИНИТИ

$\text{MoSe}_4^{2-}$  sammelen 5308 1974

Koeniger - Ahlborn E.,  
et al.

(u.n.) Spectrochim. acta,  
1974, A33 (3-4), 273-6.

(ver.  $\text{MoS}_4^{2-}$ ; III)

MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>

OMMUEU 5308

1977

MoSe<sub>4</sub><sup>2-</sup>

WSe<sub>4</sub><sup>2-</sup>

87: 174972e The resonance Raman spectra of tetrathio-  
 molybdate(VI) and tetrathio-selenate(VI). Anharmonicity  
 constants  $X_{11}$  of tetrathiomolybdate(VI), tetrathio-  
 selenate(VI), tetrathio-selenate(VI) and similar ions. Koeni-  
 ger-Ahlborn, E.; Mueller, A. (Inst. Chem., Univ. Dortmund,  
 Dortmund, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1977, 33A(3-4),  
 273-6 (Eng). The resonance Raman spectra of MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>, MoSe<sub>4</sub><sup>2-</sup>,  
 and WSe<sub>4</sub><sup>2-</sup> are reported. The  $X_{11}$  anharmonicity const. is  $\sim 0$ .  
 A comparison with similar oxoanions, e.g. CrO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, indicates that  
 the S and Se anions, having a lower frequency  $\nu_1$ , are less  
 anharmonic. The UV and visible spectrum of MoSe<sub>4</sub><sup>2-</sup> is also  
 given.

(ell.n)

(+2) 17

C.A. 1977. 87. N 22

MoSe<sub>2</sub>

1978

Bullett D.W.

J. Phys. C 1978, 11(22),  
4501-14.

Звукунг.  
Сур па

●  
1 см. NbSe<sub>2</sub>; III )

$\text{MoO}_3 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$  - сммвсв 6511a) 1978.  
Muller A., et al.

(vi) Spectrochim. acta,  
1978, A34, 561-62  
см. ност.  
Raman spectrum ...



$\text{MoS}_4^{3-}$

1978

Mohan S

сум. моет.

моет. рецепта.  
фрагменты.

Acta cienc. Indica  
1978, 4(4), 371-6

●  
(сум.  $\text{Pd}_4^+$ ; III)

$\text{MoO}_3\text{S}^{2-}$

1978

1 Д376. Спектр комбинационного рассеяния (в водном растворе) и силовые постоянные  $\text{MoO}_3\text{S}^{2-}$ . Müller A., Mohan N., Dornfeld H., Tellez C. Raman spectrum (in aqueous solution) and force constants of  $\text{MoO}_3\text{S}^{2-}$ . «Spectrochim. acta», 1978, A 34, № 5, 561—562 (англ.)

Спектр  
К.Р.,  
сил. пост.

Получен поляризационный спектр комб. рас. (200—950  $\text{cm}^{-1}$ ) водных щелочных растворов  $\text{K}_2\text{MoO}_3\text{S}$  при возбуждении лазерной линией 647,1 нм. Проведен анализ колебательных линий иона  $\text{MoO}_3\text{S}^{2-}$  (I) в группе симметрии  $\text{C}_{3v}$ . В рамках теории возмущений 1-го порядка выполнен расчет констант валентного силового поля I с учетом постоянных силового поля ионов  $\text{MoO}_4^{2-}$  и  $\text{MoS}_4^{2-}$ . Значение силовых постоянных связей Mo—O и Mo—S в I составляет 6,05 и 3,05 мдин/Å соответственно. Сделан вывод, что эффективность связи Mo—O выше, а связи Mo—S в I ниже, нежели в  $\text{MoO}_4^{2-}$  и  $\text{MoS}_4^{2-}$ .

И. В. А.

ф. 1979, № 1

MoS<sub>2</sub>

Smalley 9216

1979

Haycock, Wick, Wieck.

J. Chem. Soc. Faraday Trans. II  
1979, 75, 1692

Electronic structure...



(Chem. News Lett., 1980 v127)

номер 7874

1979

MoSF<sub>4</sub>

MoSeF<sub>4</sub>

U16 B14. Получение и свойства тии- и селенотетрафторидов молибдена MoSF<sub>4</sub> и MoSeF<sub>4</sub>. Holloway John H., Puddick David C. Preparation and characterisation of molybdenum thio- and selenotetrafluorides, MoSF<sub>4</sub> and MoSeF<sub>4</sub>. «Inorg. and Nucl. Chem. Lett.», 1979, 15, № 2, 85—87 (англ.)

Нагреванием стехиометрич. кол-в MoF<sub>6</sub> и Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> или MoF<sub>6</sub> и Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> при 275° в течение 6 час. в Ni-реакторе получены MoSF<sub>4</sub> (I) и MoSeF<sub>4</sub> (II). На воздухе в-ва выделяют HF и H<sub>2</sub>S или H<sub>2</sub>Se, устойчивы под вакуумом при комн. т-ре. Рентгенограммы порошка показывают, что I и II изоструктурны, однако их структура отли-

чается от структуры WSF<sub>4</sub> и WSeF<sub>4</sub>. Масс-спектр I содержит пики ионов MoSF<sub>4</sub><sup>+</sup>, MoSF<sub>3</sub><sup>+</sup>, а также MoOF<sub>3</sub><sup>+</sup>, MoOF<sub>2</sub><sup>+</sup> и MoOF<sup>+</sup>, образующихся в результате гидролиза I. ИК-спектр I: 690, 670, 633, ν(Mo—концевой F), 500; 458, ν(Mo...мостиковый F), 564 см<sup>-1</sup>, ν(Mo=S); ИК-спектр II: 692, 604, ν(Mo—F), 520, 471 см<sup>-1</sup>, ν(Mo...F). Сделан вывод, что тв. I и II полимерны и содержат мостиковые атомы F. И. В. Никитин

всех металлов  
масс-спектр

☒ (+3) ИК-спектр  
масс-спектр

2. 1979, N16

MoSeF<sub>4</sub>.

номер 7814

1979

Holloway J.A. et al.

Di

масс спектрометр  
схема

Inorg. Nucl. Chem.  
Lett., 1979, 15,

85-87

$\text{Mo}_2\text{S}$

(7)

1979

Korsunskii, M. I.  
et al.

Fiz. Tverd. Tela Metallo-  
fiz., Tr. Resp. Konf.  
1975 (Pub. 1979), 98-100.

(see  $\text{Mo}_2\text{B}_5$ ; III).

Mo S<sub>4</sub><sup>2-</sup>  
Mo O<sub>2</sub> S<sub>2</sub><sup>2-</sup>

1980

Kretzler F. W.

J. Chem. Phys., 1980,  
73, N<sup>o</sup> 7, 3274-88

р.в. уелл.  
раерет



уелл. Cr O<sub>4</sub><sup>2-</sup> - III

1981

$\alpha\text{-Te}_2\text{MoO}_7$

95:70279h Vibrational spectrum of  $\alpha\text{-Te}_2\text{MoO}_7$  and a proposal for the structure of telluromolybdates of divalent cations. Baran, E. J.; Botto, I. L.; Fournier, L. L. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 1981, 476, 214-20 (Ger). IR and Raman spectra of  $\alpha\text{-Te}_2\text{MoO}_7$  were obtained and analyzed to confirm the proposed crystal structure of  $\text{MTeMoO}_6$  (M is a divalent cation). The expected similarity of their vibrational spectra was found and the structural model is totally consistent with the spectroscopic findings.

LLK,  
CKP

CA 1981, 95, N8



$Te_2MoO_7$  (Ummuck 15552)

1982

Arnaudov M., Dimitrova  
et al.

UK

ерекүрүп

Water. Res. Bull., 1982,

17, N 9, 1121-1129.

(MoS<sub>4</sub>)<sup>2-</sup> -  
1982

Ummuck 14016 1982

97:30641e Electronic and resonance Raman spectroscopic studies on the tetrathiomolybdate(VI) ion, [MoS<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>. Determination of the excited-state molecular geometry. Clark, Robin J. H.; Dines, Trevor J.; Wolf, Malcolm L. (Christopher Ingold Lab., Univ. Coll., London, UK WC1H 0AJ). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1982, 78(4), 679-88 (Eng). The electronic absorption and resonance Raman spectra of [MoS<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> were recorded at low temps. on solid samples. The resonance Raman spectrum, excited within the contour of the lowest-energy charge-transfer absorption band (<sup>1</sup>T<sub>2</sub> ← <sup>1</sup>A<sub>1</sub>) at ~470 nm, is characterized by a no. of overtone and combination tone progressions, the most prominent being that in ν<sub>1</sub>(a<sub>1</sub>). A theor. model, based on the Condon approxn. and the harmonic-oscillator approxn. for both the ground and excited states, was used to simulate the excitation profiles of ν<sub>1</sub> and its 1st 2 overtones, from which it was calcd. that the Mo-S bond length increases by 0.07Å in the excited state. Addnl., the excited-state Jahn-Teller effects and the bandwidths of the members of the ν<sub>1</sub>ν<sub>1</sub> progression are discussed.

CKF, Vi,  
Cmpykm. &  
best. cocmout.

C.A. 1982, 97, N4

$\text{MoS}_6^{8-}$   
(кластер)

Уммлек 13990

1982

Marzies S.,

Кв. слек.  
расшир,  
Флекитрон.  
ее структура.

Chem. Phys., 1982, 67,  
№2, 229-237.



$(Mo_6S_8)^{2-}$

Оммух 14998, 1982

теорет.  
расчет,  
электрон.  
структура

Le Beuzec G., Makhyour  
M. A., et al.,  
J. Chem. Phys., 1982,  
76, N 12, 6060-6066.



$Mo_3S_8^{n-}$

1982

8 Б36. Электронная структура тройных сульфидов молибдена. Нефедов В. С. «Докл. АН СССР», 1982, 267, № 2, 410—412

Методом МО ЛКАО проведен расчет электронного строения кластеров  $Mo_3S_8^{n-}$  ( $n=0, 1, 2, 3$ ). Приближения и параметризация метода подробно описаны ранее («Коорд. хим.», 1975, т. 1, № 4, 486). Расчеты показывают, что  $d$ -АО Мо расщепляются в зону шириной 9 эВ в кластере  $Mo_3$ , а включение взаимодействия Мо—S расширяет эту зону до 15 эВ. Эффективная электронная конфигурация Мо  $5s^{0.54}d^{5.1}$ . Для оценки плотности состояний на уровне Ферми рассчитанные энергетич. уровни кластера были «размыты» в зоны с лоренцевской формой с шириной 0,025 ат. ед. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. данными для тройных сульфидов Мо. А. Багатурьянц

$n=0, 1, 2, 3$

Электронное строение, расчет,  $Si$

X. 1983, 19, № 8.



1983

/ 100: 218051x Molecular constants of some  $\text{XY}_4$  tetrahedral ions. Mohan, S.; Mukunthan, A.; Gunasekaran, S. (Madras Inst. Technol., Perarignar Anna Univ. Technol., Madras, 600044 India). *Acta Cienc. Indica, [Ser.] Chem.* 1983, 9(1-4), 226-30 (Eng). The kinetic consts. method was used to obtain the harmonic force consts., compliance consts., mean amplitudes of vibration, and Coriolis coupling consts. of the tetrahedral ions  $\text{MoS}_4^{2-}$ ,  $\text{MoSe}_4^{2-}$ , and  $\text{WSe}_4^{2-}$ . The obtained results are reasonable.                      

(all. norm.)

⑦2  $\boxtimes$ C. A. 1984, 100, N 26

$\text{MoS}_4^{2-}$

1983

Mohan S., Merkur-  
han A., et al.

ссыл.  
процес.  
Acta Cienc. Indica, [Ser.]

Chem. 1983, 9(1-4), 226-  
-230.

(ссыл.  $\text{MoS}_4^{2-}$ ; III)

Mo S<sub>2</sub> Se Br<sub>5</sub>

Om. 17024

1983

Mo S<sub>2</sub> Se Cl<sub>5</sub>

Волков С.В., Конесневич-  
КО В.Л., и др.,

ИК спектр,  
спектр КР.

Укр. хим. ж., 1983,  
49, N 6, 563 - 565.



№ 2 Br<sub>2</sub>  
№ 2 Cl<sub>3</sub>

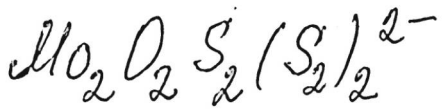
[Um. 17024]

1983

ИК спектр,  
спектр КР,  
комбат-  
расстояние

Волков С.В., Колесни-  
ченко В. П. и др.,

Укр. хим. зб., 1983,  
49, № 6, 563 - 565.



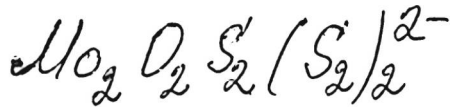
1984

Bernholc J.,  
Holzwarth N. A. W.

во всеобщей,  
суперкрит.,  
Vi;

J. Chem. Phys., 1984,  
81, N 9, 3987-3995.

● (сер. O<sub>2</sub>; III)



1984

Bernholc J., Holzwarth

N. A. W.

расчёт  
структ.,  
E;J. Chem. Phys., 1984,  
81, N 9, 3987-3995.(см.  $\text{O}_2$ ; III)



1985

Bernhole J., Stiefel E.I.

Электрон-  
ное  
свойство

Inorg. Chem., 1985,  
24, N 9, 1323 - 1330.

● (ср.  $\text{MoS}_4^{2-}$ ; III)

MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>

1985

2 Д103. Электронное строение MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup> и Mo<sub>3</sub>S<sub>9</sub><sup>2-</sup>.  
Electronic structure of MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup> and Mo<sub>3</sub>S<sub>9</sub><sup>2-</sup>. Berth-  
holz J., Stiefel E. I. «Inorg. Chem.», 1985, 24,  
№ 9, 1323—1330 (англ.)

Электронное  
строение

Методом псевдопотенциала в приближении локаль-  
ной плотности исследовано электронное строение  
MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup> (I) и Mo<sub>3</sub>S<sub>9</sub><sup>2-</sup> (II). Для I принята тетраэдрич.  
геометрия, а II — представляет собой тетраэдрический  
квадратный пирамидальный атом Mo, к которому при-  
соединены два экваториальных I и аксиальный S.  
Приведены энергии уровней, карты MO, распределения  
электронной плотности, энергии опич. переходов. По-  
казано, что в I и II суммарный перенос заряда с Mo  
на S мал, хотя в II оба Mo-содержащих лиганда при-  
нимают участие как в донорно-акцепторном; так и в  
дативном взаимодействии с центральным атомом Mo.

(4)

ср. 1985, 18, N 12

Близость энергий атомных уровней  $4p$  S и  $4d$  и  $5s$  Mo приводит к существенной делокализации МО. Это частично ответственно за аномально большое структурное разнообразие систем со связями Mo—S, что может обуславливать их каталитическую и ферментативную активность. Подробно проанализирована структура энергетич. уровней и интерпретированы спектры поглощения в видимой области. Показано, что в II центральный атом находится в состоянии Mo(IV), а терминальные — Mo(VI). Отмечено отсутствие связывания S—S. Подчеркнуто, что I может выступать в роли и акцепторного, и донорного лиганда. Библ. 27. В. Л. Лебедев

$Mo_3 S_2 Cl_9^{3-}$

1985

— 14 Б1044. Трехъядерные кластеры металлов начала переходных периодов. Ян-теллеровские деформации и электронное строение. Trinuclear clusters of early transition metals: Jahn—Teller distortions and electronic structure. Jiang Yuansheng, Tang Aoqing, Hoffmann Roald, Huang Jinling, Lu Jiaxi. «Organometallics», 1985, 4, № 1, 27—34 (англ.)

В рамках общей классификации трехъядерных комплексов и комплексных ионов переходных металлов с различным числом эпицентрич., мостиковых и концевых лигандов рассмотрены их кристаллохим. особенности. Расширенным методом Хюккеля выполнены расчеты электронного и геометрич. строения 8-электронного металлич. комплексного иона  $Mo_3S_2Cl_9^{3-}$ . В случае идеальной симметрии  $D_{3h}$  в качестве основного получено триплетное состояние  $(8a_n')^2(9e')^4(7e'')^2$ , к-рое неустойчиво по отношению к ян-теллеровским деформациям. При учете смещений только атомов ядра  $Mo_3S_2$  (ВЗМО  $7e''$  на 95% локализована на этом ядре) найдены два ян-теллеровских минимума, отвечающих сим-

расчет  
геометр.,  
структурн.  
х. 1985, 19, N 14

метрии  $C_{2v}$  кольца  $Mo_3$ . Энергия ян-теллеровской стабилизации  $\sim 0,12$  и  $0,14$  эВ, практически полностью определяются энергиями стабилизации ВЗМО. Изменения длин связей и валентных углов по сравнению с идеальной геометрией  $D_{3h}$  малы. Оценен эффект дестабилизации нижнего блока  $d$ -уровней относительно невозмущенного ядра  $Mo_3$  и обсуждено влияние различных лигандов (эпицентрич., мостиковых и кольцевых) на электронное и геометрич. строение комплексов.

С. П. Долин





$MoS_n O_{4-n}^{2-}$  El-Issa B.D., Ali A.A.M. <sup>1989</sup>  
 $n = 0 \div 4$  et al.,

mevrem. Inorg. Chem. 1989, 28(17),  
n-acrem 3297-305.

me. cbepe Theoretical study of the fer-  
ding in sulfur- and oxygen-containing  
me by b denum species of the  
C.A. 1989, 111, N18, 1606994

general formula  $\text{Mod } n \sum_{i=0}^{n-1} (i=0-9)$



№3

(OM 32225)

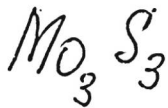
1989

Langhoff S.R., Bausch-  
licher Ch.W., Jr., et al.,

и.п.основ.  
и возбужд.  
составн.

Chem. Phys., 1989,  
132, N1-2, 49-58.





1990

Cheng Wendan,  
Zhang Qianer, et al.

сферическая,  
свободная,  
растворимая

Polyhedron 1990, 9  
(14), 1625-31.

(сфер.  $\text{Mo}_3\text{O}_3$ ; III)

MoSe<sub>2</sub>

1990

114: 193633n Lattice and electron components of specific heat of molybdenum selenide (MoSe<sub>2</sub>) and molybdenum telluride (MoTe<sub>2</sub>). Minenkov, Yu. F.; Amitin, E. B.; Naumov, V. N.; Paukov, I. E.; Krabbes, G. (Inst. Inorg. Chem., 630 090 Novosibirsk, USSR). *Mater. Sci. Forum* 1990, 62-64 (Mater. Sci. High Technol.: MASHTEC '90, Pt. 1), 115-16 (Eng). The sp. heats  $C_p(T)$  of MoSe<sub>2</sub> and MoTe<sub>2</sub> was measured by adiabatic calorimetry in the 7-300 K range of temps. Thermodyn. functions were calcd. Lattice and electron components of  $C_p(T)$  and Sommerfeld const. of MoSe<sub>2</sub> were evaluated with the use of the known phonon spectrum:  $j = 30 \pm 5$  mJ/(mol. K<sup>2</sup>). The compd. MoSe<sub>2</sub> undergoes a transition to the superconducting state at 6.3 K. The estd. value of the highest crit. field for this compd. is about 60 T.

( $C_p$ , 7-300K)



C.A. 1991, 114, N20

1990

Mo<sub>6</sub>Ti<sub>8</sub>

Minenkov Yu. F.,

Amitin E. B. et al.

Mater. Sci. Forum

1990, 62-64, 115-16.

(p. 7-300K)

(cur. Mo<sub>6</sub>Si<sub>8</sub>; I)

MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>

1993

120: 62894z Calculation of charge transfer energies and ionization potentials of thiomolybdate (MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup>) and thiotungstate (WS<sub>4</sub><sup>2-</sup>) complexes using the multiple scattering X $\alpha$  method. Subramanian, V.; Vijayakumar, M.; Ramasami, T. (Cent. Leather Res. Inst., Adyar, 600 020 India). *THEOCHEM* 1993, 103(1-2), 157-62 (Eng). Elaborate multiple-scattering-X $\alpha$  (MS-X $\alpha$ ) calcs. were done for thiomolybdate and thiotungstate anions, by using nonrelativistic and quasi-relativistic methods. The energies for the optical transitions were calcd. by using both the Slater-transition-state and the total energy ( $\Delta$ SCF) methods. The electronic spectral data calcd. for the MoS<sub>4</sub><sup>2-</sup> and WS<sub>4</sub><sup>2-</sup> complexes by using the MS-X $\alpha$  methods agreed satisfactorily with existing exptl. values. The present studies showed that the inclusion of relativistic effects in the calcn. on WS<sub>4</sub><sup>2-</sup> influences significantly the energies calcd. for the 4f orbitals but not the 5d orbitals of tungsten.

(meop. panu)

① & WS<sub>4</sub><sup>2-</sup>

C.A. 1994, 120, N 6

$\text{Mo}_3\text{S}_4^{4+}$  Li Jun, Liu Chen-Wan, 1994  
et al.,

M.N. Polyhedron, 1994, 13,  
N12, C: 1841 - 1851

P.M.X. NG, 1995, 65 1062



Mozley<sup>47</sup>

1994

Li Jun, Liu Chen-Wan,  
et al.,

U.S.A. Polypedron, 1994, 13,  
N 12, C. 1841 - 1851

P. de X. N 6, 1995, 651062

F: MoS4n-

P: 3

132:1

13311 The d0, d1, and d2 Configurations in Known and Unknown Tetrathiometal Compounds MS4n- (M = Mo, Tc, Ru; W, Re, Os). A Quantum Chemical Study. Zalis, Stanislav; Stoll, Hermann; Baerends, Evert Jan; Kaim, Wolfgang J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic Prague CZ-18223, Czech Rep. Inorg. Chem., 38(26), 6101-6105 (English) 1999 The known tetrathiometalates MoS42-/3-, WS42-/3-, ReS4-/2-/3-, and the unknown species TcS4-/2-, RuS40/-, and OsS40/-/2- were calcd. using ab in and DFT methods. The one-electron reduced species with d1 configuration shown to exhibit a slight Jahn-Teller distortion (Td .fwdarw. D2d); the largest corresponding stabilization energy was obtained for MoS43- with - kcal/mol. Trends in vacuum bonding energies involve a destabilization

1999

C.A. 2000, 132

on going from 5dn to 4dn systems and on redn. from d0 to d1 species, with th exception of Ru and Os complexes where the d1 configurations are more sta than the d0 forms. The d2 species ReS43- and OsS42- have vacuum bonding energies similar to those of d1 analogs. The metal contribution to the L (e) of d0 forms is lowest for the neutral RuS4 and OsS4 and highest for t dianions MoS42- and WS42-. The DFT approach supported by correlated ab initio calcns. describes the main features of the electronic spectra of t d0 complexes. For the exptl. best accessible ReS4n- system the absorptio energies and stretching frequencies were well reproduced, and the related hitherto unknown OsS4- ion is predicted to be a fairly stable paramagneti species.

2000

F: MoTe2

P: 3

132:143815 Electron characteristic loss spectra of molybdenum dichalcogenides. Timoshkin, A. N.; Sobolev, V. Val.; Sobolev, V. V. Udmurt State University

Izhevsk 426034, Russia Phys. Solid State, 42(1), 37-40 (English) 2000 The complete sets of the fundamental optical functions of Mo dichalcogenides were considered for the 1st time. The energies of their and surface plasmons of two types are detd. The energies of long-wavelen plasmons correlate with the energies of the deep min. in the reflectivity .epsilon.2E2 spectra and the maxima in the reflectivity phase spectra.



C.A. 2000, 132

F: MoSe<sub>2</sub>

P: 3

132:143815 Electron characteristic loss spectra of molybdenum dichalcogenides. Timoshkin, A. N.; Sobolev, V. Val.; Sobolev, V. V. Udmurt State University

Izhevsk 426034, Russia Phys. Solid State, 42(1), 37-40 (English) 2000 The complete sets of the fundamental optical functions of Mo dichalcogenides were considered for the 1st time. The energies of their and surface plasmons of two types are detd. The energies of long-wavelen plasmons correlate with the energies of the deep min. in the reflectivity  $\epsilon_2$  spectra and the maxima in the reflectivity phase spectra.

F: MoS2

2000

P: 3

132:143815      Electron characteristic loss spectra  
of molybdenum dichalcogenides.      Timoshkin, A.  
N.; Sobolev, V. Val.; Sobolev, V. V. Udmurt State  
University      Izhevsk 426034, Russia      Phys. Solid  
State, 42(1), 37-40 (English) 2000      The complete  
sets of the fundamental optical functions of Mo  
dichalcogenides were considered for the 1st time.  
The energies of their and surface plasmons of two  
types are detd.      The energies of long-wavelen  
plasmons correlate with the energies of the deep  
min. in the reflectivity  $\epsilon_2$  spectra and  
the maxima in the reflectivity phase spectra.

C.A. 2000, 132

MoS<sub>2</sub>

2001

135: 295677f Band structure of MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, and  $\alpha$ -MoTe<sub>2</sub>: angle-resolved photoelectron spectroscopy and ab-initio calculations. Boeker, Th.; Severin, R.; Mueller, A.; Janowitz, C.; Manzke, R.; Voss, D.; Krueger, P.; Mazur, A.; Pollmann, J. (Inst. Physik, Humboldt-Univ. Berlin, 10115 Berlin, Germany). *Los Alamos Natl. Lab., Prepr. Arch., Condens. Matter* [preprint] 26 Jul 2001, 1-12, arXiv:cond-mat/0107541 (Eng), Los Alamos National Laboratory. Avail. URL: <http://xxx.lanl.gov/pdf/cond-mat/0107541> The complete valence-band structure of the Mo dichalcogenides MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, and  $\alpha$ -MoTe<sub>2</sub> is presented and discussed in comparison. The valence bands were studied using both angle-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES) with synchrotron radiation, as well as, ab-initio band-structure calcns. The ARPES measurements were carried out in the const.-final-state (CFS) mode.

opmozhemy  
chemy, ab  
initio paper

(+2) □



C. 17. 2001, 135, N20

The results of the calcns. show in general very good agreement with the exptl. detd. valence-band structures allowing for a clear identification of the obsd. features. The dispersion of the valence bands as a function of the perpendicular component  $k_x$  of the wave vector reveals a decreasing 3-dimensional character from  $\text{MoS}_2$  to  $\alpha\text{-MoTe}_2$  which is attributed to an increasing interlayer distance in the 3 compds. The effect of this  $k_x$  dispersion on the detn. of the exact dispersion of the individual states as a function of  $k_{\parallel}$ -component for off-normal emission spectra can be detd. The corresponding  $k_{\perp}$ -value is obtained from the symmetry of the spectra along the  $\Gamma\text{A}$ ,  $\text{KH}$ , and  $\text{ML}$  line, resp.



Notes

2001

Boeker Th., Severin R.,  
et al.,

срочно  
срочно,  
срочно  
срочно

Los Alamos Natl. Lab.,  
Prepr. Arch; Condens

Matter [preprint] 26 Jul 2001,

1-12.



No 1/2

2001

Boeker, Th., Severin R.,  
et al.,

opomo 71.  
crump,  
ab initio  
pacem

Los Alamos Natl.  
Lab., Prepr. Arch., Condens  
Matter [preprint] 26 Jul  
2001, 1-12.

No. 2

UM 41432

2002

Binyong Liang et al.,

S-M-S J. Phys. Chem. 2002,  
Chem A106, N 30, 6945-51.

Infrared spectra and Density  
Functional Theory Calcula

tions of Group 6 Transition  
Metal Sulfides in Solid  
Argon