

O-S-H-O

5026

1949

 $\text{CH}_3\text{COSH} (\nu_e)$

Sheppard N.

Trans. Faraday Soc., 1949, 45, 693-697

Infrared spectrum, and the assignment of the
fundamental modes of vibration of
thioacetic acid.

C.A., 1949, 8832 de.

2

w

X - 5239

1956

$\text{CH}_3\text{SO}_3\text{K}$, $\text{CH}_3\text{OSO}_2\text{K}$, $(\text{CH}_3\text{SO}_3\text{CH}_3$,
 $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{SO}$, (Di)

Simon A., Kriegsmann H.,
Chem. Ber., 1956, 89, 2447-2450

10

5034

 $C_2H_5SO_2OCH_3$ (Si группыCSO₂O) 1956

Simon A., Kriegsmann H., Dutz H.

Chem. Ber., 1956, 89, N 10, 2378-
2384, 2384-2389, 2390-2396 (HEM.)

Schwingungsspektren von Alkylderivaten der Schwefligen Säure. IV. Die Raman- und IR - Spektren einiger Alkansulfonsäure - alkylester. V. Raman-Spektren der Methansulfonsäure und des Methansulfonsäure - anhydrids.

CM.H./00.

C₃SH₈O₃

VI. Raman-Spektren der Alkali-Methyl-
sulfite and Raman - und IR.-spektren
einiger Dialkylsulfite.

PX., 1958, N 8, 23862

1576

1958

$\text{H}_3\text{CSO}_3\text{H}$, $\text{H}_3\text{CSO}_3\text{Na}$, $\text{H}_3\text{CSO}_3\text{K}$,
 $\text{H}_3\text{CSO}_3\text{NH}_4$, $(\text{H}_3\text{CSO}_3)_2\text{Mg}$, $(\text{H}_3\text{CSO}_3)_2\text{Ca}$,
 $(\text{H}_3\text{CSO}_3)_2\text{Ba}$, $\text{H}_3\text{CSO}_3^- (\vee)_i$, сил.пост.)

Gerding H., Maarsen J.W.,
 Recueil trav.chim., 1958, 77,
 N 5, 374-382 (англ.)

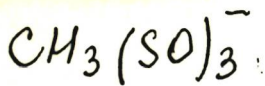
Спектры комбинационного рассеяния ...

РХ., 1959, N 2,
 3600

W



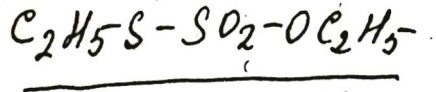
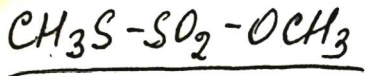
CSH_4O_3



B90-1579-IV	1959
-------------	------

Vi
снл.
носії.

Fujimori K.,
Bull. Chem. Soc. Japan,
1959, 32, №6, 621-623



Bop-542-IV | 1961

Simon A., Kunath D

Vi

Chem Ber., 1961, 94, N7,
1171-1784.

C₂SH₆O

БФ-М940-IV | 1961

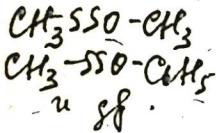
(7)

Вукесов Ф. У.,
Курдашов Б. П.

Докл. АН СССР, 1961,
140, № 6, 1364-67

SO-

1963



у

9 Д244. Колебания SO-группы в алкил- и арилтиосульфоксидах. Ghersesti S., Modena G. Vibrational behaviour of the SO-group in alkyl- and aryl-thiosulphoxides. «Spectrochim. acta», 1963, 19, № 11, 1809—1814 (англ.)

Исследованы ИК-спектры в области $4000-650 \text{ см}^{-1}$ $\text{CH}_3-\text{SSO}-\text{CH}_3$, $\text{CH}_3-\text{SSO}-\text{C}_6\text{H}_5$, $\text{C}_6\text{H}_5-\text{SSO}-\text{CH}_3$ и $\text{X}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{SSO}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{Y}$, где X, Y=H, CH_3 , CH_3O , Br, NO_2 . Полоса SO колебаний лежит при 1100 см^{-1} и идентифицирована по аналогии со спектрами других дисульфидов и тиосульфонов, а также по характеристич. чувствительности к влиянию растворителей. Обсуждается влияние природы растворителей на сдвиги ν_{SO} . Наблюдается удовлетворительная корреляция между ν_{SO} и константой Гамметта σ^+ . Библ. 17 назв. Э. Броун

ф. 1966. 97

$S_2O_5(CH_3)_2$

LA-5741

1963

$\lambda: 1508$

cal. wcm

Gillespie R.J., et al.
Spectrochim. acta. 1963,
19, 14, 741-6

1965

(CH₂)₄SO₂

3 Д298. Колебательные спектры и молекулярная конфигурация сульфолана. Katon J. E., Fearheller W. R., Jr. The vibrational spectra and molecular configuration of sulfolane. «Spectrochim. acta», 1965, 21, № 1, 199—201 (англ.)

Колебательные
спектры

Получены ИК-спектр поглощения (4000—80 см⁻¹) и спектр комб. рас. сульфолана (CH₂)₄SO₂. Приведены частоты наблюдаемых полос, оценены их интенсивности и предложено приблизительное отнесение. Из анализа спектра следует, что кольцообразная молекула сульфолана неплоская.

С. Станкевич

4. 1966. 38

$\text{H}_2\text{SO}_3 \cdot \text{CH}_3$

Chackabackal S. M.,
Stafford F. B.

1966

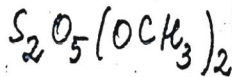
364

(U.K.)

J. Amer. Chem. Soc., 88, n 21,
4815.

Инфракрасные спектры
поглощения метана,
фтор. - и хлорсиль -
фторовой кислот (см $\text{H}_2\text{SO}_3\text{Cl}$) III

1966



ν_i

силовые
посл.

+3

2 Д243. Исследования пиросульфорилов. I. Колебательные спектры пиросерниокислых эфиров и алкансульфокислых ангидридов. Simon Arthur, Pischtschan Alfred. Untersuchungen an Pyrosulfurylverbindungen. I. Schwingungsspektren von Pyroschwefelsäureestern und Alkansulfogsäureanhydriden. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1966, 344, № 1—2, 1—9 (нем.; рез. англ.)

Исследованы спектры комб. рас. и ИК-спектры $S_2O_5(OCH_3)_2$ (I), $S_2O_5(OCH_3)CH_3$ (II), $S_2O_5(CH_3)_2$ (III) и $S_2O_5(C_2H_5)_2$ (IV). Проведено отнесение частот к норм. колебаниям. Анализ спектров подтверждает тождество молекулярных структур I—IV со структурами дисульфурилгалондов. Получены значения силовых постоянных вдоль S—O-связи (f), взаимодействия двух S—O-связей (f'), угловая SOS постоянная (d) и порядки S—O-связей (N) для I и III соответственно: f — 3,34 и 3,01; f' — 0,4 и 0,3; d — 0,82 и 0,74; N — 0,8 и 0,7. Библ. 49 назв. Э. Броун

ф. 1967. 2Д

Д

1966

Correspondence

Ceph

Ceph

high S-O

Pyrosulfuryl compounds. I. Vibrational spectra of pyrosulfuric acid esters and of alkanesulfonic acid anhydrides. Arthur Simon and Alfred Pischtschan (Tech. Univ., Dresden, Ger.). *Z. Anorg. Allgem. Chem.* 344(1-2), 1-9(1966)(Ger). The Raman and ir spectra of $\text{S}_2\text{O}_5(\text{OMe})_2$, $\text{S}_2\text{O}_5(\text{OMe})\text{Me}$, $\text{S}_2\text{O}_5\text{Me}_2$, and $\text{S}_2\text{O}_5\text{Et}_2$ are reported. The frequencies observed are assigned to the normal vibrations. The mol. structure of these compds. is sym., and the same as that of the disulfuryl halides. Force consts. and bond orders for the S-O bond in the S-O-S chain are calcd. 49 references. C. Olivier-Rutgers

C.A. 1966. 65. S

6514 g

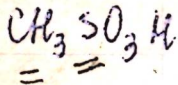
Vi, curiolus roer (*Zinnia*) 1967

Carter J. H., Freeman J. M.,
Henshall T.

J. molec. Spectrosc, 1967, 22, v1, 18-22

Group vibrations and the vibrational ^(cm⁻¹)
analysis of molecules containing
methyl groups. Part II Dimethyl
sulfone

Pr Xim, 1968, 15-151.



1981
2) 6 Б1063. Ионизация метансульфокислоты в водном растворе при 25° из измерений ПМР. Covington A. K., Lilley T. H. Ionization of methanesulphonic acid in aqueous solution at 25° C by proton magnetic resonance measurements. «Trans. Faraday Soc.», 1967, 63, № 7, 1749—1753 (англ.)

Методом ПМР определена степень ионизации (α) метансульфок-ты (I) в ее водн. р-рах в интервале конц-ий I от 0,63 до 15,04 М. В этом интервале конц-ий α I уменьшается от 0,958 до 0,010. Константа ионизации I (K), рассчитанная с использованием стехиометрич. коэф. активности, опубликованных ранее (РЖХим, 1964, 14Б694), найдена равной 16 ± 2 . Значение K намного меньше полученного из данных метода комб. расс. света, $K = 73 \pm 6$ (см. РЖХим, 1967, 22Б129). Анализируются причины расхождений в величинах K, найденных методом ПМР и комб. расс. света. А. С. Соловкин

X. 1968. 6

$(CH_2)_4SO$

1968

11 Д295. Колебательные спектры тетраметиленсульфоксида. Klaboe Peter. The vibrational spectra of tetramethylene sulphoxide. «Acta chem. scand.», 1968, 22, № 1, 369—371 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения ($4000-240\text{ см}^{-1}$) жидкого и твердого тетраметиленсульфоксида и его спектр комб. рас. с оценкой степени деполяризации линий. Показано, что молекула не принадлежит к точечной группе симметрии C_{2v} . Произведена интерпретация спектров на основании предположения о принадлежности молекулы к группе C_2 . В области ниже 1500 см^{-1} найдено 22 фундаментальных полосы, в том числе очень интенсивная полоса валентного колебания $S=O$ (1023 см^{-1}).

А. Белозеров

09: 1968 · 11A

$(CH_2)_4SO$

1968

(u, v, w)

91384w The vibrational spectra of tetramethylene sulfoxide.
Peter Kjaeboe (Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Acta Chem. Scand.*

22(1), 369-71(1968)(Eng). The ir and Raman spectra of tetra-
methylene sulfoxide were detd., and the fundamental vibrations
are tentatively assigned to the various peaks on the spectra.

CNJV

C.A. 1968. 68. 20

1968

 $(CH_3)_2SO_3$

Vi

72400y Vibrational spectra of dimethyl sulfite. Klaeboe, Peter (Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Acta Chem. Scand.* 1968, 22(9), 2817-21 (Eng). The ir spectra of dimethyl sulfite as a liq. and as a solid at -180° were recorded in the region 4000-220 cm^{-1} . A Raman spectrum of the liq. sample was obtained and polarization data are presented. The spectra have been interpreted in terms of C_s symmetry. Tentative assignments of the skeletal vibrational modes are proposed. RCMW

C.A. 1969. 70. 16

1968

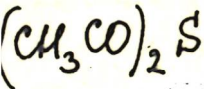
 $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_3$

9 Д324. Колебательные спектры диметилсульфита.
Klaeboe Peter. The vibrational spectra of dimethyl
sulphite. «Acta chem. scand.», 1968, 22, № 9, 2817—2821
(англ.)

Исследованы ИК-спектры поглощения жидкого диметилсульфита (I) и твердого I при $t_{\text{ре}} -180^\circ\text{C}$ в области $220-4000\text{ см}^{-1}$, а также спектры комб. рас. жидкого образца. Проведены измерения поляризации. Исходя из предположения о том, что I относится к точечной группе симметрии C_s и сравнения полученных спектральных данных с анализом колебаний для диметилсульфоксида и структурного сходства с диметилкарбонатом дано отнесение частот. Библ. 11.

Н. А. С.

ф. 1969. 9А



1968

11 Д179. Дипольный момент и конформация молекулы $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{S}$. Markgraf J. Hodge, Lee George A., Skinner James F. The electric dipole moment and conformation of acetyl sulfide. «J. Phys. Chem.», 1968, 72, № 6, 2276—2277 (англ.)

Дипольный момент молекулы $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{S}$, измеренный при 25° С в бензоле, равен $2,76 \pm 0,06$ ед. Дебая.

ф. 1968. 11 Д

1969

 C_2H_4SO

21 Б295. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент этиленэписульфоксида. Saito Shuji. The microwave spectrum, structure, and dipole moment of ethylene episulfoxide. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1969, 42, № 3, 663—666 (англ.)

Исследованы вращательные МВ-спектры этиленэписульфоксида C_2H_4SO (I) и его изотопич. разновидностей $C_2H_4^{34}SO$ (II) $^{13}CC_2H_4SO$ (III) в основном колебательном состоянии. Идентифицированы линии 17 переходов I и по 3 перехода II и III, из частот к-рых определены вращательные постоянные A, B, C I, и B, C II и III, а также центробежные постоянные D_J и D_{JK} I. По штарковскому расщеплению линий $1_{01} \leftarrow 0_{00}$ ($M=0$) и $2_{02} \leftarrow 1_{01}$ ($M=0,1$) найдены компоненты дипольного момента $\mu_a =$

м.и.

полн. стр-ма

X. 1969. 21

$=3,61 \pm 0,04$, $\mu_s = 0,89 \pm 0,01$ D и суммарный дипольный момент $\mu = 3,72 \pm 0,04$ D 1. Из A, B, C I и B, C II вычислены структурные параметры I, $SO = 1,483$, $CS = 1,822 \pm 0,003$ Å, $OSC = 111^\circ 1'$ и $CSC = 48^\circ 46' \pm 10'$. При этом использованы значения длины связи CH и углов HCH и HCC этилен сульфида. Длины связей C—S и S—O сопоставлены с соотв-щими величинами других сульфосоединений.

М. Р. Алиев

90505.3978

XIV-9791

1969

Sh, Ph

41125

(CH₂)₃S (Ti, Сгукбурз)
(CH₂)₃S

White side J.A.B. Warsop P.A. The elec-
tronic spectrum of trimethylene sulfide.
"J. Molec. Spectrosc.", 1969, 29, N 1,
1-12

1041 пик (англ.)

1020 1022

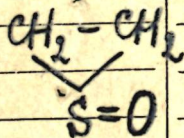
1049

ВИНИТИ

C₂SH₄O

XIV-2331

1969



Spay. vaci.

34733x Rotational spectrum of ethylene episulfoxide. White, William F.; Wollrab, James E. (Langley Res. Center, NASA, Hampton, Va.). *Chem. Phys. Lett.* 1969, 3(1), 25-6 (Eng). The rotational spectrum of ethylene episulfoxide was assigned in order to det. the mol. structure and, in particular, the orientation of the SO band with respect to the C₂S ring. Strong *a*- and *c*-type transitions were observed, but no *b*-type lines with $J \leq 6$ were found. This observation is consistent with Raman data which predict a mol. with C_s symmetry. From assumption of reasonable parameters, the 3 ground state moments of inertia were calcd. and used to obtain bond lengths and bond angles in the *r*₀ structure of ethylene episulfoxide. The ring structure of the mol. appears to agree quite well with that found in ethylene sulfide.

R. T. O'Connor

C. A. 1969.

41.8

СН₂ S₂

XIV-2331

1969

Вращательный спектр

9 Д400. Вращательный спектр этиленэписульфоксида. White W. F., Wollrab J. E. Rotational spectrum of ethylene episulfoxide. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 1, 25—26 (англ.)

Исследован вращательный спектр молекулы этиленэписульфоксида в основном состоянии. Наблюдены интенсивные переходы α - и σ -типа, характерные для почти вытянутого волчка. Полученные результаты соответствуют данным по спектрам ЯМР и комб. рас. в предположении C_s -симметрии молекулы. Определена r_0 -структура молекулы. Дипольный момент равен 3,66 ед. Дебая. Г. П.

ф. 1969. 98

C-S-H-O

1970

 CH_3SO_3^-
 CD_3SO_3^-

ИК-спектр

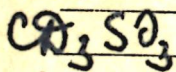
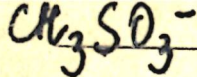
15 Б201. Инфракрасные спектры и анализ в нормальных координатах солей с анионами X_3CSO_3^- ($\text{X}=\text{H}, \text{D}, \text{F}, \text{Cl}$). Bürger H., Burgczyk K., Blaschett A. Infrarot-Spektren und Normalkoordinatenanalyse von Salzen mit den Anionen X_3CSO_3^- ($\text{X}=\text{H}, \text{D}, \text{F}, \text{Cl}$). «Monatsh. Chem.», 1970, 101, № 1, 102—119 (нем.; рез. англ.)

Исследованы ИК-спектры MeSO_3 (I), CD_3SO_3 (II), CF_3SO_3 (III), CCl_3SO_3 (IV), MePO_3 (V) и CD_3PO_3 (VI); проведено отнесение полос, подтвержденное спектром КР $\text{Ag}(\text{CF}_3\text{SO}_3)$. Для I—VI проведен анализ в нормальных координатах при одном и том же силовом поле. В колебаниях симметрии A_1 I, II, V и VI доминирует одна координата, в то время как для III и IV распределение потенциальной энергии указывает на смешение координат в кол. SCF_3 и SCCl_3 . Характерная полоса вал. кол. связи CS в спектрах не наблюдается. М. Дейчмейстер

X: 1970. 15

+3





chem. voc.

C.A. 1970. 72. 20

1970

105434j Infrared spectra and normal coordinate analysis of compounds with the anions CX_3SO_3^- ($\text{X} = \text{H}, \text{D}, \text{F}, \text{Cl}$). Buerger, Hans; Burczyk, K.; Blaschette, A. (Inst. Anorg. Chem., Tech. Univ., Brunswick, Ger.). *Monatsh. Chem.* 1970, 101(1), 102-19 (Ger). The ir spectra of several salts contg. the anions MeSO_3^- , CD_3SO_3^- , CF_3SO_3^- , and $\text{CCl}_3\text{SO}_3^-$, and Raman data for $\text{Ag}[\text{CF}_3\text{SO}_3]$, are reported. A normal coordinate anal. by using the generalized valence force field was made for the above anions, as well as for MePO_3^{2-} and $\text{CD}_3\text{PO}_3^{2-}$. The A_1 modes of CF_3SO_3^- and $\text{CCl}_3\text{SO}_3^-$ were mixed; no characteristic CS stretching vibration occurred. BTJG

C-S-O

сп. сог.

1970

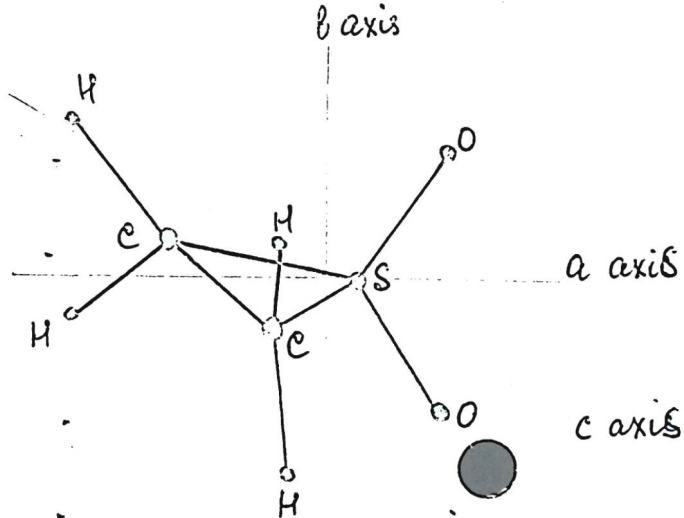
8 Б87. Молекулярная спектроскопия с помощью рентгеноэлектронного метода. II. Соединения серы. Корреляция энергии связи электронов со структурой. Lindberg B. J., Hamrin K., Johansson G., Gelius U., Fahlman A., Nordling C., Siegbahn K. Molecular spectroscopy by means of ESCA. II. Sulfur compounds. Correlation of electron binding energy with structure. «Phys. scr.», 1970, 1, № 5—6, 286—298 (англ.)

сп. сог.

Методом рентгеноэлектронной спектроскопии исследованы энергии $2p$ -электронов S в 136 орг. и неорг. соединениях серы. В этих же соединениях получены спектры $1s$ -электронов O и N. Рассмотрена корреляция сдвигов энергии связи $2p$ S с зарядом атома серы в хим. соединениях. Оценена полярность связи S—O в сульфоксидах, сульфонах; сульфинатах, сульфонатах и в сложных

X. 1971. 8

эфирах сернистой и серной кислоты. В этих соединениях связь $S-O$ имеет полярность, промежуточную между чистой полуполярной связью S^+-O^- и чистой двойной связью $S=O$. На основе малого заряда серы в сульфониевых соединениях предположена ассоциация ряда соединений в бимолек. структуры. Приведен ряд примеров определения структуры соединения на основе сдвигов в рентгеноэлектронных спектрах. Сообщ. I см. РЖХим, 1970, 4Б168. В. И. Нефелов



Principal axes in, CH_3OH molecule

C-S-H-O

XIV-1946

1940

- 21 Б244. Микроволновый спектр этиленэписульфона.
Nakano Yuji, Saito Shuji, Morino Yonezo.
Microwave spectrum of ethylene episulfone. «Bull. Chem.
Soc. Jap.», 1970, 43, № 2, 368—371 (англ.)

Исследованы МВ-вращательные спектры молекулы
этиленэписульфона (I) ($8230,87-32\,073,25$ Мгц, $0 \leq J \leq 5$), а также его C^{13} —(II) ($15\,957,48-31\,356,00$ Мгц, $1 \leq J \leq 4$) и S^{34} —(III) ($16\,937,96-27\,426,90$ Мгц, $1 \leq J \leq 3$) — изотопозамещенные молекулы в основном
колебательном состоянии. Определены вращательные по-
стоянные: для I $A=6676,58 \pm 0,2$, $B=4924,28 \pm 0,1$, $C=$
 $=3760,15 \pm 0,1$, для II $A=6623,35 \pm 2,0$, $B=4815,91 \pm 0,1$,
 $C=3713,86 \pm 0,1$, для III $A=6673,87 \pm 2,0$, $B=4918,66 \pm 0,1$,
 $C=3757,57 \pm 0,1$ Мгц. Из анализа МВ-спектров сделан

м.и.

мол. спектр

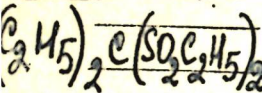
X: 1940. 21

вывод, что молекула I имеет симметрию C_{2v} . При использовании величин $r(C-H)=1,078$ А и $\angle HCH=116^\circ 0'$, $\angle H_2CC=151^\circ 43'$ из молекулы этиленсульфида найдены следующие метрич. параметров молекулы I: $r(S-O)=1,439 \pm 0,006$, $r(C-S)=1,731 \pm 0,006$, $r(C-C)=1,590 \pm 0,011$ А, $\angle OSO=121^\circ 26' \pm 30'$, $\angle CSC=54^\circ 40' \pm 15'$. Определен дипольный момент молекул I $\mu=4,41 \pm 0,05$ D; он направлен по оси a .
А. Александров

C-S-H-O-coeq.

XIV-1946

1970



Этилсульфон;
микропол.
спектр.

~~126994g~~ Microwave spectrum of ethylene sulfone. Nakano, Yui; Saito, Shuji; Morino, Yonezo (Sagami Chem. Res. Center, Kanagawa, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1970, 43(2), 368-71 (Eng). Microwave spectra of normal, ^{13}C -, and ^{34}S -isotopic species of ethylene sulfone have been investigated. Anal. of the spectra shows that the mol. has C_2 symmetry. The structural parameters obtained from the spectral data for normal and ^{13}C ethylene sulfone are: $r(C-C) = 1.590 \pm 0.011$ Å, $r(C-S) = 1.731 \pm 0.006$ Å, $r(S-O) = 1.439 \pm 0.006$ Å, $\angle CSC = 54^\circ 40' \pm 15'$, and $\angle OSO = 121^\circ 26' \pm 30'$, on the assumption that the C-H distances and the $\angle HCH$ and $\angle H_2CC$ angles are the same as those of ethylene sulfide. Stark-effect measurements have yielded a value of 4.41 ± 0.05 D for the dipole moment along the a axis. The structure obtained has been compared with those of other related mols. RCQC

C. A. 1970. 72.24

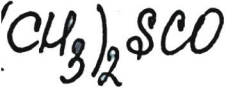
C-H-S-O

соедин.

1971

(65816) Spectroscopic behavior of organic sulfur compounds.
3. The vibrational spectra of simple sulfides, sulfoxides, and sulfones at $500-1500\text{ cm}^{-1}$. Brunn, Joachim; Doerffel, Klaus (Sekt. Verfahrenchem., Tech. Hochsch. Chem. "Carl Schorlemmer," Leuna-Merseburg, Ger.). *Wiss. Z. Tech. Hochsch. Chem. "Carl Schlorlemmer" Leuna-Merseburg* 1971, 13(2), 101-8 (Ger). The ir vibrational spectra of 159 sulfides, sulfoxides, and sulfones at $500-1500\text{ cm}^{-1}$ are given. Frequencies are tabulated for various mol. fragments. M. Elmslie

C.A. 1972. 46. 12

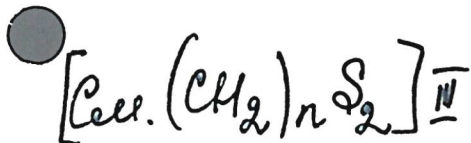


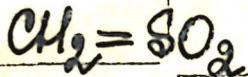
Yamabe-H.
at all

1977

zn.
ср.-цел;
(пацери)

Bull. Chem. Soc. Jap.
1977, 50, 3, 604-10





1971

8 Б370. Импульсный термолиз. Реакционная способность и спектр инфракрасного поглощения сульфена. King J. F., Marty R. A., Mayo P. de, Verdun D. L. Flash thermolysis. The reactivity and infrared spectrum of sulfene «J. Amer. Chem. Soc.», 1971, 93, № 23, 6304—6305 (англ.)

2i

Измерен спектр ИК-поглощения в области 600—4000 cm^{-1} $\text{ClSO}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ (I) и $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{OSO}_2\text{CH}_3$ (II), осажденных на подложку при -196° и подвергнутых затем импульсному термолизу. По ИК-спектру обнаружено

+2

X. 1972. 8



Образование $\text{CH}_2=\text{SO}_2$ в обоих случаях. К кол. $\text{CH}_2=\text{SO}_2$ отнесены полосы: 3170, 3040, 1330, 1230 и 350 см^{-1} . При нагревании подложки эти полосы исчезают, взамен появляются полосы метансульфонилхлорида. При аналогичных опытах по осаждению I и II в смеси с CH_3OH и последующем импульсном термоллизе, также зафиксировано появление полос сульфена 1330 и 1230 см^{-1} , к-рые исчезают при нагревании подложки до -155° , и появляются полосы метилметансульфоната.

Г. Кузьянц

$C_2H_4SO_2$

1972.

2 Б274. Микроволновой спектр, структура и дипольный момент сульфона этилена. Kim Hyunyoung. Microwave spectrum, structure, and dipole moment of ethylene sulfone. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 3, 1075—1077 (англ.)

Уолл.

Измерены МВ спектры сульфона этилена с S^{32} и S^{34} . Определены вращательные постоянные A , B и C : 6676,06; 4924,01 и 3759,97 МГц для S^{32} и 6679,20, 7917,07 и 3757,64 МГц для S^{34} . Определены структурные параметры сульфона этилена: $r_{S-O}=1,42\pm0,02$ А, $r_{C-C}=1,586\pm0,01$ А, $r_{C-S}=1,76\pm0,02$ А и $\angle OSO=124\pm2^\circ$ (в предположении, что r_{C-H} , $\angle HCH$ и $\angle H_2CC$ имеют те же значения, как в сульфиде этилена). Измерение штарк-эффекта для двух переходов $2_{02}-3_{02}$ и $2_{12}-3_{13}$ дает для дипольного момента сульфона этилена величину $4,47\pm0,02$ D. Г. Кузьянц

Х. 1973. № 2.

C-H-O-S

1942

81528t Microwave spectrum, structure, and dipole moment of ethylene sulfone. Kim, Hyunyong (Dep. Chem., Univ. Missouri, Columbia, Mo.). *J. Chem. Phys.* 1972, 57(3), 1075-7 (Eng). The microwave rotational spectra of the ^{32}S and ^{34}S isotopic species of ethylene sulfone were obsd. The rotational consts. A , B , and C in MHz are: 6676.06, 4924.01, and 3759.97 for the ^{32}S species; and 6679.20, 4917.07, and 3757.64 for the ^{34}S species. The structural parameters obtained are $r(\text{S-O}) = 1.42 \pm 0.02 \text{ \AA}$, $r(\text{C-C}) = 1.586 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $r(\text{C-S}) = 1.76 \pm 0.02 \text{ \AA}$, and $\angle \text{OSO} = 124 \pm 2^\circ$, with the assumption that the C-H distance and $\angle \text{HCH}$ and $\angle \text{H}_2\text{CC}$ angles are the same as those of ethylene sulfide. From the measurements of Stark shifts, the dipole moment was detd. to be $4.47 \pm 0.02 \text{ D}$.

C.A. 1942. 44. 12

1972

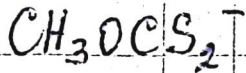
$(\text{CH}_3\text{O})_2\text{SO}$

Lavalley Jean-Claude,
Saur Odette.

(Vi)

"J. Chim. phys. et phys.-chim.
biol.", 1972, 69, n° 7-8,
1149-1953;

J. Chim. CH_3ONO , III J.



1973

Mattes R,
Paulickhoff G.

"Spectrochim acta"

1923, A29, N7, 1339-44.

vi

(*chem.* K[CH₃OCS₂]; III)

1973

24 Б110. Электронографическое исследование строения молекулы тетраметилсульфона. Наумов В. А., Семашко В. Н., Шайдулин С. А. «Ж. структур. химии», 1973, 14, № 4, 595—599

Методом газовой электронографии изучено строение молекулы тетраметилсульфона. Наилучшее согласие с эксперим. получено для моделей типа конверт (I) и полукресла (II), однозначный выбор между которыми оказался невозможным. В предположении конформаций I и II найдены след. значения межъядерных расстояний (А) и углов: для I C_2-C_3 1,537, C_3-C_4 1,532, $S=O$ 1,450, $C-S$ 1,797, OSO 114,5°, CSC 101,4°, CCS 104,1°, CCC 114,0°, CSO 110,0°, ϕ (угол, характеризующий неплоскостность цикла) 164,6°; для II C_2-C_3 1,540, C_3-C_4 1,533, $S=O$ 1,449, $C-S$ 1,798, OSO 114,7°, CSC 101,1°, CCS 104,3°, CCC 111,1°, CSO 110,0°, ϕ (угол, характеризующий неплоскостность цикла) 14,3°.

В. Спиридонов

Ж. 1973 N 24

X (1) Емрбу

C-H-SO (соедин.)

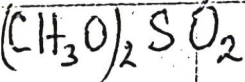
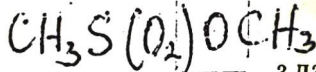
1973

~~6-Д52Г.~~ Микроволновый спектр 1,1-диоксида тиета.
Ralowski Wiktor, Ljunggren Stig, Mjö-
berg Johan. Microwave spectrum of thieta 1,1-dioxide.
«Acta chem. scand», 1973, 27, № 8, 3128—3130 (англ.)

В диапазоне 26 500—40 000 Мгц впервые измерен микроволн. спектр молекулы тиенсульфона. Идентифицированы линии вращательных переходов в основном колебательном состоянии и в четырех низколежащих колебательных состояниях. Определены значения вращательных постоянных для основного и возбужденных состояний. По относит. интенсивности линий основного и возбужденных состояний оценены частоты трех НЧ-колебаний: 184, 303 и 392 см⁻¹. Полученные значения вращательных постоянных основного состояния согласуются с их значениями, вычисленными по рентгенографич. данным для структурных параметров. М. Р. Алиев

м. в. смирн

Ф. 1974/6, последнее стр № 8 — 2892



3 ДЗ73 ДЕП.

ИК-спектры, дипольные моменты и строение метилметансульфоната и диметилсульфата. Ремизов А. Б., Бутенко Г. Г. (Редколлегия «Ж. прикл. спектроскопии» АН БССР). Минск, 1973. 14 с., ил., библиогр. 19 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 21 ноября 1973 г., № 7356—73 Деп.)

Изучены ИК-спектры (в газообразном, жидком и кристаллич. состоянии) и дипольные моменты, (ДМ) метилметансульфоната (I) и диметилсульфата (II) $[\text{CH}_3\text{S}(\text{O}_2)\text{OCH}_3$ и $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{SO}_2]$. Кристаллич. состояние получалось замораживанием жидкой пленки между пластинками из KBr и конденсацией паров на пластинку из AgCl, охлажденную до порядка -160°C . Исследование ИК-спектров позволяет заключить, что в жидкости и растворах I и II находятся преимущественно в одной конформации. Рассчитаны параметры вращательно-колебательных полос ИК-спектров и ДМ ряда возможных конформаций I и II; эти величины сопоставлены с эксперим. данными (ДМ I (раствор CCl_4) равен 3,75 Д, II—4,08 Д). Показано, что для I наиболее вероятно транс-

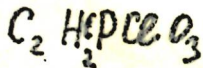
спектр. в.

Р. 1974 МЗ

1973

расположение групп CH_3 относительно связи S—O , а для II — *транс-цис*- либо *транс-гош*-расположение групп CH_3 и биссектрисы угла O=S=O относительно связей S—O . Отмечено, что в ИК-спектрах I и II отсутствует линейная зависимость полос $\nu_s(\text{SO}_2)$ и $\nu_{as}(\text{SO}_2)$ от фазового состояния. В спектрах кристаллич. I и II наблюдается зависимость контуров и относит. интенсивностей полос от условий кристаллизации, наиболее подробно это рассмотрено для полос $\nu_s(\text{SO}_2)$ и $\nu_{as}(\text{SO}_2)$. Относит. интенсивность полосы $\nu_s(\text{SO}_2)$ в спектре кристаллического II значительно уменьшается.

Автореферат



Di

X. 1974.

N1

1973

1 Б268. Колебательные спектры и строение этиленсульфита и этиленхлорфосфита. Ремизов А. Б., Козлова Р. И., Вахрушева Н. Н., Маннафов Т. Г. «Ж. прикл. спектроскопии», 1973, 19, № 1, 109—117

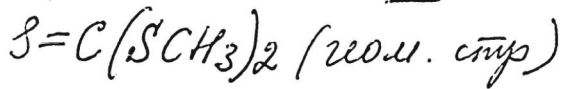
Измерены ИК-спектры ($3600-400\text{ см}^{-1}$) этиленсульфата (I) и этиленхлорфосфита (II) в газ., жидк. и крист. (при -150°) состояниях. в р-рах CCl_4 и CS_2 и в матрице из CS_2 . Исследовано влияние т-ры на ИК-спектры жидкостей. Измерен также спектр КР I в области $3200-100\text{ см}^{-1}$. Показано, что в спектрах жидкостей и р-ров I и II нет такой зависимости относит. интенсивности полос от т-ры и от полярности р-рителя, к-рая говорила бы о наличии конформац. равновесия, не происходит «вымораживания» полос при кристаллизации, а наблюдается лишь расщепление полос и изменение их относит. интенсивности по сравнению с жидкостью, связанное с крист. эффектами. Сделан вывод, что I и II в жидкости и р-ре находятся преимущественно в одной конформации. Проведен расчет частот и форм нормаль-

⊗ (77)

ных колебаний I в трех различных конформациях: плоской (n), аксиальной (a) и экваториальной (e) с углом изгиба кольца 35° . В качестве нулевого приближения были использованы силовые постоянные триметиленсульфита, к-рые затем варьировались. Расчет показал, что спектры трех конформаций I не должны существенно различаться (были приняты во внимание лишь кинематич. различия, а силовое поле для всех конформеров было взято одинаковым). Дано отнесение колебаний I на основании контуров ИК-полос в газе, поляризации линий КР и результатов расчета. Анализ контуров ИК-полос I и II в газ. состоянии привел к заключению, что e -конформация в I и II маловероятна. Этот вывод согласуется с электронографич. данными для I, но не подтверждается такими данными для II. Е. Разумова

XIV 6500

1974



Almenningen A., Fernholt L., Seip H. M.,
Henriksen L.

Acta chem. scand, 1974, A 28, N 9, 1037-
1040 (chem)

10 (9)

H₂C5Q

Bp-1609-XII

1974

Bernardi F; et al.

M. N.
reconceptus

An. quin. Real. soc.
esp. fis. y quin.,

1974,



40, N12,

1199-1203.

TC

Ch

1828

 $(CH_2)_3$

SO

M. S. Chernykh

29357

1974

* 4-6612

Bel'van John W., Legon Anthony C., Millen
D. James. Tilts, bends, and twists of me-
thylene groups in four-membered rings.
Evidence from the microwave spectrum of
trimethylene sulphoxide.
"J. Chem. Soc. Chem. Commun", 1974,-
N 16, 659-660 (англ.)

0209 ДИК

177 180 201

ВИНИТИ

40909.6615

 $(CH_2)_2$ 50009 03

1974

TC, Ch, Ex-C

* 4-6175

Bock Hans, Solouki Bahman. Photoelektro-
nenspektren und Moleküleigenschaften,
XXXV. Sulfoxide X_2SO -Beispiele für den
Nutzen von Korrelationsdiagrammen bei der
Diskussion von Substituenteneffekten und
von geometrischen Störungen. "Chem. Ber.",
1974, 107, N 7, 2299-2318

0187

(ном., рез. англ.)

149 149

- 1 73

ВИНИТИ

40909.6615

 $(CH_3O)_2SO$

03

1974

TC, Ch, Ex-C

*4-6175

Bock Hans, Solouki Bahman. Photoelektro-
nenspektren und Moleküleigenschaften,
XXXV. Sulfoxide X_2SO -Beispiele für den
Nutzen von Korrelationsdiagrammen bei der
Diskussion von Substituenteneffekten und
von geometrischen Störungen. "Chem. Ber.",
1974, 107, N 7, 2299-2318

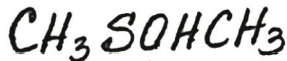
0187

(нем., рез.англ.)

149 149

= 170

ВИНИТИ



1974

139436s Flash photolysis of dimethyl sulfoxide. Koulkes-

Pujo, A. M.; Barat, F.; Mialocq, J. C.; Sutton, J. (CNRS, Gif-sur-Yvette, Fr.). *J. Photochem.* 1974, 2(6), 439-50 (Eng). Flash photolysis of dimethyl sulfoxide in aq. soln. produces 2 transient species resulting from excitation rather than photo-ionization processes. In alk. media the less stable species, $\text{CH}_3\text{SOHCH}_2$, ionizes, with $10.3 \geq \text{pK}_a \geq 11.3$. In neutral solns. the rate const. for decay of this species is $(3.0 \pm 0.3) \times 10^3/\text{sec}$. The 2nd species, stable under the exptl. conditions used, is $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{H}$.

и и н у л с н .
г р о т о м з

C.A. 1974. 80. N24

1974
HCOSH

CH₃CO₂SH

HCS₂H

суперк.
напом., Vi
m. g. g.

149218m Hydrogen bonding, tautomerism, and normal vibrations of thiol acids. Kandhawa, H. S.; Rao, C. N. R. (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Kanpur, India). *J. Mol. Struct.* 1974, 21(1), 123-34 (Eng). By using the complete-neglect-of-differential-overlap (J.A. Pople, et al., 1965) and extended-Hueckel (R. Hoffman, 1963) MO methods, H-bonding was studied in HCOSH, MeCO₂SH, and HCS₂H. The H bonds formed by both the hydroxy and the thiol forms were examined. Cyclic dimers of the hydroxy form are more stable, as in carboxylic acids, whereas the open dimers are more stable in the case of the thiol form. Dithioformic acid forms very weak H bonds compared to the thiol acids. For the hydroxy and thiol forms of HCOSH as well as for the thioformate ion, vibrational assignments were made based on a normal-coordinate vibrational anal. The thermodyn. functions at 100-600°K were calcd. for the thioformate ion and the thiol and hydroxy forms of HCOSH.

41 ☒

C.A. 1974. 80. N 26

CH_3COSH

1975

12 Д348. Колебательный анализ тиоуксусной кислоты. Crowder G. A., Robertson E., Potter K. Vibrational analysis of thiolacetic acid. «Can. J. Spectrosc.», 1975, 20, № 2, 49—51 (англ.; рез. франц.)

(J_i) По модифицированной 23-параметрич. модели валентного силового поля выполнен анализ норм. координат тиоуксусной кислоты. Волн. числа колебательных частот для цис- и трансизомеров различаются на 10—30 см^{-1} . Приведены значения силовых постоянных молекулы. Получены ИК-спектры поглощения твердой CH_3COSH при 77° K и предложено полное отнесение фундаментальных колебательных частот. Частоты колебаний νSH и δCSH , равные соответственно 2566 и 838 см^{-1} в жидкой фазе, в твердом состоянии составляют 2525 и 886 см^{-1} . Указанные изменения объяснены образованием в твердой CH_3COSH димеров с водородной связью. Предположено, что при нагревании водородные связи в димере разрываются с переходом циклич. димеров в открытые. Библ. 12. С. Ф. Б.

ф. 1975 № 12

$(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{S}$ Дец. 3185 1975

16 Б233. Колебательные спектры тиоангидридов. II. Диацетилсульфид. Fortunato Bruno, Giorgini Maria Grazia, Mirone Paolo. Vibrational spectra of thioanhydrides. II. Diacetyl sulphide. «J. Mol. Struct.», 1975, 25, № 2, 237—242 (англ.)

Получены ИК-спектры в тв. (-180°), жидк. и газ. состояниях и спектр КР в жидк. состоянии диацетилсульфида (I), измерены степени деполяризации линий КР. Изучены положение и интенсивность полос вал. кол. СО в р-рителях различной полярности. Найдено, что изменение t -ры от 20 до 100° не вызывает существенных изменений в спектрах жидкости; все полосы, найденные в спектрах жидкости, присутствуют в спектрах тв. состояния. На этом основании сделан вывод о том, что I существует в виде одного конформера, однако из-за возможности вращения СО-группы вокруг связи

колебат.
спектр

X 1975 N 16

C—S в каждом р-рителе осуществляется одна определенная конформация, отличающаяся от других величиной угла выхода из плоскости молекулы группы CO. Более полярный р-ритель стабилизирует более полярную форму. Сообщ. I см. пред. реферат. Т. Б. Ченская

л.

ле

C-H-S

1975

1 Д365. Электронная структура соединений, содержащих серу. Ч. XVI. Фотоэлектронные спектры этилен-тритиокарбоната и этилендитиокарбоната. Guimon Claude, Pfister-Guilouzo Genevieve. Electronic structure of sulfur compounds. XVI. Photoelectron spectra of ethylene trithiocarbonate and ethylene dithiocarbonate. «J. Electron. Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1975, 7, № 2, 191—195 (англ.)

(г) Получены фотоэлектронные спектры (He — 584 Å) этилен-тритиокарбоната (I) и этилендитиокарбоната (II). Предложена интерпретация полученных спектров. Вертикальные потенциалы ионизации I и II равны (в эВ): 8,40 (b_2), 8,87 (b_1), 9,42 (a_2), 11,42 (b_2), 12,05 (a_1), 12,6 (b_1), 12,85 (a_1) — I, 9,50 (b_2), 9,88 (a_2), 10,08 (b_1), 11,85 (b_2), 12,64 (a_1) — II. Отмечено хорошее согласие между экспериментальными и расчетными (по методу ППДП) данными.

Ю. В. Чижов

Ф 1976 №1

HCO₂SH

* 4-8083

1975

(сирфут.
м.н.)

177439. Determination of the structure of monothioformic
by microwave spectroscopy. Hocking, William H.;
Gibbert (Max Planck Inst. Radioastron., Bonn.,
Chem. Soc., Chem. Commun. 1975, (2), 63-4 (Eng).
and vibrational state rotational spectra of 2 planar
isomers of HCO₂SH, trans-HC(:O)SH and cis-HC(:O)SH,
and assigned in the microwave and mm wave regions;
isomers were not detected.

XIV - 6260

C.H. 1975. 82. N26

HCO SH

11 Б316. Определение структуры моноотиомуравьиной кислоты с помощью микроволновой спектроскопии. Hocking William H., Winnewisser Gisbert. Determination of the structure of monothioformic acid by microwave spectroscopy. «J. Chem. Soc. Chem. Commun», 1975, № 2, 63—64 (англ.)

1975

Исследованы МВ-спектры в основном колебательном состоянии двух плоских вращательных изомеров моноотиомуравьиной к-ты: транс-изомера $\text{HC}(:\text{O})\text{SH}$ (I) и цис-изомера $\text{HC}(:\text{Q})\text{SH}$ (II). Для обоих образцов определены моменты инерции и вращательные постоянные в Мгц, для I: $A=62036,112 \pm 0,019$; $B=6125,3056 \pm 0,0005$; $C=5569,6437 \pm 0,0005$ и для II: $A=62927,723 \pm 0,009$; $B=6134,2606 \pm 0,0008$; $C=5584,7539 \pm 0,0008$. Эффекты центробежного искажения в обоих случаях малы. При исследовании вращательного изомеризма идентифицировано несколько переходов с низкими J для ^{34}S образца и дейтерированного образца $\text{HC}(:\text{O})\text{SD}$. При ряде предположений относительно структурных параметров определено межъядерное расстояние CS для I: 1,760 Å, и для II: 1,760 Å, и угол связи OCS для I: $125,7^\circ$ и для II: $123,1^\circ$.

С. Н. Мурзин

5-8083
XIV-62360

x1975.11

51022.1228

Ph, Ch, TC

31603 сел. пос.

1975

 CH_3OCSO^-

* 4-10404

Mattes R., Scholten K. Schwingungsspektren und Kraftkonstanten in Monoalkylcarbonaten und Monoalkylthiocarbonaten.

"Spectrochim. acta", 1975, A31, N9-10, 1307-1315 (нем., рез. англ.)

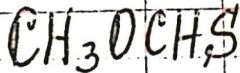
0481 пик

454 456 473

ВИНИТИ

* 13 - 8410

1975



14 Б103. Электронографическое исследование строения молекулы метилтионформата в газовой фазе. Rooij J. de, Mijlhoff F. C., Renes G. An electron diffraction study of the molecular structure of methylthionformate in the gas phase. «J. Mol. Struct.», 1975, № 1, 169—174 (англ.)

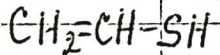
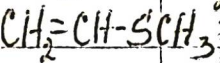
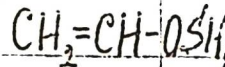
Методом газовой электронографии изучена структура молекулы CH_3OCHS . Установлено, что связи $\text{C}=\text{S}$ и $\text{O}-\text{CH}_3$ находятся приблизительно в затменном положении. Найдены след. значения межъядерных расстояний ($r_a, \text{\AA}$) и углов: $\text{C}-\text{O}$ 1,369 (0,003), $\text{C}=\text{S}$ 1,612 (0,003), $\text{C}-\text{H}$ 1,114 (0,009), $\angle \text{OCS}$ 126,6° (0,5), $\angle \text{OCSH}$ 106,7° (2,8), $\angle \text{OCH}_{\text{метил}}$ 110,8° (1,1), $\angle \text{COC}$ 115,5° (0,6), $\angle \text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H}$ (диэдрич. угол между плоскостями $\text{H}_{\text{метил}}\text{CO}$ и COC) 29,2° (3,1), $\angle \text{S}-\text{C}-\text{O}-\text{C}$ (диэдрич. угол между плоскостями SCO и COC) 15,8 (2,5)°.

В. Спиридонов

Молекуляр.
структ.

X. 1975. № 14

5059-11X



3 Б140. Потенциал вращения вокруг связей $\text{C}(sp^2)-\text{O}$ и $\text{C}(sp^2)-\text{S}$. Электронографические данные для $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OSiH}_3$ и $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{SCH}_3$ и неэмпирические расчеты $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OH}$ и $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{SH}$. Samdal S., Seip H. M. Potential for rotation about $\text{C}(sp^2)-\text{O}$ and $\text{C}(sp^2)-\text{S}$ bonds: electron diffraction results for $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{OCH}_3$ and $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{SCH}_3$ and ab initio calculations on $\text{CH}_2=\text{SH}-\text{OH}$ and $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{SH}$. «J. Mol. Struct.», 1975, 28, № 1, 193—203 (англ.)

Получены электронографич. данные для метилвинилового эфира (I) и метилвинилового сульфида (II). Установлено, что каждое соединение существует в виде смеси двух конформеров, один из к-рых представляет собой син-форму с плоским скелетом тяжелых атомов. Для I 2-й конформер также может иметь плоский скелет (анти-форма), хотя гош-форму с торсионным углом, близким к 180° , нельзя исключить. Для 2-го конформера II установлена гош-форма. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов:

геометрия
молекулы

X. 1976. № 3

1975

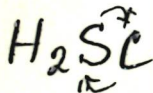
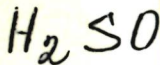
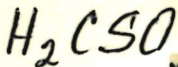
36443

(+1)



I, $C=C$ 1,341, C_2-O_3 1,360(3), C_4-O_3 1,428(3),
 C_1-H , C_2-H_5 1,088 (14), C_4-H 1,105 (14), $\angle$ COC
 $118,3(1,1)^\circ$, $\angle$ CCO $127,7(1,4)^\circ$, (значения углов CCO и
 COC соответствуют син-форме, а для анти-формы они
 на $1,5$ и $2,0^\circ$ соотв. меньше), OSH $114,8^\circ$ (1,2)°, φ
 (торсионный угол 2-го конформера) 180° , процент син-
 формы 73(2); II, $C=C$ 1,341(3), C_2-S_3 1,747(3),
 C_4-S_3 1,807(3), C_1-H , C_2-H_5 1,086(26), C_4-H
 $1,101(26)$, CSC $104,6$ (0,8)°, CCS $127,5(0,4)^\circ$, SCH
 $112,1(1,9)^\circ$, φ (торсионный угол 2-го конформера)
 $116(6,6)^\circ$, процент син-формы 38(7). Расчеты неэмпи-
 рич. методом МО ЛКАО ССП приводят к минимумам
 энергии для след. форм: син и анти (I) и син и гош (II).
 В. Спиридонов

1976

расчет
геометр
(м.и.)

✓ 19 Б16. Исследование соединений серы неэмпирическим методом ЛКАО ССП МО. I. Оптимизация геометрии и распределение заряда в сульфинах. Bernardi Fernando, Maccagnani Gaetano, Mangini Angelo. Ab-initio LCAO-SCFMO treatment of sulphur compounds. I. Geometry optimization and charge distribution of sulphines. «An. quim. Real soc. esp. fís. y quim.», 1974, 70, № 12, 1199—1203 (англ.; рез. исп.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ и 4-31ГФ рассчитаны молекулы H_2CSO (I), H_2SO (II) и H_2CS (III). Расчет I и III выполнен с оптимизацией геометрии; I — в базисе ОСТ-3ГФ, оптимизировались все длины связей, валентные углы и варьировался угол α , образованный плоскостью CH_2 и связью CS. Минимум энергии отвечает плоской конфи-



X, 1976, 19.

гурации атома С; для этой конфигурации I длины связей CS и SO, валентные углы CHS, HCH и CSO были уточнены расчетом в базисе 4-31ГФ, геометрия III оптимизировалась в базисе 4-31ГФ, для II использована эксперим. геометрия. Оптимизированная геометрия I сопоставлена с результатом проведенной ранее оптимизации в приближении ППДП и с имеющимися эксперим. данными. Рассчитанная длина связи SO 1,62 А заметно больше экспериментального значения 1,50. Проанализированы заряды на атомах и орбитальные заселенности в I—III и сделан вывод, что в I связь CS является полностью двойной, в то время как связь SO имеет частично двойной характер, напоминающий связь SO в II.

Фаустов

61112.8970
Ch, TC

05615
На ССО (рецензия, 1976
лекция № 15 15267
стр. 19)

Flood E., Boggs J.E.

Geometries and electronic structures
of sulfine and thioformaldehyde.

"J. Mol. Struct.", 1976, 34, N 1, 147-151

(англ.)

0749 пнк

709 712 741

ВИНИТИ

Рис. 423

$\text{HC}(:\text{O})\text{SH}$

XU-13873

1976

11 Д511. Вращательный спектр монотиомуравьиной кислоты. Ч. I. Цис- и транс- $\text{HC}(:\text{O})\text{SH}$. Hocking William H., Winnewisser Gisbert. The rotational spectrum of monothioformic acid. I. cis- and trans- $\text{HC}(:\text{O})\text{SH}$. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 5, 422—437 (англ.)

Получены микроволн. спектры поглощения газообразной муравьиной кислоты в области 8—250 Ггц. Описан синтез цис- и транс-форм молекул со строением $\text{HC}(:\text{O})\text{SH}$. Приведены фрагменты спектров и обширные таблицы частот наблюдаемых вращательных линий, определенных с точностью 30 кгц. Выполнено отнесение линий к вращательным переходам типа a и b молекулы в основном и возбужденных колебательных ν_7 и ν_9 состояниях. Анализ спектра, основанный на диаграммах Фортра, проведен для основного состояния с использо-

(м.п.)

XU-13873

ф. 1976 N 11

ванием гамильтониана Ватсона с константами центробежного растяжения 4-го и 6-го порядков. Приведены вращательные и центробежные постоянные и вычислены параметры отклонения молекулы от плоскости за счет нулевых колебаний. Сделана попытка обнаружения линий монокристаллической кислоты в галактич. радиоисточниках, результат — отрицательный. Библ. 25. М. Тонков

HCOSD

DCOSH

HCOSH

(m,n)

(+1)

⊗

X. 1976. N 24

24 Б262. Вращательный спектр монотиоуглеводородной кислоты. II. Цис- и транс- $\text{HC}(\text{:O})\text{SD}$, $\text{DC}(\text{:O})\text{SH}$, $\text{HC}(\text{:O})^{34}\text{SH}^{1,2}$. Hocking William H., Winnemisser Gisbert. The rotational spectrum of monothioformic acid. II. cis- and trans- $\text{HC}(\text{:O})\text{SD}$, $\text{DC}(\text{:O})\text{SH}$, $\text{HC}(\text{:O})^{34}\text{SH}^{1,2}$. «Z. Naturforsch.», 1976, 31 a, № 5, 438—453 (англ.)

Измерены вращательные спектры трех изотопич. образцов монотиоуглеводородной к-ты: HCOSD , DCOSH и HCO^{34}SH в области частот от 8 до 160 ГГц. В спектрах всех изотопич. образцов наблюдались вращательные переходы, принадлежащие двум изомерным формам: цис- и транс-ротамерам. Для всех образцов и обоих ротамеров определены вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения. Из вычисленных значений инерциального дефекта установлено, что равновесные конфигурации обоих ротамеров — плоские. Для цис- и транс-ротамеров определены структурные параметры, соотв.: $r(\text{C}-\text{H})=1,100$ и $1,100$ А, $r(\text{C}=\text{O})=1,210$ и $1,218$ А, $r(\text{C}-\text{S})=1,771$ и $1,763$ А, $r(\text{S}-\text{H})=1,336$ и $1,351$ А, $\angle\text{OCS}=122,4^\circ$ и $126,0^\circ$, $\angle\text{HSC}=94,7^\circ$ и $92,7^\circ$, $\angle\text{HCS}=114,6^\circ$ и $111,8^\circ$ при точности определения длин связей $\pm 0,01$ А и углов связей $\pm 1^\circ$. Сообщ. I см. пред. реферат. С. Н. Мурзин

1976

X-5-13872

HC(:O)SD

X-13872

1976

11 Д512. Вращательный спектр монотиомуравьиной кислоты. Ч. II. Цис- и транс- $\text{HC}(:\text{O})\text{SD}$, $\text{DC}(:\text{O})\text{SH}$, $\text{HC}(:\text{O})^{34}\text{SH}$. Hocking William H., Winnewisser Gisbert. The rotational spectrum of monothioformic acid. II. cis- and trans- $\text{HC}(:\text{O})\text{SD}$, $\text{DC}(:\text{O})\text{SH}$, $\text{HC}(:\text{O})^{34}\text{SH}$. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 5, 438—453 (англ.)

Изучены вращательные спектры трех изотопич. замещенных монотиомуравьиной кислоты (I) (HCOSD , DCOSH , HCO^{34}SH). Определены константы вращательного движения и центробежных деформаций в I. Показано, что в спектре каждого соединения присутствуют полосы 2 изомеров и установлено, что цис- и трансизомеры имеют плоское строение. Приведены значения углов и длин связей $\text{C}-\text{H}$, $\text{S}-\text{H}$, $\text{C}-\text{S}$, $\text{C}=\text{O}$ в I. Предположено, что зарегистрированные различия длин связей и углов в цис- и трансизомерах обусловлены отталкиванием водородных атомов в цисизомере и слабым притягиванием неустойчивого водородного атома электроотрицат. атомом O в трансположении. Ч. I см. ref 11 Д511.

И. В. А.

М. И.

1976
N 11

НСОЗН

1976

3 Д433. Вращательный спектр монотиоуравьиной кислоты. Ч. III. Измерение дипольного момента и относительных интенсивностей. Hocking William H., Winnewisser Gisbert. The rotational spectrum of monothioformic acid. III. Dipole moment and relative intensity measurements. «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, № 8, 995—1001 (англ.).

Изучен эффект Штарка на вращательных линиях паров монотиоуравьиной кислоты $\text{HC}(:\text{O})\text{SH}$ и $\text{HC}(:\text{O})\text{SD}$. Зависимость смещения от приложенного напряжения описана полиномом вида $\nu = a + bV^2 + cV^4$, причем ве-

ш.н.

личина a определяет положение линии при нулевом поле, а коэф. c мал. По величине b найдены значения дипольных моментов различных изотопнозамещенных молекул в цис- и трансконформациях. Использование изотопов позволило определить значения компонент дипольного момента в системе моментов инерции молекул. Выполнены измерения относит. интенсивностей и полуширин линий двух изомеров. По интенсивностям найдена разность энергий в различных вращательных состояниях. Библ. 21. Ч. II см. РЖФиз, 1976, 11Д512.

Ф. 1977
N 3

М. Тонков

61222.3476

40597

1976

Ch: $\text{D}_0(\text{CH}_3-\text{SO}_2)$ XIV-7965 $\text{D}_0(\text{CH}_3\text{SO}_2-\text{H})$ Horowitz Abraham.

Radiolytic decomposition of methanesulfonyl chloride in liquid cyclohexane. A kinetic determination of the bond dissociation energies $\text{D}(\text{Me}-\text{SO}_2)$ and $\text{D}(\text{c}-\text{C}_6\text{H}_{11}-\text{SO}_2)$. "Int. J. Chem. Kinet.", 1976, 8, N 5, 709-723 (англ.)

732 736

17 8

0776

ВИНИТИ

C-H-S

[HCO (SCH₃)]

1976

24 Б273. Инфракрасный и микроволновый спектры, молекулярная конформация и электрический дипольный момент метил тиолформиата. Jones Geraint I. L., Lister David G., Owen Noel L., Gerry Michael C. L., Palmieri Paolo. Infrared and microwave spectra, molecular conformation and electric dipole moment of methyl thiolformate. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 60, № 1—3, 348—360 (англ.)

Измерены МВ-спектр в области частот от 41 до 10 ГГц и ИК-спектр в области волновых чисел от 4000 до 50 см⁻¹ метил тиолформиата (I). В результате изучения МВ-спектра и тонкой вращательной структуры ИК-спектра установлено, что спектры принадлежат цис-конформеру метил тиолформиата с метильной группой в цис-положении по отношению к карбонильной связи. Определены вращательные постоянные в Мгц: A=11042,22, B=5118,27, C=3562,03, и постоянные цен-

44/44-87

X. 1976. № 24

тробежного искажения в кгц: $D_J=6,0$, $D_{JK}=2,2$, $D_K=$
 $=12$, $D_{DJ}=2,30$, $D_{DK}=21,5$. По эффекту Штарка для
 трех переходов и в предположении, что $\mu_c=0,0$ D, оп-
 ределены компоненты дипольного момента в дебаях:
 $\mu_a=1,52\pm 0,03$, $\mu_b=0,43\pm 0,14$, и полный момент: $\mu=$
 $=1,58\pm 0,05$. Полученное значение дипольного момента
 согласуется с величиной: $\mu=1,6\pm 0,1$ D, определенной
 на основе емкостных измерений для р-ра I в бензоле
 при 295° K. Определены структурные параметры: $r(C=$
 $=O)=1,20$ А, $\angle SCO=126^\circ$, $\angle CSC=100^\circ$ и угол между
 направлением электр. дипольного момента и $C=O$
 связью: 43° . Для барьера заторможенного внутренне-
 го вращения метильной группы получена оценка: $V_3 \gg$
 $>10,5$ кдж/моль.

С. Н. Мурзин

ЖХ

CH₂SO

ЖУ - 14199

1976

12 Д389. Микроволновый спектр, центробежное искажение, замещенная структура и дипольный момент CH₂SO. Penn Robert E., Olsen Robert J. Microwave spectrum, centrifugal distortion, substitution structure, and dipole moment of sulfine, CH₂SO. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 1, 21—28 (англ.)

В области 8—26 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы CH₂SO. Отождествлено 86 переходов в основном колебательном состоянии вплоть до $J=60$. Определены параметры замещенной структуры. Из измерений эффекта Штарка нормального и d_2 -образцов определен дипольный момент, равный 2,994 ед. Дебая.

М.П.

8846-118

ф 1976 N 12

#3-14199

1976

CH₂SO

м.к.

8676-11X

Ж. 1477 N 1

~~1 Б266.~~ Микроволновой спектр, центробежное искажение, строение и дипольный момент сульфина, CH₂SO. Penn Robert E., Olsen Robert J. Microwave spectrum, centrifugal distortion, substitution structure, and dipole moment of sulfine, CH₂SO. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 61, № 1, 21—28 (англ.)

Измерен МВ-спектр сульфина CH₂SO (I). Анализ 86 переходов обычной изотопной разновидности I с помощью метода наименьших квадратов дал значения 16 параметров, характеризующих центробежное искажение. Из изменений вращательных постоянных *B* и *C* для пяти изотопных модификаций I получены значения длин связей (в Å) CH (син) 1,085, CH (анти) 1,077, CS 1,610, SO 1,469 и углов (град) HCH 121,86, SCH (син) 122,51, SCH (анти) 115,63 и CSO 114,72. Определены значения дефекта инерции молекулы и величина эффекта сокращения межатомного расстояния C...O. Из измерения величины эффекта Штарка для 14 переходов получено значение дипольного момента 2,994 D, к-рый ориентирован под углом 25,50° к связи SO и 9,61° к оси *a*. При давлении 30·10⁻³ мм при 25° время жизни I составляет ~30 мин.

Ю. Н. Панченко

(CH₂)₃ SO XIV - 8935
(rev. ang., vi, vii) 1977

Bevan J.W., Lepson A.C., Millett
D.F.,

Proc. Roy Soc. London, 1974, 354,
v1679, 491-509 (auu)

The microwave spectrum and structure of trimethylene sulphoxide:
bends, tilts and twists in the
methylenic groups.

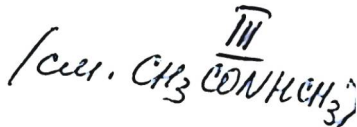
Puckner, 1977, 225-300 10 (CP)



Grunwell J.R. et al. 1977



Tetrahedron, 1977, 33,
N21, 2781-2784.



C-11-05

20 Б314. Строение молекулы метилового эфира фторсульфоновой кислоты по данным микроволновой спектроскопии и электронографии. Hargittai István, Seip Ragnhild, Nair K. P. Rajappan, Britt Chester O., Boggs James E., Cyvin Bjørn N. On the molecular structure of fluorosulphuric and methyl ester as studied by microwave spectroscopy and electron diffraction. «J. Mol. Struct.», 1977, 39, № 1, 1—13 (англ.)

1977

молек.

геометр.

Методами МВ-спектроскопии и газовой электронографии изучено строение молекулы метилового эфира фторсульфоновой к-ты. Получены след. молекулярные параметры, хорошо согласующиеся с величинами для др. простых сульфонов: $r_a(\text{S}=\text{O})=1,410$, $r_a(\text{S}-\text{F})=1,545$, $r_a(\text{S}-\text{O})=1,558$ А, углы $\text{FSO } 96,8$, $\text{FS}=\text{O } 106,8$, $\text{OS}=\text{O } 109,5$, $\text{O}=\text{S}=\text{O } 124,4$ и $\text{SOC } 116,5^\circ$. Оба метода указывают на присутствие в газовой фазе анти-формы, тогда как возможность существования гош-изомера также не м. б. исключена. Резюме

Л. 1977 № 20

HCOSH

ВР - XIV - 9340

1977

7 Д562. Вращательный спектр моно thiоуксусной кислоты. Ч. IV. Цис- и транс- $\text{H}^{13}\text{C}(:\text{O})\text{SH}$ и $\text{HC}(:^{18}\text{O})\text{SH}$. Hocking William H., Winnewisser Gisbert. The rotational spectrum of monothioformic acid. IV. Cis- and trans- $\text{H}^{13}\text{C}(:\text{O})\text{SH}$ and $\text{HC}(:^{18}\text{O})\text{SH}$. «Z. Naturforsch.», 1977, A32, № 10, 1108—1118 (англ.)

Получены микроволновые и миллиметровые спектры поглощения в области 10—200 Гц молекул H^{13}COSH и HC^{18}OSH в газовой фазе. Приведены таблицы частот и интерпретация нескольких десятков линий поглощения, соответствующих чисто вращательным переходам в цис- и транс-ротамерах исследованных молекул. По эксперим. данным рассчитаны вращательные постоянные и кватичные постоянные центробежного растяжения. Рассчитанные константы в совокупности с полученными ранее аналогичными данными для молекул HCOSH , DCOSH , HCOOSD и HCO^{34}SH использованы для определения структурных параметров цис- и транс-ротамеров. Ч. III. Hocking W. H. Et al., «Z. Naturforsch.», 1976, 31a, 995. Библ. 42. Ю. М. Л.

М. П.

молекулярная спектроскопия

Ф: 1978.2.4

HC(O)SH

ВЭР-ХIV-9340

1977

8 Б177. Вращательный спектр монотиомуровьиной кислоты. IV. Цис- и транс- $\text{H}^{13}\text{C}(\text{:O})\text{SH}$ и $\text{HC}(\text{:}^{18}\text{O})\text{SH}$.

Hocking William H., Winnewisser Gisbert. The rotational spectrum of monothioformic acid. IV. cis- and trans- $\text{H}^{13}\text{C}(\text{:O})\text{SH}$ and $\text{HC}(\text{:}^{18}\text{O})\text{SH}$. «Z. Naturforsch.», 1977, A32, № 10, 1108—1118 (англ.)

Измерены в области частот от 8 до 40 ГГц и от 75 до 180 ГГц вращательные спектры изотопич. образцов монотиомуровьиной к-ты, H^{13}COSH (I) и HC^{18}OSH (II), в основном колебательном состоянии. Идентифицировано свыше 60 переходов, к-рые отнесены к двум ротамерам, цис(C) и транс(T), обоих образцов. Анализ спектров выполнен с использованием гамильтониана в представлении Уотсона с учетом квартичного центро-

геометр-
Емрове; ;
vi

2, N8, 1978

бежного искажения. Для CI , CII , TI и TII определены вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения. Полученные результаты вместе с известными данными для 4 изотопич. образцов моноэтиленовой к-ты использованы для определения r_s -структуры C и T ротамеров, соотв., $r(C-H)=1,104$ (3) и $1,104$ (3) Å, $r(C=O)=1,203$ (3) и $1,205$ (3) Å, $r(C-S)=1,771$ (3) и $1,768$ (3) Å, $r(S-H)=1,335$ (2) и $1,354$ (2) Å; $\angle OCS=122,5$ (3)° и $125,9$ (3)°, $\angle HSC=94,9$ (2)° и $92,5$ (2)°, $\angle HCS=114,4$ (2)° и $111,0$ (2)°. Полученные структурные параметры согласуются с известными данными для 12 родственных молекул.

С. Н. Мурзин

70221.6576

58817 CK

1977

TC, Ch, MGD

 SO_2 / C_2H_2

#9-17084

Kelly Nelson, Heagler James F.,

Heicklen Julian. The photolysis of sulfur dioxide in the presence of foreign gases. VIII. Excitation of SO_2 at 3600-4100 Å in the presence of acetylene. "J. Photochem.", 1977, 6, N 3, 157-172

770 773

0816 AMK

BANKMTH

CH_3COSH

ВР-ХIV-9574

1974

CH_3COSD

8 Б174. Анализ микроволновых спектров тиюксусной кислоты, CH_3COSH и CH_3COSD , по методу главных осей. Naito Takashi, Onashi Osamu, Yamaguchi Ichiro. PAM analysis of the microwave spectra of thioacetic acid CH_3COSH and CH_3COSD . «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 68, № 1, 32—40 (англ.)

Измерены в области частот от 8 до 34 ГГц МВ-спектры изотопич. образцов, CH_3COSH (I) и CH_3COSD (II), тиюксусной к-ты. Анализ спектров выполнен с учетом взаимодействия внутреннего и полного вращения молекулы по методу главных осей. Для I и II, соотв., получены след. значения вращательных постоянных (в Мгц) $A=9913,29$ (56) и $9662,80$ (78), $B=4923,11$ (23) и $4810,74$ (26), $C=3354,60$ (24) и $3273,92$ (18). Определены параметры внутреннего вращения. Для I и II, соотв., угол между главной a -осью и осью симметрии метильной группы равен $\theta=57,080$ (30)° и $55,097$ (24)° и величина барьера внутреннего

0104
XIV -

2, 18, 1978

вращения равна $V_3 = 222,6$ (1,4) и $212,9$ (1,4) кал/моль.
Из изменения угла θ при D-замещении сделан вывод
о том, что SH-связь находится в транс-положении по
отношению к метильной группе. По эффекту Штарка
второго порядка для трех переходов определены ком-
поненты дипольного момента $\mu_a = 0,191$ (10) D, $\mu_b =$
 $= 1,811$ (13) D и полный момент $\mu = 1,821$ (13) D.

С. Н. Мурзин



$\text{CH}_3\text{CO}(\text{S})\text{H}$

ВФ-ХIV-9574

1974

4 Д378. Анализ микроволновых спектров тиоацетатной кислоты (CH_3COH и CH_3COD) методом главных осей. Naito Takashi, Ohashi Osamu, Yamaguchi Ichiro. RAM Analysis of the Microwave Spectra of Thioacetic Acid, CH_3COH and CH_3COD . «J. Mol. Spectrosc.», 1977, 68, № 1, 32—40 (англ.)

В диапазоне 8—40 Гц исследованы микроволн. спектры молекул CH_3COH (I) и CH_3COD (II). Идентифицированы линии 45 вращательных переходов для I и 40 переходов для II с $J \leq 9$ основного колебательного состояния и туннельное А—Е-расщепления линий. Теоретич. анализ спектров выполнен по методу главных осей.

4010

4.11.1
XIV

р. № 1978

по ф-лам Гершбаха для $A-E$ -расщепления линий, полученным методом возмущений в 6-м приближении. Определены значения вращательных постоянных и параметров внутреннего вращения. Для барьеров внутреннего вращения I и II получены значения 222,6 и $212,9 \pm 1,4$ кал/моль соответственно. Измерен также дипольный момент I: $\mu_a = 0,191$, $\mu_b = 1,811$, $\mu_{общ} = 1,821 \pm 0,013$ ед. Дебая.

М. Р. Алиев

70525.6719

Ch, Ph, TC

Код, 96811P. черт 1977
 CH_3COSH * 4-18424

Randhawa H.S., Walter W., Meese
Claus O. Vibrational and NMR spectra of
light and heavy CH_3COSH and CD_3COSH in
relation to tautomerism and hydrogen bon-
ding. "J. Mol. Struct.", 1977, 37, N 2,
187-192. (англ.)

0833.777

846 850 858 862

ВИНИТИ

$\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

[оттиск 5755]

1977

2 Д396. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент 2-меркаптоэтанола: доказательство наличия внутримолекулярной водородной связи $\text{OH} \dots \text{S}$.

Sung Eun-Mo, Harmony Marlin D. The microwave spectrum, structure, and dipole moment of 2-mercaptoethanol: evidence for an intramolecular $\text{OH} \dots \text{S}$ hydrogen bond. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, 99, № 17, 5603—5608 (англ.)

В диапазоне 18—40 ГГц исследованы микроволновые спектры пяти изотопич. разновидностей молекулы $\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$. По эффекту Штарка и методом двойного микроволнового резонанса идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 5$ в основном колебательном состоянии. Показано, что все наблюдаемые

геометрия,
м.п.

Ф. 1978 №2

линии относятся к гош-гош-гошизомеру 2-меркаптоэтанолу. Определены значения вращательных постоянных, из которых вычислены некоторые из структурных параметров. В частности, для длин связей получены значения $S-H=1,340$; $O-H=1,015$; $C-O=1,423$; $C-C=1,538$; $C-S=1,806$ А. На основании полученных значений структурных параметров установлено наличие внутримолекулярной водородной связи $OH \dots S$ в 2-меркаптоэтаноле с длиной $H \dots S=2,565$ А. Измерен также дипольный момент: $\mu_a=0,619$, $\mu_b=1,478$, $\mu_c=0,965$, $\mu_{общ}=1,871$ ед. Дебая. М. Р. Алнев

$\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

Оттиски 5755

3Б393. Микроволновый спектр, структура и дипольный момент 2-меркаптоэтанола; доказательство существования внутримолекулярной водородной связи $\text{OH} \dots \text{S}$. Sung Eun-Mo, Harmony Marlin D. The microwave spectrum, structure, and dipole moment of 2-mercaptoethanol; evidence for an intramolecular $\text{OH} \dots \text{S}$ hydrogen bond. «J. Amer. Chem. Soc.», 1977, august 17, 5603—5609 (англ.)

1977

м. в. спектр
м. п.

В частотной области 18—40 ГГц исследованы МВ-спектры 2-меркаптоэтанола (I) $\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ и четырех образцов I с другими изотопными составами: $\text{DSCH}_2\text{CH}_2\text{OD}$, $\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{OD}$, $\text{DSCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, $\text{H}^{34}\text{SCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$. На основании анализа этих спектров сделано заключение, что для I характерны только гош-конформации. Из данных по штарк-эффекту второго порядка определены компоненты дипольного момента I: $|\mu_a| = 0,619 \pm 0,015$, $|\mu_b| = 1,478 \pm 0,012$ и $|\mu_c| = 0,965 \pm 0,009$ D. Обсуждается структура I. Сделано заключение о существовании внутримолек. H-связи типа $\text{OH} \dots \text{S}$ с расстоянием $\text{H} \dots \text{S}$, равным $2,565 \pm 0,003$ А. Эти связи стабилизируют I в указанной конформации. Отмечается, что выполненные исследования впервые доказали включение атома S во внутримолек. H-связь в газовой фазе. Л. А. Корытко

2, 1978,
№3

H_2CSO

ВФ-ХIV-8791

1977

Р) 17 Б32. Расчеты геометрии и электронного строения замещенных сульфидов неэмпирическим методом молекулярных орбиталей и методом ЧПДП. van Lieger Jan, van der Avoird Ad, Zwanenburg Binne.
) Ab initio and INDO molecular orbital calculations of the geometries and electronic structures of substituted sulfides. «Tetrahedron», 1977, 33, № 5, 539—545 (англ.)

Комп. р.

Методом ССП МО ЛКАО и полуэмпирич. методом ЧПДП, рассчитаны дипольные моменты; распределения зарядов, потенциальные поверхности и др. св-ва молекулы сульфида H_2CSO (I) и 8 ее F- и Cl-моно- и дизамещенных. Неэмпирич. расчеты выполнены в расширенных базисах сгруппированных гауссовых ф-ций s- и p-типа. При расчете электронных спектров в приближении ЧПДП с учетом конфигурац. взаимодействия отбиралось ≤ 60 наиболее низких по энергии однократно возбужденных конфигураций. Для всех 9 молекул проведена частичная оптимизация геометрии, в частности,

2. 1977 N17

валентного угла CSO. Согласно между вычисл. и имеющимися опытными данными по барьеру цис-транс-перехода в I, по дипольным моментам I и Cl_2CSO плохое, что по мнению авторов, обусловлено малым размером базиса. Наиболее важным результатом расчета является обнаружение высокой локализации св-в атомов S и O: зарядовые распределения и потенциальные поверхности в окрестности группы SO не зависят ни от природы заместителей, ни от того, находятся ли они в цис- или транс-положении. Этот результат позволяет объяснить хим. поведение замещенных сульфиров. В. Г. Дашевский

зиса.



70221.6678

58817 GR

1977

Ex-C, Ch, TC, MOU

 $\text{SO}_2 + \text{C}_5\text{H}_8$

*

4-17085

Wampler F.B. The photolysis
of SO_2 at 3130 Å in the presence of
the 1,3-pentadienes. "J. Photochem.",
1977, 6, N 3, 183-192 (англ.)

0016

ВИНИТИ

770 773

C-H-5-0

Учебниковые
соединения

молекул.
структура

1978

10 Б73 К. Структура сульфоновых молекул. Конформации и геометрическое строение по данным газовой электронографии и микроволновой спектроскопии; структурные вариации. Sulphone molecular structures. Conformation and geometry from electron diffraction and microwave spectroscopy; structural variations. Hargittai István. Berlin e. a., Springer, 1978. VIII, 175 pp., ill. (Lect. Notes Chem.. Vol. 6). (англ.)

Систематизированы и критически рассмотрены известные данные о строении молекул сульфоновых соединений, полученные методами газовой электронографии и микроволновой спектроскопии. В рамках моделей отталкивания валентных электронных пар и несвязанных

Х-1981.110

взаимодействий обсуждены наблюдаемые в сульфонах
характеристич. структурные вариации (конформац.
св-ва, характеристич. вариации валентных углов и длин
связей), а также корреляции между геометрич. и коле-
бательными параметрами групп SO_2 . Проведено сопо-
ставление со структурными св-вами сульфоксидов и
сульфидов. Е. Розенберг

$(CH=CH_2)_2SO$

Молекулярное строение
И. В. А.

пр. 1978, № 12

12 Д507. Определение молекулярного строения дивинилсульфона методами колебательной спектроскопии, дифракции электронов и полуэмпирическими CNDO/2 расчетами молекулярных орбиталей. Hargittai István, Rozsondai Béla, Nagel Bertram, Bulcke Petra, Robinet Germaine, Labarre Jean-Francois. Molecular structure of divinyl sulphone as studied by electron diffraction, vibrational spectroscopy, and semiempirical CNDO/2 molecular orbital calculations. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1978, № 7, 861—868 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($3300-400\text{ см}^{-1}$) газообразного, кристаллического (при $t_{\text{ре}} 120^\circ\text{K}$), жидкого дивинилсульфона (I), переохлажденного жидкого I и растворов I в CCl_4 , а также спектры комб. рас. кристаллического, жидкого и переохлажденного жидкого I при возбуждении излучениями аргонового и He—Ne-лазеров. Определены межатомные расстояния в I методом дифракции электронов. Выполнены полуэмпирич. расчеты молекулярных орбиталей I. Показано, что в газообразном, жидком и переохлажденном жидком состояниях сосуществует не менее двух конформаций I, тогда как в кристаллич. фазе стабилен лишь 1 изомер I. Библ. 45. И. В. А.

1978
9395
5501
оттиски

$H_2S + H_2CO$ Commen 7259 1978
Коммюне Nelander B.

снелір
блатфисе
Ar.

J. Mol. Struct.,
1978, 50, 223-32.

$\text{CH}_3\text{OSO}_2\text{F}$ [номер 7340] 1978

Кристалл
номер.
Энергия
фрагмент.
измерения.

Rajappan Nair K. P.

Indian. J. Pure
and Appl. Phys.

1978, 16, 586-89

HCOOCH_3
 CCOCH_3

И. с. с. л.
 пост; Т. г. гр.

(1) ✗
 №. 194917

ВР-ХIV-9543

7 Б55. Анализ в нормальных координатах, термодинамические функции и расчеты по методу ППДП/2 для ряда алкилформатов. R and h a w a H. S. Normal coordinate analysis, thermodynamic functions and CNDO/2 calculations on some alkylformates. «Z. Phys. Chem.» (BRD), 1978, 109, Teil 1, 1—7 (англ.)

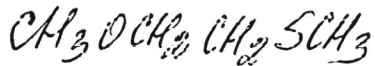
С помощью итерац. процедуры определено силовое поле метилтионформата в приближении Юри — Бредли — Шиманоучи. Исходная силовая матрица составлена из силовых постоянных тиоформальдегида, тиоловых к-т, муравьиной к-ты, уксусной к-ты и др. родственных молекул. Решена прямая колебательная задача для метилтионформата и выполнено отнесение частот колебаний. Рассчитаны значения энтальпии, энергии образования, энтропии и теплоемкости в интервале 100—1500 К для метилтионформата, метилхлорформата и метилтионформата. Проведена оценка частот вал. кол. карбонильной группы в молекулах ClCOOCH_3 , HCOOCH_3 и $\text{H}_3\text{CCOOCH}_3$ с помощью расчетов энергии по методу ППДП/2. Полученные результаты сопоставлены с эксперим. данными. С помощью полученных результатов дано объяснение повышения частоты вал. кол. карбонильной группы в галогенированном формате.

1978
 4033
 Отмечен

Ю. Н. Панченко

1978

Shimanouchi T.
et al.



и др.

материалы каталога,
молельных соединений
и др. 9.

(vi)

J. Phys. and Chem. Ref. Data
1978, 7 (7) 1523-1443.

(см. материал; и)

Оттиски 9037

1979

 $H_2CO \cdot H_2S$

12 Б71. Неэмпирические расчеты молекулярных орбиталей Н-связанных комплексов и комплексов, не содержащих Н-связи. $H_2CO \cdot H_2O$ и $H_2CO \cdot H_2S$. Ahlström M., Jönsson B., Karlström G. Ab initio molecular orbital calculations on hydrogen- and non-hydrogen-bonded complexes. $H_2CO \cdot H_2O$ and $H_2CO \cdot H_2S$. «Mol. Phys.», 1979, 38, № 4, 1051—1059 (англ.)

кв. мех.
расчет

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО проведены расчеты комплексов $H_2CO \cdot H_2O$ (I) и $H_2CO \cdot H_2$ (II). Использованы два типа базисных наборов ГФ: 1) малый базис (10s/6p) для S, (7s/3p) для C(O) и (4s) для H и 2) расширенный базис (12s/9p/1d), сгруппированный в (7s/5p/1d), (9s/5p/1d), сгруппированный в (5s/3p/1d) и (5s/1p), сгруппированный в (2s/1p), соответственно, для S, O(C) и H. Для I и II рассмотрено по 6 конформаций, одна из к-рых Н-связанная. Варьировали два парамет-

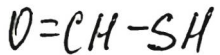


2.1980.№12

ра — расстояние между тяжелыми атомами и угол, характеризующий взаимную ориентацию мономеров. Найдено, что в I и II Н-связанные конфигурации наиболее стабильны. Энергия образования наиболее стабильной конфигурации I (ΔE) на 10 кДж/моль выше, чем соответствующая ΔE II. Проведены оценки вклада дисперсионной компоненты E_d в энергию межмолекулярного взаимодействия и показали, что у II величина E_d такого же порядка, что и ΔE .

Э. Герман:

Оттиски 8904



молекула
геометрия

17

6 Б93. Потенциал вращения вокруг связей $C(sp^2)-S$: электронографические результаты для $O=C(SCH_3)_2$ и неэмпирические расчеты $O=CH-SH$ и $S=CH-SH$. Auberg E., Samdal S., Seip H. M. Potential for rotation about $C(sp^2)-S$ bonds: electron-diffraction results for $O=C(SCH_3)_2$ and ab initio calculations on $O=CH-SH$ and $S=CH-SH$. «J. Mol. Struct.», 1979, 57, 95—104 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы $O=C(SCH_3)_2$ (I). Полученные данные согласуются с предположением о существовании син-син-конформера I. Найдены след. значения для наиболее важных межъядерных расстояний (r_a , Å) и углов: $C=O$ 1,206(4), $C_{карб}-S$ 1,777(3), $C_{Me}-S$ 1,802(4), $\angle OCS$ 124,9(2), $\angle CSC$ 99,3(4)°. В результате неэмпирич. расчетов методом МО ССП молекул $O=CH-SH$ и $S=CH-SH$ установлено, что минимумы энергии отвечают син- и анти-конформерам, соответственно.

В. Спиридоно

2.1980.16

оттиски 7908

1979

16 Б62. Электронные и геометрические перестройки в процессе протонирования. Неэмпирическое изучение аниона моноотиоформата. El Ouadi S., Dargelos A., Chaillet M. Electronic and geometric rearrangements in the protonation process. An ab initio study of the monothioformate anion. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 62, № 1, 166—172 (англ.)

Выполнен... неэмпирич. расчеты аниона моноотиофор-

НСОS⁻

НСОSH

расчет ΔE,
геометрич. в
молекуле



2. 1979, N 16

мната HCOS^- (I), а также цис-, транс- и гош-конформаций как тиольной, так и гидроксильной форм тио-муравьиной к-ты HCOSH (II). В расчетах применяли стандартные базисы типа ОСТ-3ГФ, 4-31ГФ и ОСТ-3ГФ, дополненный поляризац. функциями (ПФ) d -типа на атоме серы. Геометрия всех изученных систем оптимизирована в базисе ОСТ-3ГФ. Расчет в базисе ОСТ-3ГФ показывает в согласии с экспериментом, что тиольная форма стабильнее гидроксильной; разность их энергий найдена равной 11,5 ккал/моль. Введение ПФ слабо влияет на этот результат, давая 14,4 ккал/моль. Однако расчет в базисе 4-31ГФ приводит к противоположному выводу. Найдено, что как тиольная, так и гидроксильная формы II более стабильны в транс-конформации. Энергия активации процесса транс $\rightarrow$ цис-изомеризации тиольной формы найдена равной 7,4 ккал/моль в базисе ОСТ-3ГФ; расширение базиса мало влияет на этот результат. Цис-тиольная форма по сравнению с транс-тиольной менее стабильна на 1,8 ккал/моль. Проведено разделение общей энергии протонирования I на вклады — электростатич., поляризац., переноса заряда и геометрич. перестройки. Найдено, что решающее значение имеют последние три вклада и это объясняет неспособность метода электростатич. потенциала предсказать направление протонирования I. В. А. Басов

H_2COS

Выписка 4908

1979

9 Д176. Электронная и геометрическая перегруппировка в процессе протонирования. Неэмпирическое изучение аниона монотиоформата. El-Ouadi S., Dargelos A., Chaillet M. Electronic and geometric rearrangements in the protonation process. An ab initio study of the monothioformate anion. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 62, № 1, 166—172 (англ.)

Рв. мех.
расчет

Неэмпирическим методом ССП рассчитана геометрич. и электронная структура шести изомеров H_2COS , отличающихся положением протона вблизи аниона $HCOS^-$. Расчеты проводились с тремя базисными наборами гауссовых ф-ций: STO-3G, 4-31G и STO-3G, дополненным поляризующими d-ф-циями на атоме серы. При анализе результатов использовалось разложение энергии взаимодействия на отдельные вклады: потенц. энергии, поляризации, переноса заряда, геометрич. релаксации. Найдено, что при использовании базиса STO-3G более устойчивой

Ф. 1079/13

оказывается тиоловая форма H_2COS , что находится в соответствии с эксперим. данными, тогда как расчеты в базисе 4-31G в качестве более устойчивой дают гидроксиформу. Транстиолизомер на 1,8 ккал/моль устойчивее цистиолизомера. Проанализирована роль различных вкладов в энергию взаимодействия в процессе протонирования аниона HCOS^- при атаке протона со стороны серы и со стороны атома кислорода.

В. И. Барановский.

1979

 $(\text{CH}_2)_3\text{SO}$

6 Д365. Неплоские деформационные колебания кольца триметиленсульфоксида. The ring puckering vibration of trimethylene sulfoxide. Far-infrared spectrum from 50 to 675 cm^{-1} . Duckett J. A., Smithson T. L., Wieser H. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 3, 407—414 (англ.)

и.к. спектр,
2.

Получены спектры ИК-поглощения паров триметиленсульфоксида в области 100—700 cm^{-1} с разрешением 1,2 cm^{-1} при $t = 50^\circ\text{C}$ в слоях до 19 м. Приведены спектры. Группа линий в области 100—170 cm^{-1} интерпретированы как совокупность Q-ветвей, соответствующих переходам между уровнями неплоских деф. кол. кольца молекулы. По их частотам определены 3 параметра потенц. ф-ции этих колебаний. Обсуждается форма потенц. ф-ции. Библ. 12. М. Т.

ф 1980 №6

$(CH_2)_3SO$

1979

10 Б243. Неплоские деформационные колебания кольца триметиленсульфоксида. Длинноволновой инфракрасный спектр от 50 до 675 cm^{-1} . Duckett J. A., Smithson T. L., Wieser H. The ring puckering

М, П.

vibration of trimethylene sulfoxide. Far-infrared spectrum from 50 to 675 cm^{-1} . «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 78, № 3, 407—414 (англ.)

На ИК-спектрометре интерференц. типа в области частот от 50 до 675 cm^{-1} с разрешением 1,2 cm^{-1} измерен спектр паров триметиленсульфоксида для колебательных состояний $\Delta v_p = 1$ и $\Delta v_p = 2$ неплоских деф. кол. кольца. При анализе спектра использован гамиль-

2-1980. N10

тониан, в к-ром потенциальная ф-ция деф. кол. кольца представлена в виде полинома 4-й степени от одной безразмерной нормальной координаты. В модели не учитывается вклад метиленовых групп в деформационному кольца. Для приведенных значений параметров потенциала $\nu_2=154,18(38)$, $\nu_3=-29,008(275)$, $\nu_4=1,4824(263)$ см^{-1} величина инверсионного барьера между стабильным экваториальным и возможным аксиальным конформерами составляет $1205,6(11,4)$ см^{-1} . Глубина аксиальной потенциальной ямы при этом не превышает $145,9(9,5)$ см^{-1} , достигая возможного миним. значения $5,00(0,83)$ см^{-1} . Исходя из этих данных, двугранный угол для аксиального конформера м. б. оценен, как принимающий значения в области от 15 до 5° . Вычисленное значение приведенной массы близко к соотв-щим величинам для циклобутана и триметиленоксида.

С. Н. Мурзин

H_2CSO

XIV - 9162

1979

91: 65495p Infrared spectra of matrix-isolated sulfine. Powers, D. E.; Arrington, C. A.; Harris, W. C.; Block, E.; Kalasinsky, V. F. (Dep. Chem., Furman Univ., Greenville, SC 29613 USA). *J. Phys. Chem.* 1979, 83(14), 1890-2 (En.). The highly reactive sulfine mol., H_2CSO , was trapped in an Ar matrix at 18 K and studied in the IR region. Sulfine was generated by the vacuum pyrolysis of 1,3-dithietane-1-oxide or allyl Me sulfoxide at 350°. The IR absorptions due to sulfine were identified by comparing the spectra obtained from the 2 pyrolysis reactions and by observing the temp. dependence of the spectral features. The data are consistent with previous studies of sulfine, and a complete vibrational assignment is proposed.

*Isomer
6 molecules*

C.A. 1979, 2118

H_2CSO

(ν_{CH_2})
спектр
в матрице

2.10.80.11

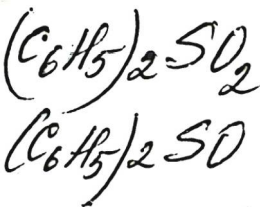
XIV-9162

1979

1 Б209. Инфракрасный спектр молекулы сульфина, изолированной в матрице. Powers D. E., Arrington C. A., Harris W. C., Block E., Kalasinsky V. F. Infrared spectra of matrix-isolated sulfine. «J. Phys. Chem.», 1979, 83, № 14, 1890—1891 (англ.)

В области $4000-200\text{ см}^{-1}$ измерены ИК-спектры неустойчивой молекулы сульфина H_2CSO (I), получающегося при пиролизе (350°) 1,3-дитиетан-1-оксида или аллилметилсульфоксида и изолированного при 18 К в аргоновой матрице. Выполнен расчет нормальных колебаний I и предложено отнесение полос зарегистрированного ИК-спектра к этим типам колебаний: $\nu_1 = 3013\text{ см}^{-1}$ и $\nu_2 = 2960\text{ см}^{-1}$ (антисимм. и симм. вал. кол. CH_2), $\nu_3 = 1395\text{ см}^{-1}$ (ножн.-кол. CH_2), $\nu_4 = 1357\text{ см}^{-1}$ и $\nu_5 = 1165\text{ см}^{-1}$ (антисимм. и симм. вал. кол. CSO), $\nu_6 = 1055\text{ см}^{-1}$ (маятн. кол. CH_2), $\nu_7 = 394\text{ см}^{-1}$ (плоскостное деф. кол. CSO), $\nu_8 = 972\text{ см}^{-1}$ (внеплоскостное крут. кол. CH_2), $\nu_9 = 767\text{ см}^{-1}$ (всегр. кол. CH_2). Первые семь кол. частот относятся к типу A' , последние две — к типу A'' .

Ю. Удачин



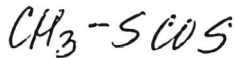
молекуляр.
структура

1949
7 Б77. Исследование молекулярной структуры дифенилсульфона и дифенилсульфоксида методом газовой электронографии. Rozsondal Béla, Moore Jack H., Gregory Donald C., Hargittai Istvan. Gas electron diffraction study of the molecular structure of diphenyl sulphone and diphenyl sulphoxide. «J. Mol. Struct.», 1979, 51, № 1, 69—76 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекул $(C_6H_5)_2SO_2$ (I) и $(C_6H_5)_2SO$ (II). Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_s , Å): I C—C 1,400 (3), C—H 1,100 (II), S—C 1,772 (5), S=O 1,440 (5); II C—C 1,398 (3), C—H 1,105 (11), S—C 1,804 (6), S=O 1,489 (5). Относительно валентных углов и конформаций I и II получена лишь ограниченная информация.

В. Спиридонов

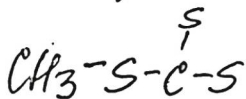
2. 1949 N 7



ommuc 93631 1979

S-methyldithiocarbonate
ion m^-

Tantryk. N;
et al.



methyldithiocarbonate

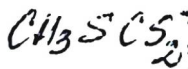
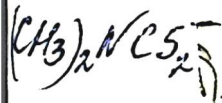
Proc. Indian Acad.
Sci., 1979, A88, (6),
457-63

(vi)

Infrared spectra and normal
vibrations of ...



1980

кв. мех.
расчет(4) ☒

РЛХ N20

20 Б49. Изучение методами ППП и ППДП анионных производных дитиоугольной кислоты. Bhasu V.C. Jyothi, Sathyanarayana D. N. A PPP and

CNDO study of dithiocarbonic anionic derivatives. «Phosph. and Sulfur», 1980, 8, № 2, 171—175 (англ.)

Полуэмпирическим методом ППДП/2 с учетом 3d-орбиталей серы рассчитаны анионы метилксантогенат $\text{CH}_3\text{OCS}_2^-$ (I), N,N-диметилдитиокарбамат $(\text{CH}_3)_2\text{NCS}_2^-$ (II) и метилтритиокарбонат $\text{CH}_3\text{SCS}_2^-$ (III). Геометрия I—III взята из эксперим. данных. Вычислены и табулированы σ - и π -электронные заселенности атомов. Найдено, что отриц. заряд в анионах I—III сосредоточен в основном на атомах серы группировки CS_2^- и притом на их π -орбиталях. Указанные атомы S являются π -акцепторами и в то же время σ -донора.

ми. Анализ π -порядков связей I—III показывает, что вес резонансной структуры с двойной связью $C=$
 $=X(CH_3)_n$ ($X=O, N, S$) падает в ряду $II>I>III$ параллельно уменьшению π -донорной способности X. Методом ППП с ограниченным configuraц. взаимодействием рассчитаны энергии и силы осцилляторов синглетсинглетных переходов I—III. При этом одноцентровые основные интегралы были скорректированы на основании результатов расчетов по методу ППДП/2. Полученные данные позволяют произвести отнесение большинства наблюдаемых в электронных спектрах солей I—III высокоинтенсивных полос поглощения.

В. Я. Беспалов

CF₃SCl
SCl₂

оттиса 10412

1980

1) 8 Б212. Колебательные спектры и гармонические силовые поля CF₃SCl и SCl₂. Bielefeldt D., Willner H. Schwingungsspektren und harmonische Kraftfelder von CF₃SCl und SCl₂. «Spectrochim. acta», 1980, A36, № 11, 989—995 (нем.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры (2500—30 см⁻¹) CF₃SCl (I) в газ. фазе и в Ar и Ne матрицах и спектры КР жидкости и кристалла. Изучен ИК-спектр SCl₂ (II) в Ne матрице, а также ИК- и КР-спектры изотопозамещенных I и II по S и Cl (³⁴S и ³⁵Cl). Дано отнесение колебаний I (симметрия C_s) на основании поляризации линий КР, контуров ИК-полос в газ. фазе, изотопич. сдвигов, анализа спектров обертонов и составных тонов и аналогии с COF₂, CF₃Cl и CF₃Br. К ν (S—Cl) отнесена полоса 540 см⁻¹, к ν (CS) — 459 см⁻¹. Проведен расчет частот и форм нормальных колебаний I и II и вычислены гармонич. силовые постоянные в валентно-силовом поле. K (CS) = 3,21, а K (S—Cl) = 2,99 · 10² Н/м. Рассчитаны термодинамич. функции I в интервале т-р 252,3—1000 К. Е. Разумова.

Дс; сип. пог.

т. г. ф.

(+2) (+1) SCl₂
X. 1981 N 8

$\text{CH}_3\text{SO}_2^\circ$
(фрагмент)

кв. мех.
расчет
помер.
и. строи.

(отмечен 9690)

1980

Boyd R. J. et al

Can. J. Chem. 1980, 58,
N 4, 331-8

См H-SO_2 i III

ClCOSCH_3

20; 4.11.

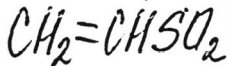
X.1981 N 17

1980

17 Б318. Барьер внутреннего вращения метильной группы и постоянные квадрупольного взаимодействия в S-метилхлортиоформате. Caminati W., Bohn R. K., True N. S. Methyl barrier to internal rotation and quadrupole coupling constants in S-methylchlorothioformate. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 2, 355—361 (англ.)

Измерены в области частот 8—40 ГГц МВ-спектры двух изотопич. образцов S-метилхлортиоформата, $^{35}\text{ClCOSCH}_3$ (I) и $^{37}\text{ClCOSCH}_3$ (II), в основном колебательном состоянии. Анализ спектров выполнен в приближении жесткого волчка с учетом A—E расщепления переходов из-за внутреннего вращения метильной группы и Cl-ядерного квадрупольного взаимодействия. Для I и II, соотв., вращательные постоянные равны (в МГц) $A=6986,1(3)$ и $6971,6(5)$, $B=2033,35(1)$ и $1979,57(1)$, $C=1590,28(1)$ и $1556,45(1)$ и барьеры внутреннего вращения $V_3=893,0(20)$ и $890,0(20)$ кал/моль. В предположении, что главная квадрупольная z-ось направлена вдоль связи C—Cl, определены постоянные квадрупольного взаимодействия для I и II, соотв. (в МГц): $\chi_x=40,1$ и $32,1$, $\chi_z=-66,9$ и $-52,8$. Полученные МВ-данные отнесены к син-конформации молекулы.

С. Н. Мурзин



молекула
структура

№ 1981/6

6 Б269. Исследования структур и конформаций. 14. Расчеты методом ЧПДП и электронный парамагнитный резонанс алифатических сульфонильных радикалов. Chatgililoglu Chrysostomos, Gilbert Bruce C., Norman Richard O. C. Investigations of structure and conformation. Part 14. INDO and electron spin resonance studies of aliphatic sulphonyl radicals. «J. Chem. Soc. Perkin Trans.», 1980, Part 2, № 10, 1429—1436 (англ.)

При t -рах -30 — -130°C исследованы спектры ЭПР ряда алифатич. сульфонильных радикалов RSO_2 , полученных фотолизом p -ров, содержащих перокись ди-трет-бутила, триэтилсилан и сульфонилхлориды. Определены константы СТС от α - и β -протонов ($\text{C}_\beta-\text{C}_\alpha-\text{SO}_2$). Для нек-рых радикалов обнаружен эффект уширения линий ЭПР при понижении t -ры, обусловленный затрудненным внутренним вращением. На основе анализа эксперим. данных определены особенности конформаций полученных радикалов. Сделанные выводы подтверждены результатами квантовохимич. расчетов, выполненных методом ЧПДП. С помощью данных ЭПР определены особенности структуры нек-рых новых алкеносульфонильных радикалов ($\text{CH}_2=\text{CHSO}_2$ и т. д.). Сообщ. 13 см. Gilbert B. C., Gill B., «J. Chem. Soc. Perkin Trans.», 1979 II 773

C-11-5-0

1980

11Б50. Структура сульфоксидных молекул. Nag-
gittai István. Szulfoxidmolekulák szerkezete. «Kém.
közl.», 1979 (1980), 52, № 3—4, 473—490 (венг.; рез.
англ.)

Обзор структурных данных для свободных молекул
с трехкоординированным атомом серы и терминальной
связью сера—кислород, включающих симметрично за-
мещенные сульфоксиды и циклич. сульфиты. Рассмотре-
ны также аналогичные соединения селена. Показано,
что геометрич. вариации конфигурации связей серы
в сульфоксидах можно интерпретировать в рамках мо-
дели отталкивания валентных электронных пар. Длина
нескольких связей $S=O$ и $Se=O$ оценена при помощи
эмпирич. соотношений, установленных между геомет-
рич. и колебательными параметрами. Библ. 67. Резюме

Обзор.



1980

21 Б225. Спектры комбинационного рассеяния и конформация метокси(метилтио)-метана. Matsuura Hi-goatsu, Kimura Keiko, Murata Hiromu. Raman spectra and conformation of methoxy(methylthio)-methane. «J. Mol. Struct.», 1980, 64, 281—284 (англ.)

спектр К.Р.

Дж. М. М.

Исследованы спектры КР метокси(метилтио)-метана $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{SCH}_3$ (I) в жидком (T от 20 до -40°), стеклообразном (неотожженном) и кристаллич. состоянии ($T=77\text{ K}$). Проведен расчет частот нормальных колебаний I, силовые постоянные выбраны такими же, как для алкиловых эфиров и сульфидов, расчет проводили для различных конформаций I. Сравнение результатов теор. расчетов с эксперим. данными показывает, что в тв. и стеклообразном состоянии I находится в гош-гош-конформации. Полосы 685 и 734 см^{-1} отнесены к симм. и антисимм. вал. кол. связей $\text{C}-\text{S}$ соотв. Отмечено сильное взаимодействие этих колебаний с вал. кол. связей CH_2-S и $\text{S}-\text{CH}_3$. В жидком состоянии появляются доп. линии с частотами 786 , 708 и 408 см^{-1} , к-рые отнесены к колебаниям транс-гош-изомера. А. В. Бобров

Х. 1980 № 21

$(CH_3O)_2SO$ ommua 10020 | 1980
Powers D; Olson H.G.

guala
clady
5-0

J. Chem. Phys, 1970,
73 (5), 2271-79

1980

C-H-O-S-соедин.

12 Д497. Строение и колебательные спектры этилтионформата. Structure and vibrational spectra of ethylthionformate. Randhawa H. S., Grewal G. S., Arora C. L., Sarin V. N. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1980, 18, № 11, 926—928 (англ.)

Di, геометр.

Получены ИК-спектры ($4000-400\text{ см}^{-1}$) газообразного этилтионформата (I), а также поляризационные спектры комб. рас. жидкого I при возбуждении лазерной линией $514,5\text{ нм}$. Проведен анализ колебательных спектров I в группе симметрии C_s для цисконфигурации I. Интерпретация колебательных полос в спектрах I выполнена с учетом положения полос аналогичных колебаний в спектрах метилтионформата и ряда эфиров. Интенсивная линия 1015 см^{-1} в спектре комб. рас. I сопоставлена вал. кол. связи $C=S$. Обсуждены возможные конфигурации молекул I в жидкой и газообразной фазах. Предположено, что молекулы I имеют

Ф. 1981, 18, N 12.

плоскую или почти плоскую конфигурацию, при которой величина барьера вращения этильной группы составляет 0,45 ккал/моль. Сделан вывод, что величина барьера вращения этильной группы в I обусловлена эффектами гиперсопряжения π -орбиталей кольца и $1s$ -орбиталей атомов водорода метиленовой группы.

И. В. А.

e n.

St CH₂CH₂
CH₂CH₂

$C_6H_4SO_3$

Смесь 15339

1980

электрон.
дифрак-
ция,
структура

Schultz G.,
Hargittai I.,
Kem. Kozl., 1980,
54, 276 - 282.

$(CH_2)_3SO$

оттиск 9916

1980

ав. мех.
расчет

✓ 22 Б58. Теоретическое изучение молекулярной структуры триметиленсульфоксида и анализ локальной симметрии метиленовых групп. Skancke Per N., Boggs James E., Bevan John W. A theoretical study of the molecular structure of trimethylene sulfoxide with emphasis on the local symmetry of the methylene groups. «Acta chem. scand. A: Phys. and Inorg. Chem.», 1980, 34, № 3, 223—227 (англ.)

Х. 1980 N 22



Выполнен неэмпирич. расчет с полной оптимизацией геометрии экваториальной формы триметиленсульфок-

сида $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{S} \rightarrow \text{O}$. (I). Использовались базисы: для атомов С, O—4—21ГФ, для атома S—3—3—21ГФ, дополненный набором поляризац. *d*-АО. Расчетные длины связей и валентные углы хорошо согласуются с экспериментальными. Расчетный угол сморщивания цикла (32° , 8) также очень близок к эксперим. величине 34° , 9. Найдено, что метиленовые группы I деформированы, при этом результаты расчета позволяют сделать выбор между двумя альтернативными эксперим. наборами параметров искажения. Канонич. МО I преобразованы к локализованным (ЛМО) согласно критерию Бойза. Найдено, что центроиды ЛМО связей С—С и особенно С—S смещены и находятся не на прямых, соединяющих соотв. ядра, а снаружи от них. При этом центроиды ЛМО связей С—С лежат в плоскости ССС, а связей С—S — смещены из плоскости CSC в сторону атома О. Указанные эффекты обсуждаются в связи с принципом миним. извилистости связей. В. Я. Беспалов

CH_3SOCH_3

1980

Tanabe Kazutoshi, et al

Chem. Phys. Lett., 1980,

71, N3, 460-62.

ν_i , ширина

полос

● (с см CH_3OH) III

HCOSH

Оттиски 10164

1980

23 Б193. Колебательный спектр, силовое поле и торсионная потенциальная функция монотиоуравьиной кислоты в газовой фазе. Winnewisser B. P., Hocking W. H. Vibrational spectrum, force field, and torsional potential function of monothioformic acid in the gas phase. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 14, 1771—1782 (англ.)

Измерены ИК-спектры со средн. разрешением молекул HCOSH (I), $H^{13}COSH$, $HC^{18}OSH$, $DCOSH$ и $HCOSD$ в газовой фазе. На основании найденных изотопных сдвигов и сопоставления со спектрами родственных молекул дано отнесение наблюдаемых полос поглощения к плоским транс- и цис-конфигурациям молекулы I. Из эксперим. частот колебаний, исправленных на агармоничность, и данных по постоянным центробежного искажения (с учетом измерений для молекулы $HCOS^{34}SH$) с помощью МНК с регуляризацией рассчитаны наборы

сил. пост.

потенц. функции

и к. спектры

$\bar{\nu}$; см.⁻¹

X. 1980 № 23

силовых постоянных для двух форм молекулы I в приближении общего валентно-силового поля. Решены прямые колебательные задачи и исследовано влияние геометрии на рассчитываемые частоты колебаний для данного силового поля. Показано, что значения силовых постоянных существенно зависят от используемой модели. По торсионным частотам двух конформеров и разности между их уровнями энергии в основном состоянии, найденными ранее из вращательного спектра, определены первые три коэф. в косинусоидальном разл. одномерного торсионного потенциала. Обсуждены потенциальные ф-ции ряда родственных молекул.

Ю. Н. Панченко

ИСОСН

и.к. спектр

м.п; Но;
геометрия

ф. 1980
N 12

12 Д436. Колебательный спектр, силовое поле и потенциальная функция крутильного колебания монотио-муравьиной кислоты в газовой фазе. Vibrational spectrum, force field, and torsional potential function of monothioformic acid in the gas phase. Winnemisser B. P., Hocking W. H. «J. Phys. Chem.», 1980, 84, № 14, 1771—1782 (англ.)

Получены ИК-спектры ($4000-200\text{ см}^{-1}$) пяти изотопич. аналогов (^{13}C , ^{18}O , D) монотио-муравьиной кислоты (I) в газовой фазе. Идентифицированы ИК-полосы цис- и транс-ротамеров I. Выполнен расчет констант валентного силового поля и определены значения постоянных центробежного искажения перечисленных изомеров I. Обсуждены корреляции между структурой изомеров I и величиной барьера внутреннего вращения вокруг связи C—S в I. Потенциалы V_1 и V_2 крутильного колебания в I составляют 2,86 и 40,77 кДж/моль соответственно. Отмечено подобие потенц. ф-ций крутильного колебания в молекулах I и муравьиной кислоты. Предположено, что величина потенц. барьера крутильного колебания в изомерах I отражает степень сопряжения в области связи C—S и меру стабилизации плоских конформаций I. Библ. 41. И. В. А.

1980

10164
мтм

C-H-O-S-соедин.

1981

12 Д481. Микроволновый спектр, конформация и дипольный момент 4-тиациклогексанона. Microwave spectrum, conformation, and dipole moment of 4-thiacyclohexanone. Alonso José L. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 110—118 (англ.)

Микроволнов.
спектр, Vi

В диапазоне 18—40 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы 4-тиациклогексанона. Методами двойного РЧ—МВ-резонанса и штарковской модуляции идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 14$ в основном состоянии и в шести низлежащих возбужденных состояниях изгибного и крутильного колебаний кольца. Наблюдаемый спектр соответствует креслообразной конформации кольца. Определены значения вращательных постоянных, постоянных квадратичного центробежного искажения и дипольного момента ($\mu_a = 1,409$, $\mu_c = 0,391$ ед. Дебая). По относит. интенсивности линий основного и возбужденных состояний оценены частоты изгибного (77 см^{-1}) и крутильного (204 см^{-1}) колебаний кольца. М. Р. Алиев

ф. 1981, 18, № 12.

C-H-S-O - соедин.

1981

24 Б285. Микроволновый спектр, конформация и дипольный момент 4-тиациклогексанона. Alonso J. L. Microwave spectrum, conformation, and dipole moment of 4-thiacyclohexanone. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 87, № 1, 110—118 (англ.)

геометр.;

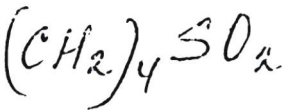
Измерен в области частот 18,0—40,0 ГГц МВ-спектр 4-тиациклогексанона в основном и восьми возбужденных колебательных состояниях. При идентификации МВ-переходов использован метод РЧ—МВ двойного резонанса. Анализ спектров выполнен на основе гамильтониана в представлении Уотсона с учетом эффектов центробежного искажения первого порядка. Для всех состояний определены вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и главные моменты инерции. Вращательные постоянные в основном состоянии равны (в МГц) $A=3935,149(31)$, $B=1829,444(1)$, $C=1364,609(1)$, а постоянные центробежного искажения — (в кГц) $\Delta_J=0,22(2)$, $\Delta_{JK}=-0,70(2)$, $\Delta_K=-3,22(2,16)$, $\delta_J=0,04(1)$, $\delta_K=-0,68(11)$. По эф-

X.1981, 19, №24.

фекту Штарка второго порядка для четырех переходов
 определены компоненты дипольного момента $\mu_a =$
 $= 1,409(2)D$, $\mu_c = 0,391(64)D$ и полный дипольный мо-
 мент $\mu = 1,462(39)D$. Полученные МВ-данные отнесе-
 ны к конформеру с кольцом типа кресла с возможными
 углами связей $\angle C_2C_1C_6 = 117,2^\circ$, $\angle C_2C_3S_4 = 111,8^\circ$,
 $\angle C_1C_2C_3 = 112,7^\circ$. Из измерений относит. интенсивностей
 линий определены частоты колебательных мод.
 С. Н. Мурзин



1981



м. в. спектр

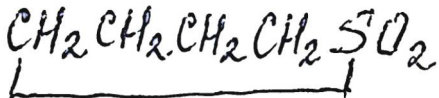
4.17.

9 Д458. Микроволновый спектр сулфолана. Microwave spectrum of sulfolane. Alonso José L. «J. Mol. Struct.», 1981, 73, 71—78 (англ.)

В диапазоне 26,5—40 ГГц измерен микроволн. спектр циклич. молекулы $(\text{CH}_2)_4\text{SO}_2$. Идентифицированы линии вращательных переходов R -ветви основного колебательного состояния и первых трех возбужденных состояний изгибного колебания кольца. Определены значения вращательных и кватричных центробежных постоянных. Распределение интенсивности по линиям, связанное со статистикой ядерных спинов, и квазилинейная зависимость вращательных постоянных от колебательного состояния показывают, что пятичленное кольцо сулфолана имеет или изогнутую форму с псевдовращением или же квазиплоскую форму.

М. Р. Алиев

Ф. 1981 №9



1981

17 Б315. Микроволновый спектр сульфолана. Also J. L. Microwave spectrum of sulfolane. «J. Mol. Struct.», 1981, 73, 71—78 (англ.)

Измерен в области частот 26,5—40,0 ГГц МВ-спектр сульфолана, $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SO}_2$, в основном и первых

трех возбужденных состояниях деф. кол. кольца. Анализ спектра выполнен с использованием гамильтониана в представлении Уотсона в приближении квартичного центробежного искажения. В колебательных состояниях $v=0, 1, 2$ и 3 соотв. вращательные постоянные равны (в МГц) $A=3780,814(326), 3784,885(411), 3788,047(517)$ и $3791,807(579), B=2047,243(6), 2049,909(7), 2052,213(11)$ и $2054,255(5), C=1899,572(6), 1902,996(8), 1906,203(12)$ и $1909,302(5)$, а постоянные центробежного искажения (в кГц) — $\Delta_J=0,15(5), 0,14(3), 0,15(5)$ и $0,14, \Delta_{JK}=4,36(19), 3,71(15), 3,60(9)$ и $4,36, \Delta_K=-113(72), 140(93), 377(138)$ и $414(40), \delta_K=-4,50(1,48), 0, 0$ и 0 . Полученные данные согласуются с двумя альтернатив-

М.И.

X. 1981 N 17

1981



кв. мет.,
расчет

11 Б56. «Син-эффект» в сульфинах и карбонилокси-
дах. Предпочтительные конформации CH_3CHSO и $\text{CH}_3\text{-}$
 CHOO . Block Eric, Penn Robert E., Bazzi
~~Ali A.~~, Cremer Dieter. The «Syn-effect» in sulfi-
nes and carbonyl oxides: conformational preferences of
 CH_3CHSO and CH_3CHOO . «Tetrahedron Lett.», 1981,
22, № 1, 29—32 (англ.)

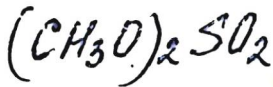
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО рассчитаны
конформации метилпероксиметилена CH_3CHOO (I) и
этанталь S-оксида CH_3CHSO (II). В обоих соедине-
ниях син-изомер стабильнее чем транс-, вне зависи-
мости от конформации метильной группы. Барьер вра-
щения метильной группы в син-конформации составляет
2,6 ккал/моль в I и 0,8 ккал/моль в II, причем в I-м

(+1) 



ж. 1981. N14

случае минимуму энергии отвечает анти-, а во 2-м случае син-конформация метильной группы относительно связи $C=X$ ($X=O, S$). Анти-изомер проигрывает син-изомеру 3,3 ккал/моль в I и 1,7 ккал/моль в II. Предсказанный порядок стабильностей изомеров II согласуется с имеющимися эксперим. данными. Предпочтительность син-изомеров I и II объяснена наличием в этой структуре стабилизирующих псевдоароматических σ - и π -стабилизирующих взаимодействий первое из которых доминирует в II, а второе в I. В. Фаустов



Оттиск 13945-1981

17 Б134. Геометрия и конформация диметилсульфата изученные методами электронографии и измерения дипольного момента. Brunvoll Jon, Exner Otto, Hargittai István. Geometry and conformation of dimethyl sulphate as investigated by electron diffraction and dipolometry. «J. Mol. Struct.», 1981, 73, 99—104 (англ.)

молекулярная
геометрия

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы диметилсульфата $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{SO}_2$ (I). Электронографич. данные были интерпретированы в предположении о существовании в газовой фазе I двух ротамеров симметрии C_2 и C_{2v} в соотношении 2:1. Это предположение согласуется с измерениями дипольного момента I и диэтилсульфата в р-ре бензола. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_g , pm) и углов: C—H 112,2(0,6), S=O 141,9(0,4), O—C 145,1(1,0), S—O 156,7(0,3), O...O 248,4(1,2), O...O (O=S—O) 242,1(0,7), O...O (O—S—O) 236,7(1,6), $\angle \text{OCH}$ 108,9(1,3)°, $\angle \text{S—O—C}$ 115,2(0,7)°, $\angle \text{O—S—O}$ 98,2(0,8)°, $\tau(\text{C—O—S—O})$ 47,8(2,1)°, $\angle \text{O=S=O}$ 122,3(0,8)°, $\angle \text{O=S—O}$ 108,7(0,4)°.

X. 1981 N 17

В. Спиридонов

HCOSCH_3

[Ommeck 13281]

1981

Caminati W.,

V_0 ;

J. Mol. Spectrosc.,
1981, 90, N 2, 315-320.

HCOSCH_3

1981

5 Д380. Определение барьера внутреннего вращения метильной группы в метилтиолформате по микроволновому спектру. The barrier to internal rotation of the methyl group in methyl thiolformate from microwave spectroscopy. Caminati Walther, Van Eijck Bouke P., Lister David G. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 90, № 1, 15—19 (англ.)

м.п., V_3

В диапазоне 16—40 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы метилтиолформата. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 20$ в основном колебательном состоянии, а также туннельное А—Е-расщепление линий с $J \leq 5$. Анализ спектра выполнен методами внутренних и главных осей с учетом квартичного центробежного искажения. Определены значения вращательных постоянных, постоянных квартичного центробежного искажения и барьера внутреннего вращения метильной группы ($V_3 = 1,75$ КДж/моль).

М. Р. Алиев

ф. 1982, 18, №5.

HCSOH

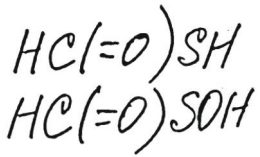
1981

George P. B. Charles W.,
et al.

кв. сек.
раств.
м. св. 34

Chem. Phys. Lett., 1981,
80, N1, 127-130.

(сер. HCOOH; III).



1981

George Philip, et al

Chem. Phys. Lett., 1981,
80, n 1, 127-130.

Кв. и. расчет
волн., ΔE



HCOSH .

1981

кислоты

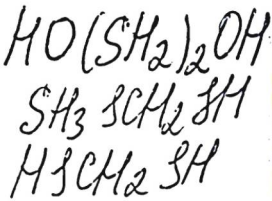
George P., et al.

получены,
см. под

J. Mol. Struct., 1981,
46, N4 (Theochem,
1981, 1, N4) 363-374.

(см. HCOSH ; III) .

1981



расчет
геометр,
структур

4

X. 1982, 19, № 5

5. Б76. Электронное строение и конформационная стабильность некоторых сераорганических соединений. Ohsaku Masaru, Murata Hiromu. Electronic structures and conformational stabilities of some organo-sulfur compounds. «J. Mol. Struct.», 1981, 85, № 1—2 («Geochem», 1981, 2, № 1—2), 125—131 (англ.)

Выполнены неэмпирич. расчеты конформаций молекул $\text{HO}(\text{SH}_2)_2\text{OH}$, $\text{HO}(\text{CH}_2)_2\text{SH}$, $\text{HS}(\text{CH}_2)_2\text{SH}$, HSCH_2SH и $\text{SH}_3\text{SCH}_2\text{SH}$ при эксперим. геометрии в базисах А) $\text{OCT}=\text{3ГФ}$, Б) $4-31\text{ГФ}$ и В) поляризованный базис с добавлением набора d -АО на атомах серы с орбитальной экспонентой 0,43 (оптимизирована для транс-гош-конформации HSCH_2SH). Всего изучено 36 конформаций. Для сравнения аналогичные расчеты проведены полуэмпирич. методом ППДП/2 в базисе spd' . Сравнение с эксперим. данными показывает, что базисы Б и В хорошо описывают конформац. стабильность изученных молекул. Базис А дает неудовлетворительные результаты для молекул с 2 атомами серы, переоценивая стабильность транс-конфигураций и, по-видимому, также энергетич. разности между конформерами.

В. Я. Беспалов

$\text{SH}_3\text{SCH}_2\text{SH}$

SCNOCN3

1981

12 Д498. Соотношение колебательных спектров с молекулярной структурой метилтиоформата. Vibrational spectra-molecular configuration correlation in methylthioformate. Randhawa H. S. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1981, 262, № 3, 561—566 (англ.)

При комнатной т-ре исследованы спектры ИК-поглощения и комб. рас. в области $500-3100\text{ см}^{-1}$ метилтиоформата SCNOCN3 (I) в газообразном состоянии. Отнесение наблюдаемых частот проведено на основании сопоставления со спектрами сходных молекул. Анализ распределения относит. интенсивностей и формы контуров колебательно-вращательных полос в спектрах ИК-поглощения позволил высказать предположение, что в молекулах I алкильные группы занимают цисположение относительно тиокарбонильных групп. Барьер внутреннего вращения метильных групп составляет $0,75\text{ ккал/моль}$.

м.п., ν_i , ν_o

ср. 1981, 18, N 12.

C-H-S-O
(сезим.)

1981

24 Б156. Циклопентадиентион. Schulz Reinhard, Schweig Armin. Cyclopentadienthion. «Angew. Chem.», 1981, 93, № 6—7, 603—605 (нем.)

Методом фотоэлектронной спектроскопии исследован термич. распад 1,2,3-бензоксакситиол-2-оксида и 1,3-бензоксатиол-2-она. Оба спектра обнаруживают ионизац. полосы неизвестного соединения, идентифицированного как циклопентадиентион (I). На основании расчетов электронного строения I полуэмпирич. методами МПДП и ППДП/С ионизац. полосы I получили след. отнесения (приведены после эксперим. значений потенциалов ионизации, эВ): 8,87 $^2B_2(n_s)$, 9,18 $^2A_2(\pi)$, 10,35 $^2B_1(\pi)$. В. Фаустов

Эл. спектр
21

X. 1981, 19, № 4.

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{SH}$
• SH

1981

19 Б311. Микроволновый спектр цис-тиопропионовой кислоты. Takahashi Y., Yamaguchi I. Microwave spectrum of cis-thiopropionic acid. «J. Mol. Struct.», 1981, 74, № 1, 43—47 (англ.)

Измерен в области частот 10—35 ГГц МВ-спектр цис-тиопропионовой к-ты, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{SH}$, в основном колебательном состоянии. Выполнена обработка данных для 32 отнесенных переходов с использованием гамильтониана в представлении Уотсона с учетом квартичного центробежного искажения. Определены вращательные постоянные (МГц): $A=8729,128$ (30), $B=2389,545$ (8), $C=1922,548$ (9) и постоянные центробежного искажения (в кГц) $d_J=-0,93$ (15), $d_{JK}=3,3$ (6,4), $d_K=48$ (20), $d_{wJ}=0,58$ (6) $\cdot 10^{-3}$, $d_{wK}=-5,2$ (3,1) $\cdot 10^{-3}$. По эффекту Штарка 2-го порядка для 3 переходов определены компоненты дипольного момента $\mu_a=0,40$ (2) D, $\mu_b=1,56$ (19) D и полный дипольный момент $\mu=1,61$ (20) D. При расчетах предполагали, что компонента μ_c равна нулю. Модельный расчет вращательных постоянных и компонент дипольного момента подтвердили выполненное отнесение МВ-спектра к цис-конформеру тиопропионовой кислоты с транс-положением связи S—H по отношению к $\text{C}_1\text{—C}_2$ связи.

М.Н.

X. 1981, N19

Основное состояние другого, гом-конформера расположено, приблизительно, на 400 см^{-1} выше по сравнению с цис-конформером. Полученные результаты согласуются с известными данными для родственных молекул, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COF}$ и $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$. С. Н. Мурзин

MC(S)OH
MC(O)SM
кв. мех.
расст
геометрия

1981

Trenerry V. Craige
et al.
Nouv. j. chim., 1981,
5, N 3, 193 - 199.

(ср. SiH_3^+ ; III)