



1961

Свободный
Сел.

$S_2O_7^{2-}$

19Б83. Колебательный спектр дисульфат-аниона. Simon A., Wavner H. Das Schwingungsspektrum des Disulfat-Anions. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1961, 311, № 1—2, 102—109 (нем.; рез. англ.).—Получены ИК-спектры поглощения и спектры комб. расс. кристаллич. $Na_2S_2O_7$ и $K_2S_2O_7$. Полученные спектры согласуются со строением $S_2O_7^{2-}$ -иона в виде $O_3S-O'-SO_3$; угол $SO'S$ меньше 180° , симметрия C_{2v} . Проведено частичное отнесение найденных колебательных частот. В системе валентных сил вычислены приближенные значения силовых коэф. для 5-атомной модели O_3SO' при предположении для этой группы симметрии T_d . Значения упругих постоянных связей SO и SO' найдены равными соответственно 8,21 и 3,36 мдн/А. Упругая постоянная связей SO' вычислена также при предположении для $O_3S-O'-SO_3$ нелинейной модели типа XY_2 . Найденное значение 3,56 мдн/А. Из полученных упругих постоянных вычислены по Зиберту (РЖХим, 1954, 30225, 1955, 31032) порядки связей SO' и SO в $S_2O_7^{2-}$ -ионе, равные соответственно 0,79—0,83 и 1,70. Ю. Харитонов

х.1962.19

1962

S₂O₇²⁻ ион

3 Б127. Исследование спектра комбинационного рассеяния расплавленного бисульфата калия и колебательные частоты группы S₂O₇. Walrafen G. E., Irish D. E., Young T. F. Raman spectral studies of molten potassium bisulfate and vibrational frequencies of S₂O₇ groups. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 3, 662—670 (англ.)

Синтез

Группы

Измерены частоты интенсивности линий в спектрах комб. расс. расплавленного бисульфата калия в интервале т-р 300—700°. Найдено, что в этих условиях образуются ионы S₂O₇²⁻: 2HSO₄⁻ → S₂O₇²⁻ + H₂O. Концентрация S₂O₇²⁻ достигает максимума при 500°. При дальнейшем повышении т-ры ионы S₂O₇²⁻ распадаются на SO₄²⁻ и SO₃. Данные о частотах иона в спектре комб. расс. сопоставлены с результатами исследования его ИК-спектра. Сделан вывод о нелинейном строении цепи S—O—S. Вероятная конфигурация иона C₂ (слегка искаженная конфигурация C_{2v}), что согласуется с рентгеноструктурными данными. Предложена интерпретация спектра I. В. Алексанян

X. 1964. 3



Walrafen G. E., Irish D. E., Young T. F.



J. Chem. Phys., 1962, 37, 662



исследование спектров колебания

основные

частоты рассеяния дисперсия

теплота

кален и колебательные теплоты

группы S_2O_7

S₂O₇²⁻

XII - 1265

1973

139929j Prediction of the stereochemistry of polysulfate and hydrogen sulfate ions. Brown, I. D. (Inst. Mater. Res., McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *Acta Crystallogr., Sect. B* 1973, 29(Pt. 9), 1979-83 (Eng). The angles in 9 polysulfate and H sulfate ions are predicted to within 1.5° by using 2 empirical relations, one involving the lengths of the bonds which define the angle, the other involving the configuration of the bonds around the bridging O atom. By using, in addn., the bond strength relations, it is possible to predict the complete geometry of the S₂O₇²⁻ ion to an accuracy of 0.013 Å and 0.8°. The variations in angle can be understood equally well by assuming that they are caused by O-O repulsion or by variation in the strengths of the S-O bonds.

(M.H.)

CA 1973

79, N24