

[Cl₂FeS₂MoS₂FeCl₂]²⁻阴离子的FT-IR光谱和简正坐标分析

林政炎,何玲洁,张琳娜,卢嘉锡

中国科学院福建物质结构研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在500-100cm⁻¹波段范围内测定了[Cl₂FeS₂MoS₂FeCl₂]²⁻簇阴离子的Fourier变换红外光谱.采用简化的普遍价力场(SGVFF)进行了简正坐标分析.振动基频的计算值与观测值符合良好,两者平均偏差小于1.0%证实了振动谱带的归属;确定了包括伸缩、变角、扭曲以及伸缩-伸缩相互作用的16个力常数.最后还讨论了所得结果的合理性和可靠性.

关键词 [红外分光光度法](#) [铁络合物](#) [固氮酶](#) [钼络合物](#) [二硫化物](#) [化学键](#) [簇状化合物](#) [阴离子](#) [多核络合物](#) [矩阵](#) [硫络合物](#) [力常数](#) [付里叶变换](#) [坐标换算](#)

分类号 [0627](#) [0611.662](#)

FT-IR spectra and normal coordinate analysis of the [Cl₂FeS₂MoS₂FeCl₂]²⁻ dianion

LIN ZHENGYAN, HE LINGJIE, ZHANG LINNA, LU JIAXI

Abstract The Fourier transform (FT) IR spectra of [Cl₂FeS₂MoS₂FeCl₂]²⁻ were measured at 100-500 cm⁻¹. A simplified general valence force field was used in a normal coordinate anal. The calculated frequencies agreed with the observed ones, with a mean deviation of <1.0%, confirming the assignments of the vibrational spectrum. Sixteen force constants including stretching, bending, torsion, and stretching-stretching interactions were obtained. The rationality and the reliability of the results are discussed.

Key words [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [IRON COMPLEX](#) [NITROGENASE](#) [MOLYBDENUM COMPLEX](#) [DISULFIDE](#) [CHEMICAL BONDS](#) [CLUSTER COMPOUND](#) [ANION](#) [POLYNUCLEAR COMPLEX](#) [MATRICES](#) [SULFIDE COMPLEX](#) [FORCE CONSTANT](#) [FOURIER TRANSFORM](#) [CONVERSION OF COORDINATE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“红外分光光度法”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [林政炎](#)
- [何玲洁](#)
- [张琳娜](#)
- [卢嘉锡](#)