

SO_3^-

II-343

$SO_3^{2-}(\sqrt{i})$

1954/

1955

Simon A., Waldmann K.

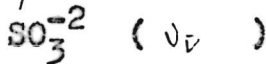
Z.phys.Chem.(Leipzig), 1955, 204, N 3/4,
234-244.

Wiss.Z.Techn.Hochschule Dresden, 1954/55
4, N 3, 359-362 (Heft.)
Zur Struktur des Fulfitons.

PX, 1956, 2060

10

II-337



1955

Evans J.C., Bernstein H.J.

Canad.J.Chem., 1955, 33, N 7, 1270-1272

(AHM)

The vibrational spectrum of the sulphite ion in sodium sulphite.

PX, 1956, I8504

II-342

$\nu_1(\text{ClO}_3^-, \text{BrO}_3^-, \text{IO}_3^-, \text{SO}_3^{2-}, \text{SeO}_3^{2-})$

1960

Rocchiccioli C.

Ann.chimie, 1960, 5, N 9-10, 999-1036
(франц.)

Исследование инфракрасных спектров
поглощения неорганических соединений,
содержащих группу XO_3 .

РЖХим., 1961, 15Б98

11-1674

SO_4^{2-} , SO_3^{2-} (amstovne met. di) 1963

Si^-O (amstovne met. b pas)
~~amstovne~~ ~~eregurechun~~

Koch D., Voita G.

Z. phys. Chem., (DDR), 1963, 224, N 3-4,
209-229

Zur theorie der Normalkoordinaten-
analyse von Molekülen

PX., 1964, 15619

10

1963

12 Б208. Инфракрасные спектры и структура металл-сульфитных соединений. Newman G., Powell D. B. The infra-red spectra and structures of metal-sulphite compounds. «Spectrochim. acta», 1963, 19, № 1, 213—224 (англ.)

Исследованы ИК-спектры в области $4000-400 \text{ см}^{-1}$ ряда металл-сульфитных комплексов 3 типов: 1) двойные сульфиты $M_2M'(\text{SO}_3)_2$ и $MM''\text{SO}_3$, где $M=\text{NH}_4$ или щел. металл, $M'=\text{Zn, Cd, Fe, Mn, Co, Ni, Mg}$ и $M''=\text{Cu}$; 2) комплексы с монодентатными сульфитными лигандами — $[\text{PdSO}_3(\text{H}_2\text{O})_3]$, $[\text{PdSO}_3(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NH}_3)]$, $[\text{PdSO}_3(\text{H}_2\text{O})(\text{NH}_3)_2]$, $[\text{PdSO}_3(\text{NH}_3)_3]$, *цис*- $\text{Na}_2[\text{Pd}(\text{SO}_3)(\text{NH}_3)_2]$, *транс*- $\text{K}_2[\text{Pd}(\text{SO}_3)_2(\text{NH}_3)]_2$, $\text{Na}_6[\text{Pd}(\text{SO}_3)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{K}_6[\text{Pt}(\text{SO}_3)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{SO}_3]\text{Cl}$, $\text{Co}[\text{Co}(\text{NH}_3)_3(\text{SO}_3)_3]$, $[\text{NH}_4]\text{Co}(\text{NH}_3)_2\text{En}(\text{SO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{K}_3[\text{Rh}(\text{NH}_3)_3(\text{SO}_3)_3] \cdot 3,5 \cdot \text{H}_2\text{O}$; 3) комплексы с бидентатными сульфитными

ж. 1966. 12

лигандами: $K_2[Pd(SO_3)_2]$, $K_2[Pt(SO_3)_2] \cdot 2H_2O$, $Na_3[Co(SO_3)_3] \cdot 4H_2O$ и $K_3[Rh(SO_3)_2] \cdot 2H_2O$. Для всех соединений предложено отнесение частот основных колебаний группы SO_3^{2-} и рассмотрен характер связи последних с металлами. ИК-спектры сульфитов типа 1 аналогичны спектру сульфита натрия, что подтверждает их строение как двойных солей. ИК-спектры сульфитов типа 2 имеют много общего со спектром $(NH_4)_2[Hg(SO_3)_2]$, в котором группы SO_3^{2-} связаны с Hg через атом серы. На этом основании сделан вывод, что для всех сульфитов типа 2 характерна связь группы SO_3^{2-} с металлами через атом серы.

Б. Жданов

1964

Frequency shifts and conditions of the sum of state of S and O isotope molecules and their dependence on the molecular force constants. Guenter Vojta and Dietrich Koch (Deut. Akad. Wiss., Leipzig, Ger.). *Z. Physik. Chem.* (Leipzig) 225(5/6), 295-304(1964). Theoretical. Frequency shifts caused by the substitution of ^{18}O , ^{34}S , and ^{36}S and partition function ratios of isotopic mols. were calcd. by means of force consts. evaluated previously (CA 61, 8910b). For the computation of partition function ratios, well known formulas were used exactly and in 1st approxn. For the frequency shifts of SO_4^{--} and SO_3^{--} , simple formulas were developed. The uncertainty of force consts. as described in the former papers leads to an uncertainty of frequency shifts and partition function ratios. The error intervals of force consts. yield small intervals for the quantities in question. The intervals for the partition function ratios of SO_4^{--} and SO_3^{--} are expressed as uncertainty of temp. Shifts and partition function ratios are represented graphically in dependence on sets of force consts. The values of SO_4^{--} which belong to the Urey-Bradley force consts. are given.

Friedrich Epstein

 SO_3^{--}
 SO_4^{--}

Chem. Phys.
 Cymerus no
 co Germany

C.A. 1964.61.11

12.7.83 cd.



1854-II

150, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 20, 1964

(СИНОДАТ ПОСТ.)

Порай-Колмиц М.А., Конов С.А.
С.Струтинский, 1964. 5. 3.
474-481

Примечание: святы в тисногородном
соединении:

РФ., 1964. 11063

503-

XII - 836

1965

7

2 Д105. Молекулярные орбиты сульфит-иона.
Ионов С. П., Порай-Кошиц М. А. «Ж. неорганической химии», 1965, 10, № 9, 1961—1965

Получен вид самосогласованных молекулярных орбит сульфит-иона и их энергии. Найден потенциал ионизации (6,71 эв). Обсуждается природа связи кислород — сера на основе анализа заселенностей по Малликену. На атоме серы найден положительный эффективный заряд ($q_s = +0,59$). Оценена общая энергия притяжения — 14,91 эв. Обсуждаются электронные спектры. Найдено, что первый переход $h \rightarrow \pi^*$ -типа.

ф. 1966. 22

SO_3^{2-}

A-700

1966

матер.

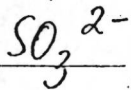
Nagarajan G.

структ.

Ср. анал.
кассетам

Indian J. Pure
and Appl. Phys.,
● 1966, 4(12)

456-60

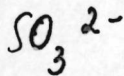


1967

Керрел Г. W., et al.

J. Amer. Chem. Soc., 89, N 14,
3396.

Барьеры иверсии тетра-
эдрических молекул
типа XU_3 и родствен-
ных легких моле-
кул, со-держащих группу
 XU . (см. NH_3^-)



Manne R.

11947

J. Chem. Phys., 46, N 12, 4645.

Молекулярные орбитали и
химический связи для внут-
ренних электронных оболо-
чек оксидантов серы и
хлора. (см. SO_4^{2-})

(SO₃)²⁻

XII - 6

1969

Структура
кварца

34156m Reinvestigation of the structure of nickel(II) sulfite hexahydrate. Baggio, S.; Becka, L. N. (Univ. Cent. Venezuela, Caracas, Venez.). *Acta Crystallogr., Sect. B* 1969, 25(6), 1150-5 (Eng). A refinement of the crystal structure of rhombohedral NiSO₃·6H₂O, *R*₃, *a* = 5.898 Å, *α* = 95.4°; *Z* = 1, *d*. 2.04 (hexagonal, *a* = 8.794, *c* = 9.002 Å), has been carried out by full-matrix least-sqs. methods with anisotropic temp. factors, by use of 383 independent reflections of measurable intensity obtained from microdensitometer measurements of integrated precession and Weissenberg patterns. The discrepancy index *R* is 0.058 for all data. The pyramidal (SO₃)²⁻ ion has S-O 1.536 Å. and O-S-O 103.6°, in good agreement with values found for other sulfites. The [Ni(H₂O)₆]²⁺ distorted octahedron has three equiv. Ni-O bonds of 2.043 Å. and three of 2.076 Å. RCZS

+1

C.A. 1969. 71. 8.

X

SO_3^{--} (водный р-р)

1970

З Б164. Поглощение света пирамидальными ионами XO_3 в растворенном состоянии. Tandon S. P., Tandon Kamla (Mrs). Light absorption in pyramidal XO_3 ions in state of solution. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1970, 8, № 4, 199—200 (англ.)

И. Снектер

Измерены электронные спектры в области 186—360 нм водн. р-ров хлорат, бромат, нодат и сульфит ионов. Рассмотрена электронная структура пирамидальных (C_{3v}) ионов и произведено отнесение спектра. Интенсивная полоса около 200 нм отнесена к переходу $\dots (4a_1)^2 \rightarrow (4a_1)^1 (5a_1)^1$, т. е. к разрешенному переходу ${}^1A_1 \rightarrow {}^1A_1$ в молекулах с симметрией C_{3v} . И. В. Кумпаненко.

Х. 1971. 1

+3



Средство к (X1 - 2901
 и потому $\left(\begin{array}{l} \text{OJ}; \text{OB}_2^-; \text{Oce}^-; \text{OceO}^-; \text{SO}_4^{2-} \\ \text{HBO}_3^-; \text{OceO}_4^-; \text{OceO}_5^-; \text{F}^-; \text{HSiO}_4^- \end{array} \right)$

Борисов Ю.А., Бугаков Н.Н.;
 Изв. АН СССР; Сер. хим., 1972, №1, 18-23;

РФН Зап., 1972, 121526

HO (90)



1947

(8.)

Glidewell C.
Inorg. Chim. Acta 1947,
24, 149-57 (Eng).

(car. CO_3^{2-} ; III)

GC3-2

1981

Baird N.C., et al

J. Comput. Chem.,

1981, 2, N3, 225-230

(see GC2; III)

SO_3^{2-}

Дм. 16669

1983

18 Б33. Неэмпирические расчеты сульфит-иона SO_3^{2-} и протонированного сульфит-иона HSO_3^- , или SO_2OH^- . Ab initio calculations on the sulfite ion, SO_3^{2-} , and hydrogen sulfite ion, HSO_3^- or SO_2OH^- . Strömberg Ann, Gropen Odd, Wahlgren Ulf, Lindqvist Oliver. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 7, 1129—1133 (англ.)

Методами ССП и МК ССП с использованием двухэкспонентного набора базисных ф-ций, дополненного поляризац. и диффузными орбиталями на атоме серы, рассчитаны равновесные геометрич. параметры и энергии анионов SO_3^{2-} и HSO_3^- (в двух структурных модификациях). Большинство вычислений выполнено в приближении ССП, а метод МК ССП с двухконфигурац. волновой функцией применен только для контроля описания диссоциации HSO_3^- . С целью передать эффект окружающего поля в кристалле выполнены также расчеты с добавлением точечных электр. за-

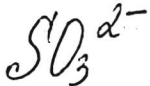
расчет
геометр.,
структ.,
М.П;



Х. 1983, 19, N 18

рядов. Найдено, что межъядерное расстояние S—O в HSO_3^- меньше, чем в SO_3^{2-} ; предложено качеств. объяснение этому факту. В отличие от прежних результатов квантовомех. расчетов получено, что форма SO_2OH^- имеет более низкую энергию, чем HSO_3^- , хотя разность энергий обеих структур невелика. Влияние «кристаллич.» поля сводится к небольшим изменениям геометрич. параметров (0,02—0,03 Å и 2°) и более полярному распределению зарядов. А. В. Немухин





Dm. 16669

1983

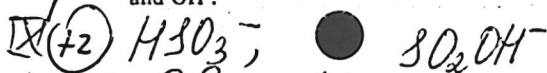
теорет.

практич.

структур.

параметр.

93:132517g Ab initio calculations on the sulfite ion, SO_3^{2-} , and hydrogen sulfite ion, HSO_3^- or SO_2OH^- . Stroemberg, Ann; Gropen, Odd; Wuhlgren, Ulf; Lindqvist, Oliver (Inst. Math. Phys. Sci., Univ. Tromsø, 9001 Tromsø, Norway). *Inorg. Chem.* 1983, 22(7), 1129-33 (Eng). Ab initio calcs. were made on the SO_3^{2-} , HSO_3^- , and SO_2OH^- ions. Geometry optimizations were performed on all the ions, and the surroundings of the ions, SO_3^{2-} and HSO_3^- , in the solid state were accounted for by incorporating the crystal field in the calcs. The mechanism behind the shortening of the S-O bond in HSO_3^- as compared with SO_3^{2-} was confirmed to be a transformation of an antibonding into a nonbonding orbital upon protonation. The isomers HSO_3^- and SO_2OH^- are of comparable energy. The very long S-OH bond (1.716 Å) indicates the system to be assembled from comparatively weakly interacting species of SO_2 and OH^- .



C.A. 1983, 98, N16.

SO_3^{2-}

(DM. 20160)

1984

Strömberg A., Wahlg-
ren U., et al.

поис d-
орбиталей
и (S-O)

Chem. Phys., 1984,
89, N3, 323-328.



$\text{SO}_3^{2-}(\text{aq})$ [Om. 22470]

1985

Peter L., Meyer B.,

Inorg. Chem., 1985, 24,

(vi)

N 19, 3071-3073.

SO_3^{2-}

(OM-22490)

1985

Strömberg S., Wahlgren
U., et al.

изоп.
раств.
в воде.

Chem. Phys., 1985, 100,
N2, 229-235.

SD_3^{2-}

[Om. 25729]

1986

Strömberg A., Strömberg D.;
Wahlgren U., et al.,

реометр;
смазки;
мерем.
расчет

Acta chem. scand., 1986,
A40, N9, 601-606.

SO₃ -

SO₃

photoelectron
chem,
cmp - pr,
ab initio
prism

2000

134: 34644p Photoelectron Spectroscopy of SO₃⁻ at 355 and 266 nm. Dobrin, S.; Boo, B. H.; Alconcel, L. S.; Continetti, R. E. (Department of Chemistry and Biochemistry, University of California San Diego, La Jolla, CA 92093-0314 USA). *J. Phys. Chem. A* 2000, 104(46), 10695-10700 (Eng), American Chemical Society. Photoelectron spectra of SO₃⁻ were recorded at 266 and 355 nm to study photodetachment of the SO₃⁻ anion (²A₁) to the ground state of neutral SO₃ (¹A₁). A long vibrational progression in the 355 nm spectrum is attributed to excitation of the umbrella mode, ν₂, consistent with predictions that C_{3v} symmetry SO₃⁻ yields D_{3h} symmetry SO₃ upon photodetachment. At 266 nm, photodissocn. of SO₃⁻ to SO₂ + O⁻ was also obsd. The geometry and normal-mode frequencies of SO₃⁻ and SO₃ as well as the adiabatic electron affinity (AEA) and vertical detachment energy (VDE) of SO₃ also were calcd. with ab initio (MP2 and CCSD(T)) and DFT methods. Using theor. predictions and exptl. data, Franck-Condon simulations of the photoelectron spectra are in good agreement with expt. The calcd. AEA agreed well with expt., but the VDE is less accurate, presumably because of the large geometry change between anion and neutral.

C. A. 2001, 134, N3