

502

Ornithen 9691

1980

Эггекс

Bartell L.S

Амарион.

Косебасси

J. Mol. Struct., 1980,
63, 259-71

SO₂

(номер 9654) 1980

Bestmann F., et al.

вращат.
спектр

Z. Naturforsch., 1980,

(Фурье-спектр.) 35a, 392 - 402.

1980

SO₂

93: 32000m Loop-driven graphical unitary group approach to the electron correlation problem, including configuration interaction energy gradients. Brooks, B. R. (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, CA USA). *Report* 1979, LBL-9998, 145 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Energy Res. Abstr.* 1980, 5(5), Abstr. No. 7728. The graphical unitary group approach (GUGA) was reformatted by restructuring the Hamiltonian in terms of loop types. This allows the adoption of the loop-driven formulation which illuminates vast nos. of previously unappreciated relationships between otherwise distinct Hamiltonian matrix elements. The GUGA method may be used to obtain 1-electron and 2-electron d. matrices. Once these known, the anal. gradients of the CI potential energy can easily be obtained. Test calcs. are examd. to illustrate the unique features of the method. A calcn. on the asym. 2¹A' state of SO₂ with 23,613 configurations is included to demonstrate the diagonalization methods for very large matrices on a minicomputer.

rb. sec.
secret

CA 1980 93 v 4

SO₂

1980

раств
молекулы

Brooks B. R. et al

Phys. ser., 1980, 21,
N 3-4, 312-22

См BM₃ ; III

1980

SO₂

93: 34298p Electronic spectra of sulfur dioxide and laser excitation of nitrogen dioxide nitrogen-15 species. Chiu, Pay Hung (Univ. West. Ontario, London, ON Can.). 1979. No pp. Given (Eng). Avail. Natl. Libr. Canada, Ottawa, Ont. From *Diss. Abstr. Int. B* 1980, 40(10), 4835.

21. Check

CA 1980 93 N 4

SO₂.

спектр

ж. 1981, № 1

1980
10 B126. Нестационарное сжатие и МФИ спектры SO₂ в области длин волн однофотонного перехода $^3B_1-^1A_1$. Colson Steven D., Cheung Wan Yee, Glowina James H., Riley Stephen J. The transient lensing and MPI spectra of SO₂ in the $^3B_1-^1A_1$ single photon wavelength region. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 76, № 3, 515—519 (англ.)

Методами нестационарного сжатия статич. газа, многофотонной ионизации (МФИ) статич. газа и сверхзвукового газового потока исследован спектр молекулы SO₂ в области 360—390 нм (переход $^3B_1-^1A_1$). В качестве источника линейно и циркулярно поляризованного света использовался перестраиваемый лазер на красителях. При интерпретации спектров учитывалась их поляризац. зависимость. Проведено качеств. сопоставление спектров полученных различными методами. На некоторых полосах наблюдалось резонансное усиление МФИ, что объясняется наличием промежут. резонансов с участием более чем одного возбужденного состояния молекулы (ранее это явление наблюдалось у двухатомных молекул). В спектре МФИ обнаружены полосы прогрессии

трехфотонного перехода в ридберговское состояние.

В. М. Ковба

10 Б197. Помещается под трифотонным светом

СССР
а Вл
11

SO₂

1980

Д 450. Фотофрагментация пучка ионов H_2^+ с энергией 2 МэВ под действием излучения УФ-лазера.
Cue N., Edwards A. K., Gemmell D. S., Kanter E. P., Kutina R. «Mol. Ions, Mol. Struct. and Interaction Matter. Proc. 38 Bat-Sheva Semin., Haifa». Bristol; New York, 1980, 194—197 (англ.)

Исследована фотофрагментация пучка ионов H_2^+ с энергией 2 МэВ под действием излучения ArF-лазера (193 нм). Энергетический анализ фотофрагментов проведен с помощью электростатич. анализатора. Приведены кривые распределения кинетич. энергии фотофрагментов, а также кривые энергетич. распределения фрагментов, образующихся при индуцированной столкновениями диссоциации H_2^+ в газовой фазе. Показано, что освобождающаяся при фотофрагментации энергия соответствует энергии абсорбционных переходов с низлежащих колебательных уровней состояния $1s\sigma_g$ в состояние $2p\sigma_u$.

А. В. Н.

Do;

(4) 

ор. 1983, 18, N 5 SO (спектр)

ommun 10391

1980

SO₂

93: 227871d Single rovibronic level lifetimes of the ¹A₂ state of sulfur dioxide excited in the 3043 Å ("E") band: rotationally resolved fluorescence emission spectrum. Holtermann, Dennis L.; Lee, Edward K. C.; Nanes, Roger (Dep. Chem., Univ. California, Irvine, CA 92717 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 75(1), 91-3 (Eng). Rotationally resolved resonance fluorescence from selected rovibronic levels of the SO₂ (¹A₂) mol. was studied at low pressure. The collision-free lifetime is $13.4 \pm 1.3 \mu\text{s}$. The sum of the cross sections for the collision-induced electronic quenching and nonspecific rotation-vibration relaxation is $\approx 480 \text{ Å}^2$.

чекр
p. yopcey

Q.A. 1980.93, 124

SO₂

спектры
флуорес.

х. 1981. N° 5

1980

5 Б194. Индуцируемые столкновениями вращательные переходы в электронно-возбужденных состояниях: применение дипольных правил отбора к SO₂($\tilde{A}^1A_2$). Holtermann Dennis L., Lee Edward K. C., Nanes Roger. Collision-induced rotational transitions in electronically excited states: the application of dipole-type selection rules to SO₂($\tilde{A}^1A_2$). «Chem. Phys. Lett.», 1980, 75, № 2, 249—253 (англ.)

С высоким разрешением измерены возбуждаемые лазером спектры флуоресценции молекулы SO₂. Накачивали определенные линии (Γ, K_a') подветви P в полосе «E» Клементса (3043 Å). Изучена зависимость структуры и интенсивности спектров от давления. Показана предпочтительность возбуждаемых столкновениями переходов с $\Delta K_a' = \pm 1$ в состоянии A^1A_2 . Опре-

10391

делены скорости вращательной релаксации возбужденных уровней. Рассчитанные сечения столкновений для $\Delta K_a = \pm 1$ в предположении, что второй сталкивающейся молекулой является SO_2 в состоянии $\tilde{X}^1A_1$, составляют ~ 50 А, что близко к газокинетич. значению. Предложен механизм релаксации, включающий один радиационный процесс и четыре разных возбуждаемых столкновениями процесса релаксации. Отмечено, что основные особенности релаксации в состоянии $\tilde{A}^1A_2$ молекулы SO_2 согласуются с дипольными правилами отбора для столкновительных вращательных переходов.

С. Б. Осин

1980

SO₂чекмп
гидрофесу

93: 227974q Collision-induced rotational transitions in electronically excited states: the application of dipole-type selection rules to sulfur dioxide (A^1A_2). Holtermann, Dennis L.; Lee, Edward K. C.; Nanes, Roger (Dep. Chem., Univ. California, Irvine, CA 92717 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 75(2), 249-53 (Eng). Collision-induced rotational energy transfer from selected J', K'_a levels of electronically excited SO_2^* ($A^1 A_2$, E-band) was monitored by the pressure dependence of rotationally resolved fluorescence emission. Propensities for collision-induced transitions of $\Delta K'_a = +1$ or $\Delta K'_a = -1$ occur with selection rules.

00. 007005 - 1



C.A. 1980. 23N24

SO_2

[common gas]

1980

Ishiwata, et al.

chem

reaction.

J. Phys. Chem., 1980

by O-CO₂-O₂/O₂

84, 119-22.

SO₂

1980

расчет
спектра

поглощения

1 Д88. Исследование рентгеновских спектров поглощения молекулы SO₂ методом Хартри — Фока — Рутана. Кондратенко А. В., Мазалов Л. Н., Нейман К. М. «Оптика и спектроскопия», 1980, 49, № 3, 488—492

Методом Хартри — Фока — Рутана рассчитаны высоковозбужденные состояния и резонансы молекулы SO₂. Результаты расчета находятся в удовлетворительном согласии с эксперим. К- и L-спектрами поглощения молекулы.

Резюме

Ф. 133/н-1

SO₂

1980

Mathai T. A., et al.

Proc. Indian Acad. Sci.
Chem. Sci., 1980, 89, 13,
225-30.

Vi; M. B.
спектр

см. O₃ - II

оттиски 9580

1980

SO₂

9 Д194. Два колебания с большой амплитудой в трехатомных молекулах. Силовое поле состояния ${}^1B_2({}^1A')$ молекулы SO₂. Two large-amplitude motions in triatomic molecules. Force field of the ${}^1B_2({}^1A')$ state of SO₂. Mezey Paul G., Ramachandra Rao Ch. V. S. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 1, 121—125 (англ.)

J_2 ; сил. пост

Колебательный гамильтониан, построенный ранее (Brand J. C. D., Rao Ch. S. R. «J. Mol. Spectr.», 1976, 61, 360) для трехатомной молекулы, имеющей два колебания с большой амплитудой, применен для расчета энергии колебательных уровней и ф-ции потенц. энергии возбужденного электронного состояния ${}^1B_2({}^1A')$ молекулы SO₂; в этом состоянии потенц. ф-ция вдоль координаты ρ_3 имеет два минимума. По эксперим. данным для энергии 12 колебательных уровней S¹⁶O₂ и S¹⁸O₂ вычислены значения 9 параметров потенц. энергии SO₂.
М. Р. Алиев

1502-111

Ф 1980 №9

omnick 9580

1980

SO₂

C.A. No. 1

No

X11-2057-1509-117

92: 101617m Two large-amplitude motions in triatomic molecules. Force field of the ${}^1B_2(1A')$ state of sulfur dioxide. Mezey, Paul G.; Rao, Ch. V. S. Ramachandra (Dep. Chem. Chem. Eng., Univ. Saskatchewan, Saskatoon, SK Can. S7N 0W0). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(1), 121-5 (Eng). A program was developed to calc. the energy levels assocd. with the 2 large-amplitude stretching vibrations ν_1 and ν_3 of a bent triat. mol. in which the ν_3 oscillation occurs in a double min. potential. By employing the 2 large-amplitude Hamiltonian $H_0(\rho_1, \rho_3)$ obtained earlier by J. C. D. Brand and Ch. V. S. Rao (1976), the vibrational energy levels ($\nu_4, \nu_3^{\text{even/odd}}$) of SO₂ mol. in its ${}^1B_2(1A')$ excited state were calcd. The 9 parameters of the potential function $V_0(\rho_1, \rho_3)$ were then adjusted to give a least-square fit to the 12 obsd. vibrational term values corresponding to the levels ($\nu_1, \nu_3^{\text{even}}$) of S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂. A 3-dimensional picture of the potential surface $V_0(\rho_1, \rho_3)$ using the final set of force consts. is also presented. The saddle point of this surface is at ($\rho_1^0 = 1.5525$ Å, $\rho_3^0 = 0.0$ Å) and the abs. min. occur at ($\rho_1^0 = 1.5644$ Å, $\rho_3^0 = \pm 0.0745$ Å). Barrier height, i.e., the height of the saddle point above the abs. min. is 140 cm⁻¹.

C.A. 1980. 02 N12

SO₂

15 Б68. Двумерное движение большой амплитуды в трехатомных молекулах. Силовое поле для ${}^1B_2({}^1A')$ состояния SO₂. Mezey Paul G., Ramachandra Rao Ch. V. S. Two large-amplitude motions in triatomic molecules. Force field of the ${}^1B_2({}^1A')$ state of SO₂. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 1, 121—125 (англ.)

Исследована задача описания колебательных уровней молекул S¹⁶O₂ и S¹⁸O₂ в возбужденном электронном состоянии 1B_2 . Гамильтониан $H(\rho_1, \rho_3)$ позволял рассмотреть движение по двух валентным координатам, ρ_1 и ρ_3 , как движение большой амплитуды. Вариац. методом в базисе из 300 произведений ф-ций гармонич. осцилляторов рассчитаны уровни (ν_1, ν_3) и далее МНК 12 экспериментально найденным частотам колебаний S¹⁶O₂ и S¹⁸O₂ определены 9 параметров потенциала $V(\rho_1, \rho_3)$, представляющего собой ф-цию с двумя минимумами относительно антисимм. валентной координаты ρ_3 . Высота барьера перехода от одного минимума к другому получена равной ~ 140 см⁻¹. Найденная поверхность близка к поверхности, восстановленной ранее в рамках формализма малых колебаний, однако, в большей степени изотопически инвариантна.

Б. И. Жилинский

Д. И. с. и. л. п. о. т. 1

XII-2057

X 1980 № 15

1980

9380
m m m m

1980

SO₂

11 Б265. Измерения эффекта Зеемана в SO₂. Внутренний стандарт для магнитного поля. Miller Douglas J., DeLeon Robert, Muentner J. S. Zeeman effect measurements in SO₂. An internal magnetic field calibrant. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 2, 283—287 (англ.)

Предложено использовать эффект Зеемана для перехода $2_{02} - 1_{11}$ (12257 МГц) в диоксиде серы в качестве калибровочного стандарта для магнитного поля. Измерены зеемановские вклады в радиочастотные переходы $M=0 \rightarrow M=+1$ и $M=0 \rightarrow M=-1$. Наблюдены частоты 1349,2(2) и 2570,7(2) кГц и зеемановские расщепления $\nu_1=1965,00$ и $\nu_2=1954,84$ КГц соотв. для этих переходов. (состояние 1_{11} SO₂). Показано, что расщепления, к-рые предложено использовать для калибровки магнитного поля, зависят линейно от магнитного поля. Для перпендикулярных правил отбора получен коэф.

Эффект
Зеемана

Л. 1981. N 11

Зеемана, равный $0,5282(3)$ МГц/кГ. Для параллельных переходов коэф. Зеемана равен $0,3722(3)$ МГц/кГ. Показано, что знак вращательного магнитного момента SO_2 отрицателен. Отмечено, что зеемановские св-ва перехода $2_{02} \rightarrow 1_{11}$ SO_2 измерены с точностью, превышающей $0,1\%$. Полученные значения коэф. Зеемана позволяют проводить калибровку при обычных МВ-измерениях с точностью $0,1\%$ для магнитных полей порядка 10 кГ и более.

С. Б. Осин

SO₂

(X1-6301) BGP

1980

Mohan B.S.,

Pacrem
v. n.

Acta Phys. pol., 1980,
A57, N 3, 441-445.

1980

SO_2

N. F. Chetani

Monnanteuil N., et al;
Spectres Mol. Simples
Lab. Astrophys., Commun
Colloq. Int. Astrophys.
21st 1977 (Pub. 1980),
469-79.

(Cell. H_2O ; III)

502

1980

J. Mol. Spectr. 1980, 84 318 ERRATUM

Volume 81, Number 2 (1980), in the article, "Coriolis Intensity Perturbations in the SO₂ Molecule. Experimental Determination of the Relative Signs of ($\partial\mu/\partial Q_i$)," by T. Nakanaga, S. Kondo, and S. Saeki, pp. 413-423:

The value of ν_2 in Table I (p. 414) should be 517.88, and a transition $23_{1,23} \leftarrow 22_{0,22}$ in "Q-branch lines in Table III (p. 419) should be $29_{4,26} \leftarrow 29_{3,27}$. In Fig. 1 (p. 416), the positive direction of the z axis should be reversed.



J. Mol. Spectr. 1980, 84 p 318

SO₂

1980

И. К. Скляр
поговорил

1 Д60. Возмущение интенсивности полос молекулы SO₂ кориолисовым взаимодействием. Экспериментальное определение относительных знаков производных ($\partial\mu/\partial Q_i$). Coriolis intensity perturbations in the SO₂ molecule. Experimental determination of the relative signs of ($\partial\mu/\partial Q_i$). Nakagawa Taisuke, Kondo Shigeo, Saeki Shinnosuke. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 81, № 2, 413—423 (англ.)

С разрешением 0,06 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения молекулы SO₂. Измерены интенсивности линий вращательной структуры полос ν_1 и ν_2 . С учетом кориолисова взаимодействия между колебаниями ν_3 и ν_1 , ν_2 выполнен расчет интенсивности линий с $J \leq 55$ полос ν_1 и ν_2 . По сравнению вычисленных и измеренных интенсивностей линий полос ν_1 и ν_2 определены относит. знаки производных дипольного момента по норм. координатам $\partial\mu/\partial Q_i$. Показано, что величины $\partial\mu/\partial Q_1$ и $\partial\mu/\partial Q_2$ имеют такой же знак, как и величина $\partial\mu/\partial Q_3$.

М. Р. Алиев

Ф. 198/1/

1980

SO₂

2 Б195. Кориолисовы возмущения интенсивности в молекуле SO₂. Экспериментальное определение относительных знаков ($\partial\mu/\partial Q_i$). Nakagawa T., Kondo S., Saeki S. Coriolis intensity perturbations in the SO₂ molecule. Experimental determination of the relative signs of ($\partial\mu/\partial Q_i$). «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 81, № 2, 413—423 (англ.)

М.П.

На фурье-спектрометре в области частот 495—1175 см⁻¹ с разрешением лучше чем 0,06 см⁻¹ измерен ИК-спектр поглощения ³²S¹⁶O₂ для глос ν_1 и ν_2 . Выполнена идентификация колебательно-вращательной структуры полос. Экспериментально измеренные интенсивности линий сопоставлены с расчетными значениями. Спектр проанализирован с учетом кориолисова взаимодействия между ν_1 и ν_3 и между ν_2 и ν_3 состояниями. Из результатов кориолисова анализа определены комбинации знаков для пр-ных от дипольного момента по

X. 1981 N 2

нормальным координатам $(\partial\mu/\partial\ddot{Q}_i)$ (+ - +), а именно, $(\partial\mu^y/\partial S_1)=1,53 \text{ D/A}$, $(\partial\mu^y/\partial S_2)=-2,71 \text{ D/A}$, $(\partial\mu^x/\partial S_3)=6,05 \text{ D/A}$. При определении знаков пр-ных использованы данные МО расчетов. Полученные результаты согласуются с МВ-исследованиями и находятся в противоречии с опубликованными ИК-данными. На основе полученных результатов вычислены компоненты полярных тензоров для атомов S и O, и обсуждена их связь со структурой молекулы. С. Н. Мурзин



SO₂

Ohwada Ken.

1980

J. Chem. Phys., 1980, 72,

paper N 1, 1-6.

curr.

norm.



curr CO₂; III

SO₂

($\nu_1 + \nu_3$)

1980
7 Д499. Спектральные интенсивности комбинационной полосы $\nu_1 + \nu_3$ SO₂ около 4 мк. Spectral intensities of the 4- μ m $\nu_1 + \nu_3$ combination band of SO₂. Pine A. S., Dang-Nhu M. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 84, № 1, 132—138 (англ.)

С помощью спектрометра, работающего на разности частот излучений Аг-лазера и лазера на красителе, получены спектры ИК-поглощения газообразной SO₂ вблизи 4 мк, связанные с колебательно-вращательной полосой $\nu_1 + \nu_3$. Калибровка спектра выполнена по эталону Фабри—Перо с абс. привязкой по линиям N₂O. Измерения проведены при давлениях, обеспечивающих доплеровский контур линии. По пиковым интенсивностям линий определены их интегр. интенсивности с абс. точностью $\approx 1\%$. Относит. интенсивности линий описаны ф-лами для асимметричного волчка. Сравнением рассчитанных значений с интенсивностью изолированных линий найдены интегр. интенсивность полосы, параметры обобщенного фактора Германа—Уоллиса и матричный элемент колебательного перехода. Обсуждаются причины расхождения найденной интенсивности с прежними данными. Библ. 15.
М. Т.

SO₂

Omniuck 10626 | 1980

Powers D; Olson H.G.

g. chem
chys
(S-O)

J. Chem. Phys., 1980, 73
(5), 2271-79

SO₂

1980

Sakai Yoshiko, et al.

Int. J. Quantum Chem.

1980, Quantum Chem.

расчёт
равновес.
геометрии

Symp. N 4, 107-112.

●
(см. NaF; III).

SO₂

спектры
флуоресценции

1980. Спектры флуоресценции диоксида серы из отдельных вибронных уровней. Shaw R. J., Kent J. E., O'Dwyer M. F. Single vibronic level fluorescence spectra of sulfur dioxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 82, № 1, 1—26 (англ.)

Измерены свыше 100 спектров флуоресценции газообразного SO₂ (давл. 1—2 Торр) с разрешением 10 см⁻¹, для возбуждения одиночных вибронных уровней к-рого в области соотв-щей $\tilde{A} - \tilde{X}$ -поглощению, применяли 1-ю гармонику (3280—2940 Å) перестраиваемого импульсного лазера на красителе. Наблюдаемые в спектрах прогрессии, соотв-щие полносимметричному колебанию, включали по меньшей мере 5 членов, интенсивности к-рых в области 30 972—31 776 см⁻¹ хорошо соответствуют распределению Франка-Кондона. В то же время 7 прогрессий полос в области 31 840—32 257 см⁻¹ этому распределению не подчиняются. Прогрессии, соотв-щие деф. кол. отсутствуют при низких уровнях возбуждения. С увеличением энергии возбуждения эти прогрессии появляется, а их длина медленно растет. Слабо проявляются также полосы с участием деф. колебания. Показано, что основное электронное состояние SO₂ (¹B₁) сильно связано вибронным взаимодействием с электронным состоянием ¹A₂.

А. Т. Суходольский

1980

Симметрия 10470

Ж. 1981. № 4

SD₂

Сотников А. И. и др. 1980

Изв. вузов. Физ., 1980,
23, № 5, 11-14.

Д. и. с. н. о. с. т.
и. н.



с. с. ОФ 2 ; III

SO_2

Оттиски 10062 1980

1 Б112. Ультрафиолетовые спектры возбуждения моноокиси дисульфида и двуокиси серы. Sung P. C., Chiu C. L. Ultraviolet excitation spectra of disulfur monoxide and sulfur dioxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 80, № 2, 459—461 (англ.)

М. П.

Повторно выполнены измерения УФ-спектров возбуждения паров SO_2 в электрич. разряде и показано, что система полос в области 2300—1900 А, к-рая ранее в аналогичных опытах была ошибочно отнесена к моноокиси дисульфида S_2O (G. Lakshminarayana, «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 55, 141), является на самом деле системой $C^1B_2 \leftarrow \bar{X}^1A_1$ молекул двуокиси серы SO_2 . Отмечено также, что на высших уровнях колебательной структуры полосы 2206 А SO_2 проявляются признаки преддиссоциации.

Б. В. Рассадин

Х. 1981 № 1

SO₂

1980

Tavouktsoglou A.N., et al

раот
рауот,
ремер.
E; м.н.

J. Chem Phys., 1980, 72,
N2, 1385-1394.



ср N₂ ; III

SO_2

см. см. 10072

1980

спектр
исследования

Tsai M, et al.
Chem. Phys. Lett;
1980, 73, (3), 407-412.

● (см. SO^+ ; III)

SO₂

1980

Ведрицкий Г.В. и др.

энергетич.
структ.
молекулы.

Теор. и энергетич. химия,
1980, 16, №1, 19-25.

см. SF₆ - III

SO₂

1980

Зюбин А.С., и др.

Ж. структур. химии, 1980,
21, №4, 3-8.

Кв. и к.
факт.



см. МД Fe-II

SO₂

1981

2 Д137. . Расчеты неэмпирическим методом МО оксидов, оксикислот и оксианионов S(IV) и S(VI). Ab initio MO calculations for the oxides, oxyacids, and oxyanions of S(IV) and S(VI). Baird N. Colin, Taylor Kathleen F. «J. Comput. Chem.», 1981, 2, № 3, 225—230 (англ.)

геометр.
структ.

Неэмпирическим методом ¹ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение соединений 4-валентной серы: SO₂ (I), H₂SO₃ (II), HSO₃⁻ (III), SO₃²⁻ (IV) и 6-валентной: SO₃ (V), H₂SO₄ (VI), HSO₄⁻ (VII) и SO₄²⁻ (VIII). Геометрия оптимизировалась в миним. базисе ОСТ-3ГФ* (с включением поляризационных *d*-ф-ций для атомов S), а энергетич. характеристики рассчитаны также в базисе 44-31ГФ с включением *d*-ф-ций. Обнаружено, что включение *d*-АО¹ приводит к понижению полных энергий на 109±7 и 169±±5 ккал/моль для соединений 4- и 6-валентной серы соответственно. Рассчитанные длины связей S—O и валентные углы с участием атомов S хорошо согласу-

(47)

ф. 1982, 18, 1/2.

см. на обороте

(и еще 4)

SO₂

1981

кв мех. расчет,
стабильн. и
структура

/95: 156998d Ab initio MO calculations for the oxides, oxyacids, and oxyanions of sulfur(IV) and sulfur(VI). Baird, N. Colin; Taylor, Kathleen F. (Dep. Chem., Univ. West. Ontario, London, ON Can. N6A 5B7). *J. Comput. Chem.* 1981, 2(3), 225-30 (Eng). Ab-initio MO calcns. for two series of S-O compds. are reported: the S(IV) system of SO₂, H₂SO₃, HSO₃⁻, and SO₃²⁻ and the S(VI) system of SO₃, H₂SO₄, HSO₄⁻, and SO₄²⁻. Geometries about the S atoms were optimized by using the STO-3G* basis set; energies at these geometries were computed by the STO-3G and 4-31G basis sets both with and without 5 Gaussian d-orbitals on S. The S-O bond lengths and the angles about the central atoms agree fairly well with expt. The stabilization energy assocd. with the addn. of the d-orbitals was a const. amt. per bond (~54 and 28 kcal/mol in the minimal and extended bases, resp.), in hypervalent compds. The isomer HSO₃⁻ was predicted to be more stable than SO₂(OH), but the reverse was true for HSO₂(OH) compared to SO(OH)₂. The deprotonation energies for the acids and the hydration energies for the oxides also were computed and compared with exptl. data.

~~17~~
(77)



на сайте

C. A. 1981, 95, N 18.

H_2SO_3 , HSO_3^- , SO_3^{2-} , SO_3 , H_2SO_4 ,
 HSO_4^- , SO_4^{2-}



SO₂

1981

4 Б31. Неэмпирические расчеты МО окислов, оксикислот и оксианионов четырех- и шестивалентной серы. Baird N. Colin, Taylor Kathleen F. Ab Initio MO calculations for the oxides, oxyacids, and oxyanions of S(IV) and S(VI). «J. Comput. Chem.», 1981, 2, № 3, 225—230 (англ.)

расчет
кометр,
структ.

⊗
(+7)

X. 1982,
19, w 4

Методом МО ЛКАО ССП изучено электронное и геометрич. строение соединений SO₂, SO₃, H₂SO₃, H₂SO₄, HSO₃⁻, HSO₄⁻, SO₃²⁻ и SO₄²⁻. Использованы базисы сгруппированных гауссовских ф-ций OCT-3ГФ (A), 44—31ГФ (B) и базисы с поляризац. d-функциями серы (Ad и Bd). Оптимизация геометрии (при фиксированных длинах связей O—H и углах SOH) проводилась в базисе Ad. Вычисленные расстояния S—O согласуются с эксперим. данными (средн. отклонение 0,02 ат.ед.). Они увеличиваются при переходе от окислов и оксикислот к оксианионам. Для валентных углов при атоме S согласие с экспериментом несколько хуже, однако расчеты удовлетворительно описывают отклонения от тетраэдрич. углов. Небольшое улучшение согласия с экспериментом (более короткие связи S—O) получено при

оптимизации геометрии SO_2 , SO_3 и H_2SO_3 в базисе Bd . Полные энергии при найденных геометриях вычислены с использованием всех базисов. Стабилизация при учете d -орбиталей составила ~ 28 ккал/моль ($\text{Bd}-\text{B}$) и ~ 54 ккал/моль ($\text{Ad}-\text{A}$) в расчете на одну связь. Расчеты изомеров в базисах Ad и Bd показали, что HSO_3^- стабильнее $\text{SO}_2(\text{OH})^-$ на ~ 5 ккал/моль, а $\text{SO}(\text{OH})_2$ стабильнее $\text{HSO}_2(\text{OH})$ на ~ 19 ккал/моль (эксперим. свободные энергии 2 и 4 ккал/моль соотв.). Расчеты в базисах A и B неправильно предсказывают относит. стабильность для обоих соединений. Вычислены также энергии депротонирования, к-рые качественно согласуются с эксперим. данными для водных растворов. Вычисл. энергии гидратации SO_3 и SO_2 составляют, соотв., $-30,4$ и $-7,2$ ккал/моль (эксперим. значения $-24,6 \pm \pm 2$ и $-1,7 \pm 3$ ккал/моль).

М. Гофман

SO₂

1981

96: 26508d High-resolution absolute frequency measurement of rotational transition $19_{3,13} \rightarrow 18_{4,14}$ in sulfur dioxide SO₂ at 820 GHz. Bicanic, D. D.; Dymanus, A. (Dep. Phys. Meteorol., Agric. Univ., Wageningen, Neth.). *Int. J. Infrared Millimeter Waves* 1981, 2(6), 1209-23 (Eng). A submillimeter spectrometer using the concept of generating a continuously tunable difference-frequency sideband by beating the HCN laser radiation and millimeter wave klystron radiation in the nonlinear Schottky barrier diode was developed for the accurate frequency measurement on ³²S¹⁶O gaseous sample at 820.151 GHz. The strength of the reradiated signal was investigated as a function of generating laser and klystron power as well as of the d.c. bias applied externally to the diode.

new. creep

C.A. 1982, 96, N 4

SO₂

Lotter 12815 1981

OSO

Bohm M.C., Gleiter R.

✓ Theor. crim. acta, 1987,
59(2), 153-179.

SO₂

1981

95: 212305q Raman spectroscopic studies of sulfur dioxide, S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂, in the gas phase: hot band assignment. Brooker, M. H.; Eysel, H. H. (Chem. Dep., Mem. Univ. Newfoundland, St. John's, NF Can. A1B 3X7). *J. Raman Spectrosc.* 1981, 11(5), 322-5 (Eng). Raman spectra were obtained for the fundamental modes of S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂ in the gaseous phase: S¹⁶O₂, $\nu_1 = 1151.3$, $\nu_2 = 518.2$, $\nu_3 = 1361.5$; S¹⁸O₂, $\nu_1 = 1100.8$, $\nu_2 = 497.0$, $\nu_3 = 1318.0$ cm⁻¹. Band shapes for the isotopically different mols. are essentially identical, and conform to expectations for a nearly prolate sym. top mol. Accurate isotopic shifts for a no. of naturally abundant isotopically different mols. are reported. A weak peak shifted -3.1 cm⁻¹ from the ν_1 peaks of S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂ was assigned to the hot band transition 010 → 110. This assignment was confirmed by temp. variation studies of S¹⁶O₂ in CCl₄ liq.

(CKP, Vi)

@.A.1981, 95, N24

~~SiO₂~~ SiO₂

1981

6 Б187. КР-спектроскопические исследования S¹⁶O₂ и S¹⁸O₂ в газовой фазе: отнесение горячей полосы. Brooker M. H., Eysel H. H. Raman spectroscopic studies of S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂ in the gas phase: hot band assignment. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 11, № 5, 322—325 (англ.)

Vi, М. Н.;

Измерены возбуждаемые Ar⁺-лазером (488,0 и 514,5 нм) спектры КР молекул S¹⁶O₂ и S¹⁸O₂ в газовой фазе. Получены частоты колебаний S¹⁶O₂ — $\nu_1=1151,3$, $\nu_2=518,2$, $\nu_3=1361,5$ и S¹⁸O₂ — $\nu_1=1100,8$, $\nu_2=497,0$, $\nu_3=1318,0$ см⁻¹. Измерены также относит. интенсивности полос и деполяризац. соотношения. Отмечена полная аналогия контуров полос двух изотопных модификаций SO₂. Структура полос SO₂ согласуется с предположением о принадлежности этих молекул к типу вытянутого симм. волчка или близкому к нему. Измерены изотопич. сдвиги по сере для наблюдаемых полос в естественной изотопной смеси. Обнаружены слабые полосы поглощения в области 1148,2 см⁻¹ и 1097,7 см⁻¹.

Х. 1982, 19 № 6.

отнесенные к горячим переходам 010—110 $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ соотв. Это отнесение подтверждено измерениями т-рной зависимости интенсивности полос SO_2 в жидкой фазе в CCl_4 . Из расстояния между основной и горячей полосой SO_2 оценен коэффициент ангармоничности X_{12} , равный $-1,5 \pm 0,05 \text{ см}^{-1}$. С. Б. Осин

SO₂

1981

Child M. S., et al.

расчёт
связки.

Faraday Discuss.

Chem. Soc., 1981, N 4,

273 - 285.

● / см. H₂O; (iii)

SO₂

S₂

S

и.к. спектр
в матрице

(+2) ☒

ф. 1981 N9

1981

9 Д632. Исследование энергетического обмена между молекулами S₂ и SO₂, изолированными в матрице. S₂—SO₂ energy transfer studied by matrix isolation in solid argon. Cook Gary, Krogh Ole D. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 2, 841—848 (англ.)

Методами спектроскопии поглощения и испускания исследованы процессы, происходящие в матрицах O₂(OCS)Ar, SO₂(OCS)Ar и SO₂/Ar после фотолитич. вспышки Hg-лампы. Получены зависимости интенсивности люминесценции возбужденных продуктов фотолиза от т-ры в диапазоне 8—30 К. Молекулы SO₂ регистрировали по ИК-спектрам поглощения, а молекулы SO₂, S₂ и атомы S — по спектрам испускания в видимой и УФ-областях спектра. Установлено, что в возбужденном комплексе S₂—SO₂, образующемся в результате фотолиза, происходит быстрый энергетич. обмен между S₂ ($X^3\Sigma_g^- \leftrightarrow B'^{13}\pi_u$) и SO₂ ($\tilde{X}^1A_1 \leftrightarrow \tilde{A}^1B_1$). Библи. 28. М. Т.

SO₂

1981

14 Б869. Внутримолекулярная релаксация возбужденных состояний SO₂ и SO₂⁺. Dujardin Gérald, Leach Sydney. Intramolecular relaxation of excited states of SO₂ and SO₂⁺. «Ber. Hahn—Meitner—Inst. Kernforsch. Berlin», 1981, № 362, 45 (англ.)

Исследованы возбужденные электронные состояния молекулы SO₂ и иона SO₂⁺, получаемые при фотовозбуждении в обл. энергии 10,2—23,1 эВ. Методом совпадений фотоион—флуоресцентный фотон показали, что в области энергии 16 эВ $\bar{C} + \bar{D}$ состояния иона SO₂⁺ флуоресцируют в ближней УФ-области с малым квантовым выходом ($\Phi_F(\bar{C} + \bar{D}) \approx 6 \cdot 10^{-5}$) в конкуренции с процессами преддиссоциации. Идентификация продуктов преддиссоциации $\bar{C}$, $\bar{D}$, $\bar{E}$ и $\bar{F}$ состояний проводилась с помощью времяпролетной масс-спектрометрии или при измерении оптич. эмиссии. В этой же области энергий наблюдалась преддиссоциация сверхвозбужденных состояний молекулы SO₂; релаксация сверхвозбужденных состояний конкурировала с процессами автоионизации.

Н. В. Кирьяков.

спектр
предиссоц.

14

(H) SO₂⁺

X. 1982, 19, N14

SO₂

Смилек 12970

1981

6 Б1362. Изучение излучательных и диссоциативных релаксационных процессов в фотовозбужденной вакуумным УФ-излучением SO₂ методом измерений совпадений фотоион — флуоресцентный фотон. Флуоресценция SO₂⁺, SO⁺ и SO. Dujardin Gérald, Leach Sydney. Photoion-fluorescence photon coincidence study of radiative and dissociative relaxation processes in VUV photoexcited SO₂. Fluorescence of SO₂⁺, SO⁺, and SO. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 6, 2521—2531 (англ.)

Методами оптич. спектроскопии флуоресценции (Фл) в интервале 230—910 нм, масс-спектрометрии и измерения совпадений фотоион-флуоресцентный фотон исследованы излучательные и диссоциативные процессы в молекулах SO₂ при давл. в молек. пучке $\approx 10^{-4}$ и $5 \cdot 10^{-2}$ мм, возбуждаемых монохроматич. светом с энергией фотонов E 10,2—21,2 эВ. При облучении SO₂ фотонами с $E=21,2$ эВ образуются ионы SO₂⁺, SO⁺, S⁺ и (или) O₂⁺, O⁺, а для фотонов с $E \approx 16,85$ эВ — SO₂⁺, SO⁺ и S⁺. Из состояний C²B₂ и (или) D²A₁ SO₂⁺ наблюдали Фл с квантовым выходом $\sim 6 \cdot 10^{-5}$. Излучение

Рисберг
Уровни

Х. 1982, 19, № 6.

SO_2^+ наблюдали в той же спектральной области, что и излучение SO^+ и SO , но с интенсивностью в ~ 100 раз меньшей. Отмечается, что Фл. SO_2^+ конкурирует с преддиссоциацией. Константа скорости преддиссоциации $\text{SO}_2^+(\tilde{\text{C}}^2\text{B}_2)$ с образованием $\text{SO}^+(\text{X}^2\Pi)$ и $\text{O}(^3\text{P}_g) \gtrsim 10^7 \text{ с}^{-1}$, а для преддиссоциации $\text{SO}_2^+(\tilde{\text{F}}^2\text{A}_1)$ с образованием $\text{SO}^+(\text{A}^2\Pi)$ и $\text{O}(^3\text{P}_g) > 10^8 \text{ с}^{-1}$. Другой канал преддиссоциации $\text{SO}_2^+(\tilde{\text{F}}^2\text{A}_1)$ дает $\text{O}^+(^1\text{S}_u)$ и $\text{SO}(\text{X}^3\Sigma^-)$. Полуширина распределения кинетич. энергии, освобожденной в процессе фрагментации с образованием SO^+ для фотонов с $E=21,2$ и $16,85$ эВ равна $0,26 \pm 0,02$ и $0,16 \pm 0,05$ эВ соотв. Такое различие обусловлено большим числом р-ционных каналов доступных при облучении фотонами с большей E . Время жизни SO^+ в состоянии $\text{A}^2\Pi$ равно $2,4 \pm 0,4$ мкс. Преддиссоциацию SO_2^+ с образованием невозбужденных продуктов $\text{O}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-)$ и $\text{S}^+(^4\text{S}_u)$ наблюдали лишь для фотонов с $E=16,34-16,67$ эВ. Считается, что ион S^+ образуется в процессе преддиссоциации, включающем возбуждение асимметричных валентных колебаний или вращательное движение вне плоскости α -оси, к-рое должно создавать необходимое взаимодействие между электронными состояниями D^2A_1 и a^2B_2 . При возбуждении SO_2 фотонами с $E=10,2$ и $11,62$ эВ возбуждаются ридберговские уровни ниже Пт ионизации, из к-рых в результате преддиссоциации образуются электронно-возбужденные молекулы SO . При $E=16,85$ эВ образуются сверхвозбужденные состояния SO_2 , подвергающиеся автоионизации или диссоциирующие с образованием возбужденной SO и $\text{O}(^3\text{P}_g)$. При облучении SO_2 фотонами с $E=21,2$ эВ образование возбужденных молекул SO не обнаружено.

Ю. И. Дорофеев

SO₂

om mcca 11782

1981

rb. mex.
pacer

V94: 197939h Theoretical characterization of the isomers of sulfur dioxide. Dunning, Thomas H., Jr.; Raffanetti, Richard C. (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Phys. Chem.* 1981, 85(10), 1350-3 (Eng). Generalized valence bond and CI calcs. are reported on the isomers of SO₂. From these calcs. the ring isomer with $R_{SO} = 1.66 \text{ \AA}$ and $\theta_{OSO} = 60^\circ$ is predicted to lie $\sim 100 \text{ kcal/mol}$ above the ground state (open isomer; calcd. (exptl.): $R_{SO} = 1.45 \text{ \AA}$ (1.4308 $\text{\AA}$), $\theta_{OSO} = 120^\circ$ (119.3 $^\circ$)). The superoxide isomer with $R_{SO} = 1.67 \text{ \AA}$, $R_{OO} = 1.33 \text{ \AA}$, $\theta_{SOO} = 120^\circ$ is predicted to lie $\sim 5 \text{ kcal/mol}$ higher than the ring isomer. These results strongly argue against the involvement of the isomers of SO₂ in the combustion of S-contg. species and in the flash photolysis of SO₂.

C.A. 1981, 94, N24

SO₂

фотоионизация



λ. 1982, 19, №3.

О.М.Милек 1227Е 1981

3 Б1896. Изучение фотоионизации SO₂ и (SO₂)₂ в молекулярном пучке. Erickson J., Ng C. Y. Molecular beam photoionization study of SO₂ and (SO₂)₂. J. Chem. Phys., 1981, 75, № 4, 1650—1657 (англ.)

Зарегистрированы кривые эффективности фотоионизации (КЭФ) SO₂ и (SO₂)₂ в молек. пучках (МП) под действием света гелиевой (625—1000 Å) или водородной (970—1060 Å) ламп. МП SO₂ и (SO₂)₂ формировали при сверхзвуковом истечении газа через сопло из нерж. стали диам. 0,12 мм. Давл. торможения вари-

ровали от 125 до 500 Торр. Получены КЭФ SO₂ с образованием различных ионов в след. областях: SO₂⁺ в области 625—1020 Å, SO⁺ 600—790 Å, S₂O₃⁺ 600—806 Å, S⁺ 650—770 Å (разрешение во всех случаях 0,14 Å). Получены пороговые энергии для процессов фотодиссоциативной ионизации: SO₂ + hν → SO⁺ + O + e⁻ 15,953 ± 0,01 (777,2 ± 0,5 Å) и → S⁺ + O₂ + e⁻ 16,228 ± 0,03 эВ (764 ± 1,5 Å), к-рые хорошо согласуются с термодим. данными. Определены также относит. сечения процесса SO₂⁺ → SO⁺ + O + e⁻ для различных возбужденных состояний SO₂⁺. Энергия связи SO₂⁺—SO₂ най-

дена равной $0,66 \pm 0,04$, связи $SO^+ - SO$ $0,6$ эВ. Идентифицированы ридберговские состояния SO_2 в области $600 - 1060$ А. Потенциал ионизации SO_2 найден равным $12,348 \pm 0,002$ эВ ($1004,08 \pm 0,2$ А). В. П. Булатов.

$$SO_2$$

COMMENCE 12276 1981

g.

(+2)

2 Д377. Изучение фотоионизации SO_2 и $(\text{SO}_2)_2$ на молекулярных пучках. Molecular beam photoionization study of SO_2 and $(\text{SO}_2)_2$. Erickson J., Ng C. Y. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 4, 1650—1657 (англ.)

Методом молекулярных пучков детально изучены процессы фотоионизации и фотодиссоциации SO_2 в области длин волн 625—10 000 Å с разрешением 0,14 Å. Метод позволил уменьшить вращательное и колебательное возбуждение SO_2 , значительно увеличить точность измерений и сделать возможной идентификацию ридберговских уровней. Найдено, что потенциал ионизации SO_2 равен $12,348 \pm 0,0020$ эВ. Обнаружена слабая структура на фотоионизационных кривых, связанная с автоионизацией ридберговских уровней. Измерены энергии появления для реакций

$\text{SO}_2 + h\nu \rightarrow \text{SO}^+ + \text{O} + e^-$ и $\text{S}^+ + \text{O}_2 + e^-$, которые оказались равными $15,953 \pm 0,010$ эВ и $16,228 \pm 0,030$ эВ соответственно. Найдено, что потенциал ионизации SO равен $10,28 \pm 0,020$ эВ. Исследованы реакции образования

ф. 1982, 18, № 2. 1) $(SO_2)_2 (Y)$; 2) $SO_2^+ \cdot SO_2 (D)$

$(\text{SO}_2)_2^+$ и S_2O_3 при фотоионизации $(\text{SO}_2)_2$. Потенциал
ионизации $(\text{SO}_2)_2$ равен $11,72 \pm 0,030$ эВ, энергия диссо-
циации связи $\text{SO}_2^+ \cdot \text{SO}_2$ равна $0,66 \pm 0,040$ эВ. Библ. 39.
А. П. Капичин



SO₂

Chmick 12276 1981

(y)

/95: 141461z Molecular beam photoionization study of sulfur dioxide and dimeric sulfur dioxide. Erickson, J.; Ng, C. Y. (Dep. Chem., Iowa State Univ., Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(4), 1650-7 (Eng). Photoionization efficiency (PIE) data for SO₂⁺ were obtained with a wavelength resolu. of 0.14 Å (FWHM) in the region 625-1005 Å using the mol. beam method. The ionization energy (IE) of SO₂ was 12.348 ± 0.002 eV (1004.08 ± 0.20 Å). Similar to the observation in the PIE curve for O₃⁺, the spacing for steplike structure obsd. near the threshold was irregular. Weak structures which arise by autoionization from different vibrational states of Rydberg levels were also resolved in this region. The anal. gives av. vibrational spacing of 386, 428, 716, 745, 911, 938, and 956 cm⁻¹ for these Rydberg states. The appearance energy (AE) for the photodissociative ionization processes SO₂ + hν → SO⁺ + O + e⁻ and S⁺ + O₂ + e⁻ were 15.953 ± 0.010 eV (777.2 ± 0.5 Å) and 16.228 ± 0.030 eV

(+1)

~~1~~

C.A. 1981, 95, N16.



SO₂⁺. SO₂ } de'
SO⁺. SO₂ } 24.66-834

(764 ± 1.5 Å), resp. Using the AE for the formation of SO^+ from SO_2 , and the heats of formation of SO_2 , SO , and O , the IE of SO is 10.28 ± 0.02 eV. This value is in excellent agreement with that reported previously by J. M. Dyke et al. (1974). From the obsd. IE (11.72 ± 0.03 eV) of $(\text{SO}_2)_2$, the IE of SO_2 , and the estd. binding energy (0.03 eV) of $(\text{SO}_2)_2$, the bond dissocn. energy of $\text{SO}_2^+.\text{SO}_2$ is 0.66 ± 0.04 eV. Using the measured AE (15.38 ± 0.06 eV) for S_2O_3^+ prodn. from $(\text{SO}_2)_2$, a lower bound for the binding energy of $\text{SO}^+.\text{SO}_2$ was calcd. to be 0.60 eV.

1981

SO₂назв - тез
черт

/ 95: 141278v Multiphoton laser excitation of sulfur dioxide at 248 nm. Fotakis, C. (Dep. Chem., Univ. Edinburgh, Edinburgh, Scot. EH9 3JJ). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 82(1), 68-71 (Eng). Irradn. of SO₂ with the focused output of a KrF laser (248 nm) gave rise to intense emission bands from SO A(³Π_i), formed by excitation of SO X(³Σ⁻). The latter is produced via sequential 2-photon excitation of SO₂ leading to fragmentation. Quenching data for SO₂ and He are presented. The application of these results for an optically pumped SO laser is considered.

C. A. 1981, 95, N 16.

(Osmu 12842) 1981.

SO₂

Hilderbrandt R. L.
et al.

молекула
структ.

J. Mol. Struct.,
1981, 85, 25-36

SO₂

оттиск 13198

1981

8 Б83. Структурное определение SO₂ методом газовой электронографии. Holder C. H., J., Fink M. Structure determination of SO₂ by electron diffraction. «J. Chem. Phys.», 1981, 75, № 11, 5323—5325 (англ.)

структура

Методом газовой электронографии с регистрацией интенсивности рассеяния на сцинтилляц. счетчиках (см. пред. реф.) определена структура молекулы SO₂. Найдены след. значения межъядерных расстояний (r_a , Å), амплитуд колебаний (e , Å) и угла: $r(S-O) = 1,4343(3)$, $r(O...O) = 2,4718(28)$, $l(S-O) = 0,0359(10)$, $l(O...O) = 0,0561(3)$, $\angle OSO = 119,5(0,3)^\circ$. Погрешности отвечают величинам 2σ .
В. Спиридонов

X. 1982, 19, № 8

SO₂

CONTRIBUTOR 13198

1981

Структурные
параметры

95: 229889f Structure determination of sulfur dioxide by electron diffraction. Holder, C. H., Jr.; Fink, M. (Electron Res. Cent., Univ. Texas, Austin, TX 78712 USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 75(11), 5323-5 (Eng). A detn. of the structural parameters of gaseous SO₂ was made with a counting electron diffraction app. at an electron energy of 54.157 keV over the s range 10-30 Å⁻¹. The structure parameters are $r_s(\text{S-O}) = 1.4343(3)$ Å, $\sigma_s(\text{O..O}) = 2.4718(28)$ Å, $l(\text{S-O}) = 0.0359(10)$ Å, $l(\text{O..O}) = 0.0561(31)$ Å, and $\angle\text{OSO} = 119.5^\circ(0.3^\circ)$. Since the exptl. results agree very well with the spectroscopic and theor. structure parameters, it is proposed that SO₂ be accepted as the std. ref. mol. in place of CO₂.

C. A. 1981, 95, N 26.

SO₂

OMiller 13028 1981

Isaacson A.D., et al.

J. Chem. Phys. 1981,
75(6), 3017-3024.

колебатель-
уровни.
сумма
по состояниям.



(сер. H₂O; III)

SO₂

1981

Jacob B., et al.

papers

J. Phys. B: Atom.
and Mol. Phys., 1981,
14, N16, 2753-2759.

(see H₂O ; iii)

SO₂

mol. reol.
(Ho)

1981
Kassman A. Y., et al
Y. Chem. Educ., 1981,
58, N3, 247-49.

● (see CO₂) III

502

1981

6 Д1254. Применение спектроскопии с использованием перестраиваемых лазеров к молекулярной фотофизике: от двухатомных молекул до модельных мембран. Applications of tunable laser spectroscopy to molecular photophysics: from diatomics to model membranes. Kenney-Wallace G. A., Wallace S. C. «Lasers and Appl. Proc. Sergio Porto Mem. Symp., Rio de Janeiro, June 29 — July 3, 1980.» Berlin e. a., 1981, 207—217 (англ.)

Обзор работ авторов. Обсуждены вопросы применения перестраиваемых лазеров для решения различных многофотонных задач молекулярной фотофизики и фотохимии в наносекундном или пикосекундном интервалах времен. Рассмотрены новые методы многофотонной лазерной спектроскопии с применением вынужденного комб. рас. в газах высокого давления. Для перекрытия спектрального диапазона 180—240 нм в указанных работах использовался источник излучения на основе антистоксовых компонент линий комб. рас.

фотофиз.,
фотохимичес-
ские

ф. 1983, 18, №6

молекулы H_2 , возбуждаемой излучением 2-й гармоники перестраиваемого лазера на красителе. Представлены эксперим. результаты исследования фотофизики и фотодиссоциации молекулы SO_2 в газовой фазе, а также индуцированной лазерным излучением фотоионизации молекул пирена в водно-мицеллярных растворах додецилсульфата Na. Проведено обсуждение полученных результатов в мицеллах, являющихся моделями мембранных систем, с учетом влияния межмолекулярных сил и полей микроокружения на энергетику и динамику внедренных в мицеллы молекул. Намечены пути использования перестраиваемых лазеров для изучения фотофизики сложных биологич. систем. Библ. 19.
Т. А. Ш.

SO₂

cm-mec 1263 1981

95: 226012d A variational treatment of the effects of vibrational anharmonicity on gas-phase electron diffraction intensities. Part II. Temperature dependence. Kohl, D. A.; Hilderbrandt, R. L. (Dep. Chem., Univ. Texas, Austin, TX 78712 USA). *THEOCHEM* 1981, 2(3-4), 325-35 (Eng). The vibrational av. of the electron diffraction intensity was calcd. for SO₂ and CO₂ for $T = 0, 300, 600, 800,$ and 1000 K using variational wave functions. Effective electron diffraction structural parameters were detd. by fitting the numerical values of the vibrationally averaged cross section. Anal. expressions which relate those parameters to the vibrational wavefunction are also developed.

(+) ☒ CO₂

C.A. 1981, 95, N26.

(C24, CO₂; III)

некомпьютер
управляе

SO₂

1981

no7emy.

q-um8

Kollaman Peter H.,
et al.

Chem. Appl. At. Mol.
Electrostat, Potentials,
Proc. Symp. Rel. Elect-
rostat, Potential Chem.
1980 (Pub. 1981), 243-55.

(em. (H₂)₂, III)

SO₂

1981

9 Д479. Экспериментальное исследование радиационных свойств двуокиси серы. Experimental studies of the radiative properties of sulfur dioxide. Kunitomo Takeshi, Masuzaki Hirohisa, Ueoka Susumu, Osumi Masato. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 25, № 4, 345—349 (англ.)

спектры

ИК, поглощ

Получены спектры ИК-поглощения газообразной двуокиси серы в смеси с азотом в областях $1000\text{--}1500\text{ см}^{-1}$ (полосы ν_1 и ν_3) и $2200\text{--}2450\text{ см}^{-1}$ (полосы $2\nu_1$ и $\nu_3 + \nu_1$) с разрешением 20 и 13 см^{-1} соответственно при T -рах 300 и 600 К . Для этих полос по эксперим. данным определены параметры статистич. модели в приближениях узкой и широкой полосы. Найдены параметры полос, расчет с этими параметрами хорошо согласуется с экспериментом. Определены интегр. интенсивности изученных полос. Для обертонов эти величины сильно отличаются от литературных. Рассчитана излучательная способность ϵ двуокиси серы в интервале T -р $300\text{--}2000\text{ К}$. Выше 1 атм давление не влияет на величину ϵ и при ее расчете можно не делать разницы между коэф. самоуширения и уширения азотом. Библ. 13.

М. В. Т.

Ф. 1981/19

1981

SO₂

18 Б200. Экспериментальное исследование излучательных свойств диоксида серы. Kunitomo Takeshi, Masuzaki Hirohisa, Ueoka Susumu, Osumi Masato. Experimental studies of the radiative properties of sulfur dioxide. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 25, № 4, 345—349 (англ.)

интегралы,
коэф.
поглощ.

Экспериментально определены интегральные коэф. поглощения (α) полос ν_1 , ν_3 , $\nu_1 + \nu_3$ и $2\nu_1$ SO₂ (в смеси с азотом) при 300 и 600 К. Значения α (в см⁻² атм⁻¹) равны, соотв., 118; 949; 17,2; 2,3 ($T=300$ К); 121, 941, 16, — ($T=600$ К). Интенсивности (S), полуширины (γ) и коэф. самоуширения (B) полос как функции давл. SO₂, N₂ и эффективного давл. м. б. выражены через пять параметров C_1 , C_2 , C_3 , B и n (приведены, соотв., соотношения). Определены и приводятся значения ω_0 , C_1 , C_2 , C_3 , B и n для указанных полос и полос ν_2 и $\nu_2 + \nu_3$. Рассчитана полная излучательная способность газа в интервале т-р 300—2000 К. В. М. Ковба

№ 1981 N 18

1981.

SO₂

micro
 spectroscopy
 chemistry

94: 22492c Intensity of the sulfur dioxide rotational spectrum. Larkin, Robert J.; Lovejoy, Roland W.; Silvaggio, Peter M.; Boese, Robert W. (Chem. Dep., Lehigh Univ., Bethlehem, PA 18015 USA). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1981, 25(1), 25-8 (Eng). The integral band intensity of the pure rotational absorption of SO₂ gas was detd. from far IR spectra. From the curve of growth, the value at 298 K is found to be $S_{80} = 35.2 \pm 1.3 \text{ atm}^{-1}\text{-cm}^{-2}$. The entire set of exptl. data was analyzed using an absorption band model. The derived intensity agrees with that obtained from the curve of growth to be better than 10%. This result should be of value in connection with atm. models of the planet Venus.



C.A. 1981. 94 N 4

SO₂

1981

3 Д572. Повторное исследование молекул SO₂: лазерная спектроскопия охлажденных молекул и электронно-колебательная релаксация, индуцированная столкновениями. SO₂ revisited: laser spectroscopy of cold molecules and collision-induced electronic and rotational relaxation. Lee Edward K. C., MacDonald Bruce G., Holtermann Dennis L., Nanes Roger. «J. Photochem.», 1981, 17, № 3—4, 495—504. (англ.)

С целью разрешения перекрывающихся полос $X^1A_1 \rightarrow \bar{A}^1A_2$ и $X^1A_1 \rightarrow B^1B_1$ в области 300—330 нм получены спектры флуоресценции молекул SO₂, охлажденных в сверхзвуковой струе до т-ры 1 К. Возбуждение молекул SO₂ осуществлялось перестраиваемым лазером на красителе с удвоением частоты. Идентифицированы ранее неизвестные вибронные полосы. Получены зависимости времени жизни отдельных вращательных уровней состояния $\bar{A}^1A_2$ от конц-ии SO₂, а также распределения возбужденных молекул в струе по вращательным

спектр

флуоресц.

ф. 1982, 18, N3.

степеням свободы. Определены абс. сечения тушения возбужденных молекул SO_2 атомами инертных газов и рядом молекул: H_2 , O_2 , N_2 , CO , NO , OCS , SO_2 , CH_3NO_2 и др. Установлено, что полярные молекулы являются эффективными тушителями: соответствующие сечения примерно в 10 раз больше газокинетических. Библ. 29.
М. Т.



SO₂

1981

M. Cremer

95: 178111m Sulfur dioxide revisited: laser spectroscopy of cold molecules and collision-induced electronic and rotational relaxation. Lee, Edward K. C.; MacDonald, Bruce G.; Holtermann, Dennis L.; Nanes, Roger (Dep. Chem., Univ. California, Irvine, CA 92717 USA). *J. Photochem.* 1981, 17(3-4), 495-504 (Eng). SO₂ has an electronic absorption band in the UV and some of the rotational structures between 3000 and 3300 Å were assigned to the $A^1A_2 \leftarrow X^1A_1$ transition by Y. Hamada and A. J. Merer (1971, 1975). It is believed that the $B^1B_1 \leftarrow X^1A_1$ transition also lies in this wavelength range, but extensive perturbations of the *B* state by the *X* state have prevented its rotational anal. In an attempt to locate vibronic origins of the 2 overlapping transitions, rotationally resolved fluorescence excitation spectra were detd. for cold SO₂ mols. (at ~1.0 K) in a supersonic free jet. The rotational structure is greatly simplified and typical vibronic bands consist of 3 to 5 rotational lines, the $R_0(0)$ line being the most intense. Numerous new vibronic features are readily observed and make a more precise vibrational assignment possible. The selective excitation of single rotational levels of the A^1A_2 state,

C.A. 1981, 95, N20.

the lifetime as well as the intensity distribution of rotationally resolved fluorescence emission were measured as a function of pressure. Collisional electronic quenching by polar mols. is very efficient, reaching a max. value about 10 times greater than gas kinetic values. Collisional rotational relaxation proceeds by a dipole-type mechanism with a state-to-state cross section of about $50 \text{ \AA}^2$ for $\Delta K_a = +1$ or $\Delta K_a = -1$.

SO₂

1981

unimolecular.

6 CKP

/ 95: 194749f Intensities of rotation and vibration-rotation Raman transitions in asymmetric top molecules. Murphy, William F. (Div. Chem., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Raman Spectrosc.* 1981, 11(5), 339-45 (Eng). The derivation of the intensities of rotation and rotation-vibration Raman transitions for asym. top mois. is given, based on irreducible spherical tensor formalism. A computer program package written to calc. such intensities is described. Its use is demonstrated by reproducing the obsd. contours of the pure rotational band and the asym. stretching vibrational band in the Raman spectrum of SO₂. The polarizability tensor component ratio required to simulate the pure rotational contour was combined with literature values for mean polarizability and depolarization ratio to obtain the principal values of the SO₂ polarizability tensor. A correlation of the polarizability tensor component ratio with band types is discussed for totally sym. bands which have been reproduced using this program and those of others.

C. A. 1981, 95, N22.

SO₂

1981

5 Б85. Преобразование коэффициентов вращательного гамильтониана между представлениями в различных осях и редуцированными представлениями. Murphy W. F. Transformation of rotational Hamiltonian coefficients between reductions and axis representations. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 89, № 2, 561—565 (англ.)

Разработана программа, позволяющая пересчитывать коэф. эффективного вращательного гамильтониана при переходе от одной системы осей к другой, а также к редуцированным формам эффективного оператора, содержащим только экспериментально определяемые параметры. В кач-ве примера рассмотрено преобразование гамильтониана с точностью до секстичных членов для молекул SO₂, F₂CO, H₂S. Б. И. Жилинский

расчет

✗

(+2)



X. 1982, 19, 15.

SO2

1981

/ 97: 30719m The application of supersonic beam cooling to complex rovibronic spectra: laser induced fluorescence excitation spectra and lifetimes of sulfur dioxide in the 290 nm band. MacDonald, Bruce Grey (Univ. California, Irvine, CA USA). 1981. 253 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA8207028. From *Diss. Abstr. Int. B* 1982, 42(10), 4080.

и аспект
применения.

©. A. 1982, 97, N 4

SO₂

1981

Rothman L. S., et al

Appl. Opt., 1981, 20(8),
1323-8

положение
линий ин-
тенсивности
получены
в спектр. обл.
от 0 до 10000 см⁻¹

● (Cell No) III

1981

SO₂

re; c.n.
bp. n., γ_i
kb. mex.
pacer

Sakai Yoshiko et al

J. Comput. Chem., 1981,
2(1), 108-25.

● (corr HCl) III

SO₂

AMMICK 12.34.2 1981

95: 105666m Diode laser heterodyne spectroscopy on the ν_1 band of sulfur dioxide. Sattler, J. P.; Worchesky, T. L.; Lafferty, Walter J. (Harry Diamond Lab., U. S. Army Electron. Res. Dev. Command, Adelphi, MD 20783 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 88(2), 364-71 (Eng). Diode laser heterodyne techniques were used to obtain the frequencies of 55 IR absorption lines of ³²S¹⁶O₂. From these data and from previous microwave and millimeter wave measurements, new spectroscopic consts. for the ν_1 band were detd. The new consts. were used to predict new optically pumped submillimeter wave emissions.

лазер.
спектр.

C. A. 1981, 95, N12

SO₂

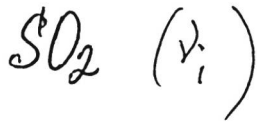
Оммик 12345 1981

3 Б421. Гетеродинная спектроскопия полосы ν_1 дву-
окиси серы с применением диодного лазера. Satt-
ler J. P., Worchesky T. L., Lafferty Walter J.
Diode laser heterodyne spectroscopy on the ν_1 band of
sulfur dioxide. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 88, № 2, 364—
371 (англ.)

М.Н.

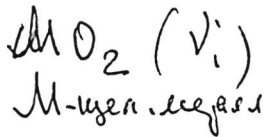
На диодном лазерном спектрометре с гетеродинным
приемом излучения («Opt. Lett.», 5, 21, 1980) в области
между 1069 и 1086 см⁻¹ исследована часть полосы по-
глощения ν_1 молекулы SO₂. Волновые числа центров
55 линий поглощения R -ветви измерены с точностью
6 МГц гетеродинированием излучения диодного лазера
на солях свинца и опорного CO₂-лазера. Проведена
совместная подгонка МВ-частот 41 вращательного по-
рехода в возбужденном колебательном состоянии ν_1 , из-
меренных ранее с точностью 0,2 МГц, и измеренных час-
тот 55 ИК-переходов и определены новые значения для
спектроскопич. постоянных в эффективном вращатель-
ном гамильтониане Уотсона для колебательного состоя-
ния ν_1 , включая секстичные центробежные постоянные.
Определено более точное значение для центра полосы
 ν_1 равное $\nu_0 = 1151,71352 (31)$ см⁻¹. В. М. Михайлов

X. 1982, 19, №3.



1981

3 Б243. Использование данных по изотопозамещению для расчета неизвестных частот колебаний молекул типа XU_2 . Серебренников Л. В. «Вестн. МГУ. Химия», 1981, 22, № 5, 507—508



Построен алгоритм и написана программа вычисления неизвестной частоты молекулы типа XU_2 , если остальные частоты и их изотопные аналоги измерены экспериментально. Работоспособность программы проверена на хорошо изученных диоксидах щел. металлов, а также на таких молекулах, как SO_2 , O_3 , CO_2 . Резюме.



- | | |
|-----------------|------------------------|
| 1. $O_3 (v_1)$ | 5. KO_2 |
| 2. $CO_2 (v_1)$ | 6. RbO_2 |
| 3. LiO_2 | 7. CsO_2 |
| 4. NaO_2 | ② программа
7BM gme |

X. 1982, 19, №3.

paneta
moneta
Tuna XY₂

9 -

SO₂

Статья 12013

1981

ИК спектр

24 Б221. Новые измерения инфракрасного спектра твердого SO₂: применения к [исследованию поверхности спутника Юпитера] Ио. Slobodkin L. S., Buyakov I. F., Tripud N. S., Caldwell J., Cess R. D. New measurements of the infrared spectrum of solid SO₂: applications to Io. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1981, 26, № 1, 33—38 (англ.)

Представлены результаты исследования спектра отражения (6—10 мкм) тв. SO₂ при 80 К, нанесенного на охлаждаемую Пв с различными скоростями (75—1500 мкм/мин), и т-рой зависимости (80—140 К) области спектра вблизи 7,5 мкм, соотв-щей фундаментальному колебанию ν_3 молекулы SO₂. Полученные и известные результаты подтверждают предположение относительно наличия тв. SO₂ на Пв спутника Юпитера Ио и дают возможность согласовать данные, полученные

Х. 1981, 19, №24.

при исследовании с помощью полетного ИК интерферометра-спектрометра спутников Юпитера, с модельными кривыми яркости ($1300\text{--}1400\text{ см}^{-1}$) при газофазной абсорбции SO_2 . Анализ эксперим. спектров отражения SO_2 привел к выводу, что тв. частицы SO_2 , являющиеся результатом конденсации вулканически испускаемого газ. SO_2 , образуются при t -рах ниже 110 К . Н. Н. Морозов

SO₂(me)

Ommuck 12013

1981

UK
CNEKMP

/ 95: 88382w New measurements of the infrared spectrum of solid sulfur dioxide: Applications to Io. Slobodkin, L. S.; Buyakov, I. F.; Triput, N. S.; Caldwell, J.; Cess, R. D. (Luikov Heat Mass Transfer Inst., 22018 Minsk, USSR). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 1981, 26(1), 33-8 (Eng). The results are reported of addnl. studies of the 6-10 μ m spectrum of solid SO₂ formed under a variety of deposition temps. and deposition rates. The spectra support the suggestion that absorption by solid SO₂ is a plausible way to reconcile Voyager IRIS observations of Io with models of gas phase absorption by SO₂. The lab. spectra also suggest that such solid particles, resulting from condensation of volcanically emitted gaseous SO₂, are formed at a temp. <110K, although this upper limit apparently conflicts with the work of R. Savoie (1965) and M. C. W. Cambell (1977).

C.A. 1981, 95, N10

SO_2^+

A.P.



(73)

1981
24 Б1135. Определение сечений образования молекулярных и осколочных ионов при ионизации SO_2 и SO_3 электронным ударом. Smith O. I., Stevenson J. S. Determination of cross sections for formation of parent and fragment ions by electron impact from SO_2 and SO_3 . «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 12, 6777—6783 (англ.)

Получены полные и парциальные сечения ионизации SO_2 и SO_3 как функции энергии ионизирующих электронов с образованием молек. и осколочных ионов. В случае SO_2 при изменении энергии ионизирующих электронов от величины соотв-щей потенциалу ионизации до 40 эВ и т-рах от 295 до 865 К определены зависимости образования ионов SO_2^+ , SO^+ , S^+ и O_2^+ . В случае SO_3 при изменении энергии электронов до 30 эВ и т-ры от 496 до 870 К — для образования ионов SO_3^+ , SO_2^+ , SO^+ , S и O_2^+ . Определены потенциалы появления ионов.
М. И. Поволоцкая

Х. 1981, 19, № 24.

SD₂

Смилер 1232A

1981

3 Д466. Двухфотонное возбуждение состояния $\tilde{C}^1B_2$ двуокиси серы. Two-photon excitation of the $\tilde{C}^1B_2$ state of sulfur dioxide. Vasudev R., McClain W. M. «J. Mol. Spectrosc.», 1981, 89, № 1, 125—133 (англ.)

Исследован спектр двухфотонного возбуждения $C^1B_2-X^1A_1 [2b_1(\pi^*) \leftarrow 1a_2(\pi)]$ молекулы SO_2 . В спектре хорошо разрешена колебательно-вращательная структура. На основании сопоставления модельного и эксперим. спектров выполнено отнесение вращательной структуры. Колебательная структура и распределение интенсивности вдалеке от диссоциационного предела в двухфотонном и однофотонном спектрах практически совпадают. В области у диссоциационного предела (5,63—5,67 эВ) наблюдается перераспределение интенсивности колебательных полос в двухфотонном спектре по сравнению с однофотонным. Анализ перераспределения позволил сделать заключение, что низший по энергии фотодиссоциационный процесс связан с асимметричным валентным колебанием. Библи. 17.

В. С. Иванов

спектр

ср. 1982, 18, №3.

SO₂

0-7111111111 12322 1981

CHENMP

/ 95: 158972q Two-photon excitation of the $\tilde{C}^1B_2$ state of sulfur dioxide. Vasudev, R.; McClain, W. M. (Dep. Chem., Wayne State Univ., Detroit, MI 48202 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1981, 89(1), 125-33 (Eng). The 2-photon excitation (TPE) spectrum of SO₂ is reported in the region of the $\tilde{C}^1B_2 \leftarrow X^1A_1[2b_1(\pi^*) \leftarrow 1a_2(\pi)]$ transition. The spectrum shows considerable rovibronic structure; the band contours was identified as arising from $\Delta K_1 = \pm 1$ transitions and rotational features were assigned by comparison with synthetic spectra generated from known rotational consts. The vibronic structure obsd. in TPE is quite similar to that obsd. in the 1-photon spectrum: no zero-rank tensor transitions to levels with odd u_0 were identified, though they are allowed in the presence of vibronic coupling. The vibronic intensity distribution in the TPE spectrum below the dissocn. limit is similar to that in 1-photon absorption. However, near the dissocn. threshold (5.63-5.67 eV), marked intensity redistribution occurs, from which it is concluded that the lowest energy photodissocn. process proceeds through asym. stretching of the S-O bonds.

C. A. 1981, 95, N18.

SO₂

ommuck 11398

1981

✓ 94:200392g The electron impact spectra of sulfur dioxide. Veskovic, L.; Trajmar, S. (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, CA 91103 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1981, 10(Sergio Porto Commemorative Issue), 136-9 (Eng). The methods of electron impact spectroscopy were applied to gain information about the triplet states of SO₂. The present studies indicate hitherto undetected triplet excitations ~4.9, 7.8, 9.3 and 10.5 eV. The angular distribution of the scattered electrons is consistent with a $\tilde{a}^3B_1$ assignment at 3.4 eV, and also shows that triplet excitation is present in the 4.4 eV ($\tilde{A}^1B_1$) region. The high-energy, low-angle spectrum yielded relative optical absorption coeffs. which, when normalized to the optical data at 200 nm, agree well with previous optical measurements in the 96 to 320 nm range. The absorption coeffs. were extended down to 50 nm.

$\tilde{a}^3B_1, Te$

C.A. 1981, 94, N24

SO₂

Оптиса 11398

1981

8 Д533. Спектры электронного удара SO₂. The electron impact spectra of SO₂. Vuskevicius L., Trajmar S. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 10, Jan., 136—139 (англ.)

Методом спектроскопии электронного удара исследованы триплетные состояния молекулы SO₂ (I) при 4,9; 7,8; 9,3 и 10,5 эВ. Установлено, что угловое распределение рассеянных электронов согласуется с интерпретацией пика при 3,4 эВ как $\bar{a}^3B_1$ -состояния. Показано, что коэф. оптич. поглощения I, определенные из спектров электронного удара, хорошо согласуются с данными ВУФ спектроскопии I в области 320—96 нм. Приведены полученные коэф. оптич. поглощения I от 320 до 50 нм. Библ. 30. Ю. В. Чижев

Спектр
эл. удара

ф. 1981 N 8

SO₂

1981

Walson J. A., et al.

раствор в Spectrochim. acta,
1981, A37, N10, 857-
- 865.
●
(см. H₂O; III)

SO₂

1981

¹A₂,
2

1 Д864. Флуоресцентное время жизни состояния ¹A₂ молекул SO₂, вращательно охлажденных в сверхзвуковой струе. Fluorescence lifetime of the ¹A₂ state of rotationally cooled SO₂ in a seeded supersonic jet. Watanabe Hajime, Hyodo Yoshihiko, Tsuchiya Soji, Koda Seiichiro. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 81, № 3, 439—442 (англ.)

В области 304 нм получены разрешенные во времени спектры флуоресценции газообразных молекул SO₂, охлажденных в сверхзвуковой струе до т-ры ~3 К. Возбуждение флуоресценции осуществлялось с помощью импульсного лазера на красителе с удвоением частоты. В спектре идентифицирована структура, относящаяся к полосе «Е». Анализ кинетики тушения флуоресценции показал ее биэкспоненц. характер. Одним из предполагаемых источников флуоресценции является, по мнению авторов, радиационный распад состояния ¹A₂ (τ ~ 5 мкс).

Ф. 1982, 18, N1

SO₂

1981.

Watson J. H., et al.

Spectrochim. acta,

vi, 8i.

1981, A37, N10, 857 -
-865.

●
(ver. H₂O ; III)

SO₂

1981

12 Д528. Исследование серусодержащих молекул в области жесткого ВУФ-излучения. Ч. 1. Сечение фотопоглощения SO₂. Study of sulfur-containing molecules in the EUV region. I. Photoabsorption cross section of SO₂. Wu C. Y. Robert, Judge D. L. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 7, 3804—3806 (англ.)

С использованием синхротронного излучения и двойной ионизационной камеры измерены сечения фотопоглощения SO₂ в области 175—760 Å. Идентифицирована серия отрицат. резонансов, приписанная ридберговским состояниям, сходящимся к $(6a_1)^{-1}$ -состоянию молекулярного иона. Исследован также спектр возбуждения флуоресценции (излучение 1050—1950 Å), в котором идентифицированы колебательные прогрессии в состояниях SO₂⁺ ($\tilde{C}^2B_2$, $\tilde{D}^2A_1$, $\tilde{E}^2B_1$). Последние результаты хорошо согласуются с данными фотоэлектронной спектроскопии. Библ. 32.

В. С. Иванов

М.П;

Ф. 1981, 18, N 12.

SO₂CNCr f
grey pieces

⊕ ⊗

SO₂⁺ (Kard.
inference)

94:200100k Study of sulfur-containing molecules in the EUV region. I. Photoabsorption cross section of sulfur dioxide. Wu, C. Y. Robert; Judge, D. L. (Earth Space Sci. Inst., Univ. South. California, Los Angeles, CA USA). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(7), 3804-6 (Eng). Using synchrotron radiation as a continuum background, the absorption cross sections of SO₂ were measured using a double ionization chamber. The cross sections range from 10 to a max. value of 56 Mb in the 175-760 Å region. A possible window resonance series was obsd. and tentatively assigned to a Rydberg series converging to the (6σ_g)⁻¹ ion state. From the fluorescence excitation function the vibrational progressions of the SO₂⁺ C²B₂, D²A₁, and E²B₁ ion states were measured and they are in good agreement with those obsd. from photoelectron spectroscopy. The same correspondence between peaks in the fragment fluorescence excitation function and the photoelectron spectrum suggests that these ion states of SO₂ are dissociative in nature.



C.A. 1981, 24, N24

SO₂

1981

96: 189811m Solution to the mechanical anharmonic spectroscopic problem for nonlinear XYZ molecules. Isotopes of C_{2v} and C_s symmetry of sulfur dioxide molecules. Yaroslavskaya, E. V.; Skotnikov, A. I.; Sverdlov, L. M. (Moscow, USSR). Deposited Doc. 1981, VINITI 815-81, 20 pp. (Russ). Avail. VINITI. The previously described (S., and S., 1976) algorithm for the mech. anharmonic anal. of mols. of C_{2v} and C_s symmetry was applied to 24 isotopic species of SO₂ mols. The vibrational-rotational spectral data from various literature sources were used for the inverse spectroscopic problem calcns. which did not account for the Fermi resonance. The latter effect was of marginal importance only as documented by a good agreement between the exptl. spectra and the spectral parameters obtained using the calcd. anharmonic force field.

атм. сфер.

АДМ.,

М.А.

С. А. 1982, 96, N22

SO₂ [Lommuck 11918] 1981

Chem. noem.,
Di

' 96: 225504z Anharmonic potential functions of sulfur dioxide and ozone molecules. Yaroslavskaya, E. V.; Skotnikov, A. I.; Sverdlov, L. M. (USSR). *Deposited Doc.* 1981, VINITI 1360-81, 6 pp. (Russ). Avail. VINITI. The previously described (S. et al., 1979) algorithm of soln. of a direct mech. spectroscopic problem for anharmonic potential functions of SO₂ and O₃ mols. was extended for the C_s symmetry mols. The complex force field comprising 31 force consts. gave a good approxn. of literature data for 12 isotopes of SO₂ and 9 isotopes of O₃ of C_s symmetry.



C. A. 1982, 96, N 26.

SO₂

1981

Zwanziger Ch., et al.

Chem. Phys. Lett.,
1981, N 3, 486-489.

расчет
энергии
связи

(см. M₂S ; III)

SO_2

1982

Anderson Alfred B.

рецензёр,
Струцкий.

Chem. Phys. Lett.,
1982, 93, № 6, 538-539.

(см. SO ; III)

SO₂

1982

2 Д486. Исследование триплетных состояний SO₂ методом спектроскопии электронных потерь. An electron energy loss study of the triplet states of SO₂. Avouris Ph., Demuth J. E., Schmeisser D., Colson S. D. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 2, 1062—1063 (англ.)

Li, Vi;

В энергетическом диапазоне 0—14 эВ изучены спектры электронных потерь пленок твердого SO₂ при t = 20 К и при различных энергиях первичного электронного пучка (14; 12; 6 эВ). Путем анализа изменений в спектрах идентифицированы 3 из 6 ожидаемых низлежащих триплетных состояний SO₂ при 3,5; 8,4; 10,2 эВ. Проведено сравнение с аналогичными данными для газообразного SO₂. Библ. 15. Ю. В. Чижов

р. 1983, 18, N2

SO₂

1982

Bestmann G., Dreiz-
ler H.

Эксперимент

Умартка

Z. Naturforsch., 1982,
A37, N 6, 615-616.

●
(сер. OCS; II)

SO₂

Om. 15707

1982

98: 40912d Electron affinities of sulfur dioxide and nitrobenzene. Fukuda, Elaine K.; McIver, Robert T., Jr. (Dep. Chem., Univ. California, Irvine, CA 92717 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 77(10), 4942-8 (Eng). Several ion-mol. electron-exchange reactions were obsd. which indicated that the electron affinities of SO₂ and nitrobenzene are far greater than the currently accepted values. The reactions were studied by pulsed ion-cyclotron-resonance (ICR) spectrometry by using a trapped-ion analyzer cell to store the ions for several hundred milliseconds. Reaction pathways were confirmed by ion cyclotron double resonance and by varying the pressures of the neutral reactants. The relative electron affinity of nitrobenzene and SO₂ was detd. by measuring the equil. const. for the reaction: $C_6H_5NO_2^- + SO_2 = SO_2^- + C_6H_5NO_2$, $\Delta G^0 = -3.0 \pm 0.2$ kcal/mol. Pulsed ICR bracketing expts. supported the following electron affinity values: $E.A.(SO_2) = 2.2 \pm 0.1$ eV and $E.A.(C_6H_5NO_2) = 2.1 \pm 0.1$ eV.

Ae;

(+1) 

C.A. 1983, 98, N6.

SO₂

1982

' 97: 81878v Analytical potentials for triatomic molecules. IX. The prediction of anharmonic force constants from potential energy surfaces based on harmonic force fields and dissociation energies for sulfur dioxide and ozone. Carter, S.; Mills, I. M.; Murrell, J. N.; Varandas, A. J. C. (Dep. Chem., Univ. Reading, Reading, UK RG6 2AD). *Mol. Phys.* 1982, 45(5), 1053-66 (Eng). Anal. potential energy functions which are valid at all dissocn. limits were derived for the ground states of SO₂ and O₃. The procedure involves minimizing the errors between the obsd. vibrational spectra and spectra calcd. by a variational procedure. Good agreement is obtained between the obsd. and calcd. spectra for both mols. Comparisons are made between anharmonic force fields, previously detd. from the spectral data, and the force fields obtained by differentiating the derived anal. functions at the equil. configurations.

q - vel NO -
metus. Href.

④ O₃

@.A. 1982, 97, N10

SO₂

1982

Vi, reoerip,
CTpyKTupa,
cyr. nocm.

Chinnappan V. A., Nata-
rajan A.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N1, 14-17.

(cur. H₂O; III)

SO₂

1982

2 Д759. Спектры возбуждения и флуоресценция молекул SO₂. Excitation and fluorescence spectra of disulfur monoxide. Chiu C. L., Sung P. C., Chen L. D. «J. Mol. Spectrosc.», 1982, 94, № 2, 343—350 (англ.)

Система полос 3400 Å молекулы SO₂ зарегистрирована впервые в спектрах возбуждения и флуоресценции. Определены квантовые выходы флуоресценции в отдельных вибронных полосах спектра поглощения. Необычно малые квантовые выходы для некоторых полос поглощения и большие ширины некоторых полос в спектре флуоресценции позволяют предположить, что «одиночные» полосы поглощения в действительности есть результат наложения нескольких переходов. В спектре флуоресценции всего идентифицирована 31 полоса, которая укладывается в 5 прогрессий по колебанию ν_2'' . Отмечено, что хотя в спектре и наблюдаются полосы с $\nu_2''=8$, определить новые колебательные постоянные SO₂(x) не удастся ввиду недостаточно высокого разрешения (~ 8 Å). Библ. 14. В. С. Иванов

спектры
возбуждения
и
флуоресц.

Фр. 1983, 18, № 2

SO₂

Om. 15707

1982

8 Б848. Сродство к электрону молекул SO₂ и нитробензола. Electron affinities of SO₂ and nitrobenzene. Fukuda Elaine K., McIver Robert T., Jr. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 10, 4942—4948 (англ.)

Методом импульсного ионного циклотронного резонанса измерено сродство к электрону (СЭ) молекул SO₂ и нитробензола (I). Показано, что СЭ, полученные на основе измерения константы равновесия р-ции C₆H₅NO₂⁻ + SO₂ = SO₂⁻ + C₆H₅NO₂ (I), составляют соотв. 2,2 ± 0,1 и 2,1 ± 0,1 эВ, что значительно превышает величины СЭ этих молекул, измеренные ранее методом фотоэлектронной спектроскопии. Предложено возможное объяснение обнаруженного расхождения. Изучены р-ции SO₂ с ионами CH₃S⁻(CH₃)₃CO⁻ и р-ции I с ионами (CH₃)₃CO⁻, CH₃S⁻, S₂⁻, SiH₃⁻. Определенное на основе этих р-ций СЭ для SO₂ и I удовлетворительно согласуется с результатами, полученными при изучении в р-ции (I).

В. А. Сараев

Ае;



Х. 1983, 19, № 8.

Нитробензол

SO₂

1982

Khoobehi Bahram.

Diss. Abstr. Int. B 1983,

chemp

43 (11), 3638.

( cer. NO₂ ; III)

SO₂

спектр

ср. 1982, 18, N 11

1982

11 Д791. Изменения флуоресценции оптически возбужденных молекул SO₂, индуцированные ИК-многофотонным возбуждением. Changes in fluorescence induced by infrared multiphoton excitation of optically excited SO₂. Kimel S., Feldmann D., Laukemper J., Welge K. H. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4893—4903 (англ.)

Установлено, что дополнительная ИК-многофотонная накачка молекул SO₂, оптически возбужденных УФ-излучением на уровне с энергией $\sim 32\,000\text{ см}^{-1}$, приводит к уменьшению интенсивности основных полос флуоресценции SO₂ и появлению новых широких полос с коротковолн. стороны линии УФ-возбуждения. Сечение ИК-многофотонного поглощения равно $\sim 1,5 \cdot 10^{-21}\text{ см}^2$. Изучена кинетика затухания флуоресценции при включенной и выключенной ИК-накачке. Полученные данные интерпретированы в рамках модели усиления взаимодействия возбужденных вибронных состояний с высшими колебательными уровнями основного электронного состояния при ИК-многофотонном возбуждении. Резюме

SO₂

1982

Zalo-Kourilsky, Chris-
tiane Verneil, Cathe-
rine.

чекмр
стомермекс.

J. Photochem. 1982,
19(2), 109-121.

(сер. SO; III)

SO₂

1982

Д854. Исследования влияния магнитного поля на интенсивность и время жизни люминесценции двуокиси серы в газовой фазе. Studies of magnetic field effects on the intensity and the lifetime of sulfur dioxide luminescence in the gas phase. Makarov V. I., Lavrik N. L., Bazhin N. M. «Chem. Phys.», 1982, 72, № 1—2, 213—223 (англ.)

флуоресц.

Исследовано влияние внешнего магн. поля на кинетику и интенсивность флуоресценции (ФЛ) и фосфоресценции (ФР) SO₂, возбуждаемой при давл. $\leq 1,0$ мм рт. ст. и т-ре 20—163°С импульсами излучения лазера ЛТИ-ПЧ-8 (266 нм, 10 нс). Полученные данные интерпретированы в рамках теории (Freed K. F. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, 1604) возникновения индуцированного столкновениями ровибронного квазиконтинуума в основном состоянии SO₂($\bar{X}^1A_1$). Предположено, что уменьшение времени жизни ФЛ вызвано по-

ср. 1983, 18, №3

явлением под действием магн. поля связи люминесцентного состояния $\tilde{B}^1B_1$ с квазиконтинуумом $\tilde{X}^1A_1$, а снижение интенсивности ФР без изменения ее времени жизни — уменьшением заселенности термически равновесного уровня $(0,0,0)$ состояния a^3B_1 в результате усиленного тушения высших колебательных уровней этого состояния. Рассмотрены данные по магн. тушению ФР SO_2 , сенсibilизированной биацетилом. Библ. 47. С. Литке

SO₂

Ommick 13985

1982

($\tilde{A}^1A_2$)

спектр
флуор.
6

MacDonald B.G., Lee E.K.

J. Phys. Chem., 1982, 86,
N3, 323-324.

500

1982

к вопросу
осущество-
вании

11 Д60. К вопросу о существовании супероксида серы и его образования при сгорании дисульфида углерода. On the existence of sulfur superoxide and its formation in the combustion of carbon disulfide. Myerson Albert L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 5188—5189 (англ.)

Анализируется состояние вопроса о существовании изомера супероксида серы SOO , который может образовываться при сгорании некоторых серосодержащих соединений, например SO , CS_2 , COS . На возможность существования этого изомера указывает, напр., абсорбционный континуум в районе 210—300 нм, наблюдаемый в спектрах при сгорании CS_2 , COS , H_2S . Рассмотрение кинетики реакций, ответственных за образование супероксида серы SCO с привлечением последних эксперим. данных позволяет автору сделать вывод о правильности заключений ранних работ о роли SOO при сгорании серосодержащих соединений. В. А. Куликов

сп. 1982, 18, № 11

50₂

[Оммуек 14927]

1982

Эмерсии
ионизации,
относит.
интенсив.
(расчет и
экспери-
мент).

Niessen W., Cederbaum
et al., U.S.,
J. Electron Spectrosc.
and Relat Phenom.,
1982, ● 28, 45-78.

1982

SO₂

8 Б254. О димере диоксида серы в твердом азоте.
On the sulphur dioxide dimer in solid nitrogen. Nord
Leif. «J. Mol. Struct.», 1982, 96, № 1—2, 19—25
(англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения диоксида серы в матрице из азота ($M/R=1:140-1:1200$). Наблюдали три группы полос в областях $1125-1155\text{ см}^{-1}$, $510-526\text{ см}^{-1}$ и $1330-1360\text{ см}^{-1}$ соотв-щих фундаментальным частотам колебаний ν_1 , ν_2 и $\nu_3\text{SO}_2$. Полосы, появляющиеся только при малых разбавлениях, отнесены к димерным молекулам или изотопозамещенным по $^{34,33}\text{S}$ и ^{18}O молекулам мономера (М) и димера (Д). Положение (в см^{-1}) и принадлежность полос: 1155,2 (Д), 1153,9 (Д), 1152,6 (М), 1148,8 (Д, ^{34}S или (и М, ^{33}S), 1145,1 (М, ^{34}S), 1124,7 (М, $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$), 526,1 (Д), 524,0 (Д), 521,4 (М), 517,1 (М, ^{34}S), 510,8 (М, $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$), 1359,5 (полимер), 1351,4 (М), 1349,2 (Д), 1346,6 (Д), 1344,8 ($\text{SO}_2 + \text{H}_2\text{O}$?), 1343,0 (М, ^{33}S), 1334,8 (М, ^{34}S), 1332,2 (Д, ^{34}S и М, $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$), 130,1 (Д, ^{34}S). Сделан вывод,

 ν_1 ;

 $(\text{SO}_2)_2$

Х. 1983, 19, № 8.

что фрагменты SO_2 в димере неэквивалентны и предлагаются две структуры димера: I — второй фрагмент SO_2 расположен относительно первого таким образом, что атомы $\text{S—O} \dots \text{S}$ находятся на прямой, совпадающей с одной из осей C_2 ; II — плоскости фрагментов SO_2 взаимно перпендикулярны, а оси C_2 параллельны. В. М. Ковба



SO₂

1982

6 Б92. Упругое рассеяние электронов на SO₂. Elastic scattering of electrons from SO₂. Orien O. J., Iga I., Srivastava S. K. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 7, 3523—3526 (англ.)

Методом скрещенных электронного и молек. пучков измерены отношения дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов на молекулах SO₂ и атомах He. Пучок перв. электронов монохроматизировался с точностью 50 мэВ. Измерения для SO₂ и He чередовались. Сечения измерены для энергий перв. электронов $E=12, 20, 50, 100, 150, 200$ эВ и углов рассеяния $\theta=5-150^\circ$. По известным абс. сечениям для He определены интегральные сечения и сечения передачи импульса для SO₂. Результаты измерений сечений сопоставлены с результатами их расчета в приближении независимых атомов с учетом эффектов поляризации, электронного обмена и без учета этих эффектов (статич. Пт).

Молекул.
пучки

✓
(H) He

Х. 1983, 19, № 6

Рассчитанные сечения слабо зависят от используемой модели расчета и качественно совпадают с эксперим. для $E \geq 100$ эВ и $\theta \geq 40^\circ$.

Е. Николаев

Атмосферный SO_2

1982

в спектре
поглощения
атмосферы

Sci. Tech. Atmosp.

Rep. 1982, 20 (6),

Abstr. No N 82-15853.

(сер. H_2O , III)

SO₂

1982

16 Б158. Явление квантовых биений во флуоресцентном распаде состояния $\tilde{C}(^1B_2)SO_2$. Sharfin Wayne, Ivancso Michael, Wallace Stephen C. Quantum beat phenomena in the fluorescence decay of the $\tilde{C}(^1B_2)$ state of SO_2 . «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 4, 2095—2096 (англ.)

Измерено затухание флуоресценции из отдельных электронно-колебательно-вращательных уровней состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ молекул SO_2 переохлажденных в сверхзвуковом потоке. Возбуждение осуществляли удвоенной частотой лазера на красителе, накачиваемом Nd:ИАГ-лазером (длительность импульса $\sim 3,2$ нс, $\Delta\nu \leq 0,1$ см⁻¹). Зарегистрированы кривые распада флуоресценции для колебательных уровней, лежащих на 2030—3130 см⁻¹ выше нулевого. Примерно в 10% случаев наблюдали явление квантовых биений, причем более часто биения встречаются, когда колебательная энергия относитель-

М.П.

Х. 1982, 19, № 16.

но нулевого уровня состояния $\tilde{C}$ увеличивается. Путем преобразования Фурье кривых распада показано, что возбужденное состояние взаимодействует только с одним возмущающим уровнем. Установлено, что состояние, вызывающее появление квантовых биений, является основным $X(^1A_1)$, а взаимодействие имеет вибронный характер. При возбуждении уровней состояния $\tilde{C}$, лежащих выше диссоциац. предела основного состояния, наблюдается уменьшение времен жизни флуоресценции, связанное с преддиссоциацией, обусловленной взаимодействием связанного состояния с континуумом.

С. Б. Осип

SO₂

1982

8 Д755. Явление квантовых биений при затухании флуоресценции состояния $C(^1B_2)$ молекулы SO₂. Quantum beat phenomena in the fluorescence decay of the $C(^1B_2)$ state of SO₂. Sharfin Wayne, Ivanco Michael, Wallace Stephen C. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 4, 2095—2096 (англ.)

спектр

Впервые обнаружены квантовые биения для трехатомной молекулы. Биения зарегистрированы на кривой затухания флуоресценции с отдельного колебательно-вращательного уровня состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ молекулы SO₂. Флуоресценция сверхзвукового пучка молекул SO₂ возбуждалась излучением перестраиваемого лазера на красителе. Механизм квантовых биений обусловлен вибронным связывание состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ с основным состоянием $X(^1A_1)$. Отмечено, что полученные результаты имеют большое значение с точки зрения проверки теорий процессов радиационного затухания простых многоатомных молекул.

В. А. Е.

ф. 1982, 18, № 8.

SO₂

Дм. 14469, а'

1982

11 Д867. Прямые спектральные доказательства наличия нового низколежащего триплетного состояния SO₂ при 4,2 К. Direct spectroscopic evidence for a new, low-lying electronic triplet state in SO₂ at 4,2 K. Snow Judith Bannon, Hovde David C., Colson Steven D. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 8, 3956—3959 (англ.)

Li, Vi

Измерены спектры и времена жизни флуоресценции, а также спектры возбуждения флуоресценции кристаллов SO₂ при 4,2 К. Возбуждение SO₂ осуществлялось с помощью излучения лазера на красителе с синхронной накачкой от эксимерного лазера, работающего с частотой 10 Гц. Для записи спектров флуоресценции использовался оптический многоканальный анализатор. Установлено, что при возбуждении SO₂ в полосе поглощения, обусловленной электронным переходом $^1A_1 \rightarrow ^3B_1$ (при 26387 см⁻¹), флуоресценция SO₂ осуществляется из более низкого (на 83 см⁻¹) три-

ор. 1982, 18, № 11

плетного состояния. Слабая полоса при $26\,304\text{ см}^{-1}$ зарегистрирована в спектрах возбуждения фосфоресценции SO_2 . Отмечено, что наблюдаемая фосфоресценция не является излучением дефектов кристаллич. решетки. Сделано предположение о симметрии обнаруженного низколежащего триплетного состояния SO_2 (3A_2). Библ. 21. Т. А. Ш.



SO₂

О.М.Иск 14469(a) 1982

21 Б182. Прямые спектроскопические данные о новом, низлежащем электронном триплетном состоянии в SO₂ при 4,2 К. Snow J. B., Hovde D. C., Colson S. D. Direct spectroscopic evidence for a new, low-lying electronic triplet state in SO₂ at 4.2 K. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 8, 3956—3959 (англ.)

Исследованы спектры возбуждения и фосфоресценции кристаллич. SO₂ при т-ре 4,2 К. Спектры возбуждали перестраиваемым лазером на красителе с накачкой от лазера на эксимерах, работающем с частотой повторения 10 Гц. Регистрацию осуществляли фотоэлектронным умножителем или оптич. многоканальным анализатором с использованием двойного монохроматора. Обнаружен энергетич. сдвиг 83 ± 2 см⁻¹ между головными сериями в спектрах поглощения и излучения. Такое различие в спектрах обусловлено тем, что в поглощении и излучении участвуют различные триплетные уровни, один из к-рых лежит на 83 см⁻¹ ниже. Новое электронное триплетное состояние, лежащее ниже уровня ³B₁, относят к симметрии ³B₂ или ³A₂.

А. Т. Суходольский

Si, новые
состояния

Х. 1982, 19, №21

SO₂

1982

5 Д451. Выход флуоресценций при фотодиссоциации молекул SO₂ в области 1060—1330 Å. Fluorescence yields from photodissociation of SO₂ at 1060—1330 Å. Suto Masako, Day R. L., Lee L. C. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 22, 4165—4174 (англ.)

флуоресценция

С использованием синхротронного излучения измерены сечения поглощения и флуоресценции молекулы SO₂ (I) в области 1060—1330 Å. Структура ~~полос~~ в спектре поглощения, коррелирующая с линиями фотоэлектронного спектра I, приписана ридберговским сериям, сходящимся к соответствующим состояниям иона SO₂⁺. Получено новое значение для величины пороговой энергии диссоциации I (5,52 эВ). Это позволило связать структурные особенности на кривой квантового выхода флуоресценции с порогами различных фотодиссоциационных каналов. Установлено, что основной вклад в флуоресценцию обусловлен переходами A³Π → X³Σ⁻ и B³Σ⁻ → X³Σ⁻ радикала SO. Библ. 21.

В. А. Е.

р. 1983, 18, 45

SO₂

1982

9 Б176. Выходы флуоресценции при фотодиссоциации SO₂ в области 1060—1330 Å. Fluorescence yields from photodissociation of SO₂ at 1060—1330 Å. Suto M., Day R. L., Lee L. C. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1982, 15, № 22, 4165—4174 (англ.)

С использованием синхротрона в качестве источника излучения в области 1060—1330 Å измерены сечения фотопоглощения и флуоресценции (Ф) SO₂. В интервале 1225—1300 Å наблюдается электронное состояние с колебательной прогрессией с $\Delta\nu \sim 390 \text{ см}^{-1}$ и эффективным квантовым числом $n=2,27$, для которого характерны большие сечения поглощения. Это состояние SO₂ отнесено к ридберговскому типу, причем пределом является состояние $X^2A_1SO_2^+$. Показано, что состояние в области 1190—1225 Å с меньшими сечениями поглощения и колебательной частотой $\sim 390 \text{ см}^{-1}$ относится к той же ридберговской серии, но имеет другую симметрию. В области 1115—1150 Å обнаружены две прогрессии с

Спектр, М.П.

(*) 

Х. 1983, 19, № 9

SO₂ + (серия фотопоглощ. и флуор.)

частотами $\sim 950 \text{ см}^{-1}$, близкими к частотам ν_1 и ν_2 иона SO_2^+ в состоянии A^2A_2 . Предположено, что эти прогрессии обусловлены наличием ридберговского состояния, связанного с переходом $1a_2 \rightarrow 4s$. Пики в области $1060\text{—}1110 \text{ \AA}$ ($\Delta\nu \sim 390 \text{ см}^{-1}$) отнесены к ридберговскому состоянию ($5b_2 \rightarrow 4s$), сходящемуся к состоянию $B^2B_2\text{SO}_2^+$. Отмечено, что сигнал Ф появляется при облучении длинами волн $< 1300 \text{ \AA}$. В области длин волн короче $1140 \text{ \AA}$ сечения Ф имеют такую же структуру пиков, что и сечения поглощения. Обнаружено, что при облучении в интервале $1200\text{—}1300 \text{ \AA}$ сечения Ф в областях $1900\text{—}8000 \text{ \AA}$ и $3000\text{—}8000 \text{ \AA}$ одинаковы, а при облучении с $\lambda < 1190 \text{ \AA}$ — различаются более, чем в 2 раза (соотв. квантовые выходы составляют 9,5 и 4%), что объяснено вкладом системы $A^3\Pi - X^2\Sigma - \text{SO}$, образующихся в процессе диссоциации $\text{SO}_2 \rightarrow \text{SO}(A^3\Pi) + \text{O}(^3P)$.

В. М. Ковба



SO₂

[Ommuck 14938]

1982

Swanson B., Babcock L.M.
et al.,

Раман.
спектр
при высоком
давлении,
фазов. переход,
фотохим.

Chem. Phys. Lett., 1982,
91, N 5, 393-395.



SO₂

1982

спектр

— 11 Д781. Квантовые интерференционные эффекты в SO₂ при радиационном затухании состояния $\tilde{C}(^1B_2)$. Quantum interference phenomena in the radiative decay of the $\tilde{C}(^1B_2)$ state of SO₂. Wallace S., Ivancso M., Hager J., Sharfin W. — 12 International Quantum Electronics Conference, Munich, 22—25 June, 1982. — «Appl. Phys.», 1982, В28, № 2—3, 278 (англ.)

Наблюдались квантовые биения во флуоресцентном затухании выделенных ровибронных уровней состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ молекулы SO₂, охлажденной в суперзвуковом пучке. Вследствие низкой плотности взаимодействующих состояний осцилляции флуоресцентного затухания первоначально возникают в произвольных ровибронных состояниях, и биения характеризуются простым преобразованием Фурье, что указывает на единствен-

ор. 1982, 18, N 11

ный возмущающий уровень. Биения обусловлены вибронной связью с основным электронным состоянием $X(^1A_1)$. При возбуждении уровней в состоянии S выше предела диссоциации основного состояния наблюдалось только укорочение времен жизни вследствие преддиссоциации, поскольку указанный случай соответствует взаимодействию связанного состояния с континуумом.

Б. Д. Ф.

SO₂

1982

/96: 94333t Fluorescence excitation spectrum and single rovibronic level lifetime of sulfur dioxide($\bar{A}^1A_2$) in a supersonic jet. Watanabe, Hajime; Hyodo, Yoshihiko; Tsuchiya, Soji; Koda, Seiichiro (Coll. Gen. Educ., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(5), 685-92 (Eng). Rotationally cooled SO₂ was prepd. through supersonic nozzle expansion of its seeded mixt. in Ar and was excited to the 1st electronically allowed state by a frequency-doubled dye laser pulse in the wavelength range of 300 ~ 320 nm. The obsd. fluorescence excitation spectra for Clements' *E* band could be reproduced almost by calcn. based on the literature values of the

fmm;

C.A. 1982, 96, N12

rotational consts. detd. by the high-resoln. absorption spectroscopy. However, in other bands of *B*, *D*, and *G*, only a poor agreement was found, indicating that a large no. of excited levels are perturbed significantly. In the time-resolved fluorescence measurement with a 0.5-cm^{-1} excitation bandwidth, almost all lines of the Clements letter bands exhibit clear biexponential decays with large fractions of the short-lived component, while some weak lines decay single-exponentially missing the short-lived component. However, this observation of the single-exponential decay has to be revised in the data of the fluorescence measurement of SO_2 excited to a single rovibronic state by the laser pulse of the 0.02-cm^{-1} bandwidth. All of the rovibronic levels examd. exhibit biexponential decay having a short lifetime of $3\text{--}5\ \mu\text{s}$ and a long one of $15\text{--}30\ \mu\text{s}$. This result leads to the conclusion that the initially prepd. $^1\text{A}_2$ state by the laser irradiation couples with a small no. of other levels with a very small oscillator strength. The degree of the coupling is different in level to level and is detd. by accidental approach of these levels.

SO₂

1982

Спектр
возбуждения
флуоресц.

19 Д668. Спектр возбуждения флуоресценции и времена жизни отдельных колебательно-вращательных уровней состояния $\text{SO}_2(\tilde{A}^1A_2)$ в сверхзвуковом пучке. Fluorescence-excitation spectrum and single rovibronic level lifetime of $\text{SO}_2(\tilde{A}^1A_2)$ in a supersonic jet. Watanabe Hajime, Hyodo Yoshihiko, Tsuchiya Soji, Koda Seichiro. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 5, 685—692 (англ.)

С использованием охлаждения в сверхзвуковой струе получен спектр (300—320 нм) возбуждения флуоресценции молекул SO_2 . Модельные расчеты с использованием известных значений спектроскопич. постоянных хорошо воспроизводят E-полосу, но лишь в общих чертах согласуются с эксперим. данными для B-, D- и C-полос. На этом основании сделано заключение о значительных возмущениях в состояниях B, D и C. При использовании лазера с шириной полосы $0,5 \text{ см}^{-1}$ затухание флуоресценции, возбуждаемой в слабых поло-

Ф. 1982, 18, № 9.

сах, является одноэкспоненциальным, а в сильных — биэкспоненциальным. Однако при возбуждении лазером с шириной полосы $0,02 \text{ см}^{-1}$ в затухании флуоресценции, возбуждаемой в слабых полосах, также отчетливо наблюдаются две экспоненты. Времена затухания для короткоживущей и долгоживущей компонент флуоресценции равны соответственно 3—5 и 15—30 мкс. Сделано заключение, что лазерное излучение связывает первоначально возбужденное состояние 1A_2 с некоторыми другими состояниями с очень малой силой осциллятора. Сила связи нерегулярно изменяется от уровня к уровню, что свидетельствует о случайном характере взаимодействий. Библиография. 38. В. С. Иванов

SO₂

1982

спектр,

М.П.

18 Б145. Спектр возбуждения флуоресценции и времена жизни отдельных колебательно-вращательных уровней $\text{SO}_2(\bar{A}^1A_2)$ в сверхзвуковой струе. Watanabe Hajime, Hyodo Yoshihiko, Tsuchiya Soji, Koda Selichiro. Fluorescence excitation spectrum and single rovibronic level lifetime of $\text{SO}_2(\bar{A}^1A_2)$ in a supersonic jet. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 5, 685—692 (англ.)

В области первого разрешенного электронного перехода ($\bar{A}^1A_2 - \tilde{X}^1A_1$, 300—320 нм) измерен спектр возбуждения флуоресценции SO_2 в сверхзвуковой струе. Для возбуждения использован импульсный перестраиваемый лазер на красителе с частотным удвоением и шириной полосы возбуждения 0,5 и 0,02 см⁻¹. Эксперим. контуры вращательной структуры полос B ($v_1' = 0, v_2' = 2, v_3' = 0$), D (200, 030), E (120), G (300, 130) сопоставляются с рассчитанными (для $T = 10$ К) с использова-

X. 1982, 19, № 18.

нием известных значений вращательных молек. постоянных. Найдено, что для полосы E расчет почти полностью воспроизводит эксперим. контур, в то время как для полос B , D и G наблюдаются значительные расхождения. Это объясняется тем, что большое число возбужденных уровней возмущено. Анализ временной зависимости интенсивности флуоресценции (ширина полосы возбуждения $0,5 \text{ см}^{-1}$) показал, что почти для всех линий вращательной структуры полос B , D , G , а также полос A (100), C (110), F (210, 040) характерен двухэкспоненциальный распад с преобладанием коротковолновой компоненты ($\tau=3,5-6 \text{ мксек}$), в то время как для нек-рых слабых линий распад носил одноэкспоненциальный характер. Однако, как найдено при более узкополосном возбуждении ($0,02 \text{ см}^{-1}$), для всех колебательно-вращательных уровней характерен двухэкспоненциальный распад ($\tau=3-5$ и $15-30 \text{ мксек}$).

В. М. Ковба

SO₂

Оттиск 14613

1982

23 Б131. Автоионизационные состояния SO_2 .
Wu C. Y. R., Ng C. Y. Autoionization states of SO_2 .
«J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 9, 4406—4411 (англ.).

С использованием ранее полученных эксперим. данных по фотоионизац. масс-спектрометрии молек. пучков проведено отнесение 5 автоионизац. состояний молекулы SO_2 в области переходов с длиной волны 960—810 Å. В результате анализа колебательных прогрессий наблюдаемые автоионизац. состояния связаны с переходами в след. ридберговы состояния: $4b_2 \rightarrow 3s$, $4b_2 \rightarrow 3d$, $7a_1 \rightarrow 3p$, $7a_1 \rightarrow 3d$ и $2b_1 \rightarrow 3p$. Все ридберговы состояния, являющиеся конечными состояниями наблюдаемых переходов, имеют автоионизац. природу и могут наблюдаться в спектре поглощения в области энергий больших, чем 1-й Пт ионизации SO_2 . Анализ кривых эффективности поглощения и фотоионизации SO_2 показал, что наблюдаемые линии имеют

спектр,
М.П., &c

Х. 1982, 19, № 23

различную форму (профили Бойтлера—Фано): ассим. форму, пики в области континуума и спад интенсивности ниже континуума. Эти характерные особенности линий объяснены взаимодействием ридберговских состояний с состояниями непрерывного спектра.

И. А. Тополь

SO₂

Оттиск 14.8.82

1982

12 Д735. Автоионизационные состояния SO₂. Auto-ionization states of SO₂. Wu C. Y. R., Ng C. Y. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 9, 4406—4411 (англ.)

Пять автоионизационных полос на кривой эффективности фотоионизации SO₂ в области 960—810 Å приписаны ридберговским переходам $4b_2-3s$, $4b_2-3d$, $7a_1-3p$, $7a_1-3d$, $2b_1-3p$. Обнаруженная ранее (Wu C. Y. R. et al. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, 3804) в спектре поглощения SO₂ серия отрицат. резонансов наблюдалась также на кривых эффективности фотоионизации SO₂ с образованием SO₂⁺ и SO⁺.

фотоиониза-
ция

р. 1982, 18, № 12

SO₂

OMMUCK 146 13

1982

96: 225992g Autoionization states of sulfur dioxide. Wu, C. Y. R.; Ng, C. Y. (Dep. Phys., Univ. South. California, Los Angeles, CA 90007 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(9), 4406-11 (Eng). The assignments are reported of 5 autoionizing states of SO₂ in the 960-810 Å region. The exptl. data used in the present anal. were previously obtained by mol. beam photoionization mass spectroscopy. The obsd. vibrational progressions are tentatively assigned to the following Rydberg transitions: $4b_2 \rightarrow 3s$, $7a_1 \rightarrow 3p$, $7a_1 \rightarrow 3d$, and $2b_1 \rightarrow 3p$. The window resonance series previously reported (C.Y.R. Wu and D. L. Judge, 1981) in a photoabsorption measurement is confirmed in the photoionization efficiency curves of SO₂⁺ and SO⁺.

автоматиз.
состояние

C. A. 1982, 96, N26.

SD₂

1983

/ 101:200291m Use of multidimensional statistical analysis methods in determining force constants of the generalized valence force field of simple molecules. II. Numerical example. Sulfur dioxide molecule. Aleksandrov, A. P. (Inst. Elementoorg. Soedin., Moscow, USSR). *Deposited Doc.* 1983, VINITI 3791-83, 28 pp. (Russ). Avail. VINITI. A review with 12 refs.

Chel. noem.

© A. 1984, 101, N22

SO₂

1983

24 Б82Деп. Применение методов многомерного статистического анализа при определении силовых коэффициентов общего валентного силового поля простых молекул. II. Численный пример. Молекула SO₂. Александров А. П.; Ин-т элементоорганич. соедин. АН СССР. М., 1983. 27 с., ил. Библиогр. 12 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 8 июля 1983 г., № 3791—83 Деп.)

Методы многомерного статистич. анализа (см. пред. реф.) систематически применены к значениям силовых коэф. молекулы SO₂, определенным из эксперим. лит. значений τ -постоянных центробежного искажения изотопозамещенных молекул SO₂ в основном колебательном состоянии. Вычислены несмещенные оценки вектора матем. ожидания силовых коэф. SO₂, соотв-щей ковариацион. и корреляц. матриц и ряда др. величин. Определены формально линейные статистич. зависимости между нек-рыми силовыми коэф. SO₂. Вычисленная допустимая оценка по Стейну θ^* для вектора силовых коэф. SO₂ совпадает с его несмещенной оценкой. Проверялась многомерная нормальность по Мардиа вектора силовых коэф. SO₂.

Автореферат

Сил. пост.

X. 1983, 19,
N 24

SO₂

[Ommick 16561]

1983

Andric L., Cadez I.,
et al.,

crxmp

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1983, 16, N10,
1837-1851.

SO₂

Dom. 17640

1983

теоретическое
поперечное,
ab initio
расчет

Васильев В. В.,

J. Chem. Phys., 1983,
79, N 4, 2090-2092.

SO₂

1983

связана
но
с космическими

Bohmann J, Witschel W.
Z. Naturforsch., A: Phys.,
Phys. Chem., Kosmophys.
1983, 38A(2), 167-83.

• (ср. H₂O; II)

SO₂

1983

UD42. Полуклассическое определение потенциальных поверхностей по экспериментальным спектрам. Ч. I. The semi-classical determination of potential surfaces from observed spectra. I. Colwell S. M., Percival I. C. «Chem. Phys.», 1983, 75, № 2, 215—223 (англ.)

Предложена полуклассич. процедура определения параметров потенц. поверхностей многоатомных молекул по их колебательно-вращательным спектрам, основанная на квантовании т. наз. инвариантного тора по Эйнштейну—Бриллюэну—Келлеру и на классич. аналоге теоремы Гельмана—Фейнмана. Варьирование параметров потенциала производится до наилучшего воспроизведения эксперим. спектра, причем учитываются стандартные отклонения эксперим. данных. Выполнены тестовые расчеты для ряда модельных потенциалов, молекул SO₂, CO и J₂.

В. И. Барановский

расчет
потенциалов
поверхности

(+2) ☒



ср. 1983, 18, № 9

502

1983

13 Б50. Квазиклассическое построение потенциальных поверхностей на основании экспериментальных спектров. I. The semiclassical determination of potential surfaces from observed spectra. I. Colwell S. M., Percival I. C. «Chem. Phys.», 1983, 75, № 2, 215—223 (англ.)

Развит квазиклассич. метод построения потенциальных поверхностей (ПП) многоатомных молекул на основании эксперим. колебательно-вращательных спектров. Метод использует многократное решение квазиклассич. методом прямой задачи. На каждом шаге вычисляется суммарная среднеквадратичная ошибка воспроизведения эксперим. уровней энергии. Если она велика, то значения параметров, определяющих ПП, модифицируются. Необходимые значения пр-ных полной энергии по параметрам вычисляются с помощью теоремы Геллмана — Фейнмана. Отмечено, что для однозначного определения ПП необходимо использовать информацию о вращательных постоянных. Метод применен к определению параметров двумерной модельной ПП, а также ПП молекул SO_2 , CO и J_2 .

В. Б. Павлов-Веревкин

расчет потенц.
поверхн.X. 1983, 19,
11/3

(12)

SO₂

1983

Donovan R. J., Fotakis C,
et al.

спектр Can. J. Chem., 1983,
61, NS, 1023-1026.

● (ср. СС; III)

SO₂

от. 16273 1983

7 Д63. Решение уравнения Шрёдингера спектральным методом. Ч. II. Колебательные уровни энергии трехатомных молекул. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method II. Vibrational energy levels of triatomic molecules. Feit M. D., Fleck J. A., Jr. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 1, 301—308 (англ.)

Численный метод расчета ф-ции корреляции для решений нестационарного ур-ния Шрёдингера и фурье-преобразования этой ф-ции применен к определению колебательных уровней энергии трехатомных молекул. При этом уровни энергии соответствуют полюсам фурье-образа ф-ции корреляции. Расчеты выполнены для 20 низших колебательных состояний молекулы SO₂, допускающих сравнение с расчетами других авторов, выполненных более традиционными методами (по теории возмущений; полуклассич. методом, в гармонич. приближении; вариац. методом). Получено хорошее со-

метод
расчета V_i ;

(42)

фр. 1983, 18, № 7

O₃, H₂O

гласие с наиболее точными из них, подтверждающее высокую точность метода спектрального разложения ф-ции корреляции. Сверх того, впервые рассчитаны еще 84 колебательных уровня молекулы SO_2 . Для молекул Q_3 и H_2O спектральным методом рассчитаны по 14 низших колебательных уровней в хорошем согласии с вариационными расчетами других авторов. Сделан вывод о практической численного метода спектрального разложения ф-ции корреляции в приложении к расчетам колебательных уровней многоатомных молекул. В. Н. Р.

SO₂

Om. 16273

1983

98: 98035m Solution of the Schroedinger equation by a spectral method. II. Vibrational energy levels of triatomic molecules. Feit, M. D.; Fleck, J. A., Jr. (Lawrence Livermore Natl. Lab., Univ. California, Livermore, CA 94550 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(1), 301-8 (Eng). The spectral method utilizes numerical solns. to the time-dependent Schroedinger equation to generate the energy eigenvalues and eigenfunctions of the time-independent Schroedinger equation. Accurate time-dependent wave functions $\psi(r,t)$ are generated by the split operator FFT method, and the correlation function $\langle \psi(r,0) | \psi(r,t) \rangle$ was computed by numerical integration. Fourier anal. of this correlation function reveals a set of resonance peaks that correspond to the stationary states of the system. Anal. of the location of these peaks reveals the eigenvalues with high accuracy. Addnl. Fourier transforms of $\psi(r,t)$ with respect to time generate the eigenfunctions. Previous applications of the method were to 2-dimensional potentials. Energy eigenvalues and wave functions obtained with the spectral method are presented for vibrational states of 3-dimensional Born-Oppenheimer potentials applicable to SO₂, O₃, and H₂O. The energy eigenvalues are compared with results obtained with the variational method. The spectral method is an accurate tool for treating a variety of practical 3-dimensional potentials.

Koniam.
yobee
Hepruu

(42)

C.A. 1983, 98, N 12

ha 26

O_3, H_2O

SO₂

1983

1 Д408. Параметр асимметрии фотоэлектронов и коэффициенты ветвления для двуокиси серы в области энергий фотонов 14—25 эВ. Photoelectron asymmetry parameters and branching ratios for sulfur dioxide in the photon energy range 14—25 eV. Holland D. M. P., Parr A. C., Dehmer J. L. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1983, 32, № 3, 237—243 (англ.)

С использованием эксперим. установки, описанной авторами ранее «J. Chem. Phys.», 1982, 76, 4349), получены трижды диффер. фотоэлектронные спектры (дифференциальные по длине волны фотонов, кинетич. энергии фотоэлектронов и углу их вылета) молекулы SO₂ в интервале энергии фотонов 14—25 эВ. Результаты представлены в виде энергетич. зависимостей коэф. ветвления и параметров асимметрии фотоэлектронов для различных спектральных полос. На их основании проведен сравнительный анализ электронной структуры молекул SO₂ и CO₂. Библ. 30.

Е. П. Смирнов

электронная
структура

✓
(41)

ср. 1984, 18, N1

SO₂

1983

12 Д753. Квантовые интерференционные явления при радиационном распаде SO₂. Quantum interference phenomena in the radiative decay of the $\tilde{C}(^1B_2)$ state of SO₂. Ivanko Michael, Hager James, Sharfin Wayne, Wallace Stephen C. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6531—6540 (англ.)

Молекулы SO₂ в сверхзвуковой струе He возбуждали импульсным УФ-лазером с перестраиваемой длиной волны и исследовали временные зависимости затухания флуоресценции состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ при различных энергиях возбуждения. Обнаружен эффект квантовых интерференционных биений, проявляющийся в неэкспоненц. затухании флуоресценции и весьма чувствительный к степени когерентности и монохроматичности возбуждающего излучения. Установлено, что при энергиях возбуждения выше порога диссоциации SO₂ биений не наблюдается, на основании чего сделан вывод о смеще-

фр. 1983, 18, № 12

вании возбужденного $C(^1B_2)$ и основного $X(^1A_1)$ состояний SO_2 . Из анализа формы кривых затухания получены коэф. смешивания указанных состояний. Показано, что наблюдающийся в магн. поле слабый сдвиг частоты биений объясняется эффектом Зеемана. Библ. 30. Е. Н. Терещенко



SO₂

1983

22 Б1489. Явления квантовой интерференции в излучательной дезактивации состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ молекулы SO₂. Quantum interference phenomena in the radiative decay of the $\tilde{C}(^1B_2)$ state of SO₂. Ivanco Michael, Hager James, Sharfin Wayne, Wallace Stephen C. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6531—6540 (англ.)

Проведены детальные исследования квантовых биений (КБ) в затухании флуоресценции (Фл) из состояния $\tilde{C}(^1B_2)$ молекулы SO₂. Возбуждение Фл производили импульсным перестраиваемым лазером на красителе с удвоенной частоты в диапазоне от 235 до 217,1 нм. Молекулы SO₂ охлаждены в сверхзвуковом молек. потоке Н (содержание SO₂ 0,1%) до вращательной т-ры 1 или 3 К. Спектральная ширина лазерного излучения была $<0,2 \text{ см}^{-1}$ или же $<200 \text{ МГц}$, что позволило резко повысить глубину модуляции регистрируемых КБ и провести прямой колич. анализ величины взаимодей-

До, спектр

Х. 1983, 19, № 22

ствия между состояниями, ответственного за КБ. Показано, что КБ сначала наблюдаются только в антисимм. вал. кол. модах (ν_3) и в их комбинац. полосах с деформационной модой ν_2 . Коэф. связанного уровня увеличивается с ростом колебательной энергии и достигает среднего предельного значения $|C_2|^2 \sim 0,35$ при энергиях $> 2100 \text{ см}^{-1}$. Сделан вывод, что за возникновение КБ ответственна вибронная связь между основным состоянием $X(^1A_1)$ и состоянием $C(^1B_2)$, приводящая к возникновению связанных уровней, при последующем когерентном возбуждении к-рых и появляются КБ в затухании Фл. Этим молекула SO_2 отличается от более сложных молекул (диэтил, пиразин) с промежут. и высокой плотностью состояний, для к-рых механизм возникновения КБ состоит в спин-орбитальном взаимодействии с триплетной системой уровней. В случае SO_2 лишь основное состояние обладает плотностью колебательных уровней (~ 8 на 1 см^{-1}), достаточной для образования связанных уровней. Другие доказательства этого вывода таковы: наблюдаемый эффект Зеемана, соответствующий сдвигу $0,02 \text{ МГц/Гс}$, намного меньше известной из лит-ры величины $0,5 \text{ МГц/Гс}$ для $\bar{A}(^1A_2)$ -состояния SO_2 , к-рая приписана синглет-триплетному взаимодействию по механизму спин-орбитальной связи. Поскольку известно, что $\bar{A}$ -состояние обнаруживает как триплетный характер, так и связь с основным состоянием, наблюдение слабого изотропного магнитного эффекта для $\bar{C}$ -состояния согласуется с механизмом его непрямого взаимодействия с триплетными уровнями через основное состояние. Еще одно доказательство состоит в резком исчезновении КБ при возбуждении Фл светом $218,0 \text{ нм}$, когда начинается диссоциация с колебательных уровней (согласно термодинамич. расчетам энергия диссоциации SO_2 в основном состоянии соответствует $217,9 \pm 0,4 \text{ нм}$).

В. Е. Скурат

SO₂

1983

4 Б1240. Зондирование методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса молекул SO₂ и NO₂. Infrared-microwave double resonance probing of the SO₂ and NO₂ molecules. Khoobehi B., Roberts J. A. «Spectral Line Shapes. Vol. 2. Proc. 6th Int. Conf., Boulder, Colo, July 12—16, 1982». Berlin; New York, 1983, 569—582 (англ.)

На примере ИК-МВ двойного резонанса в молекулах SO₂ и NO₂ с использованием для накачки 10,6 мкм CO₂ лазера изучены механизмы нарушения равновесного распределения по вращательным состояниям в молекулах типа XY₂ в условиях мощной ИК-накачки. Измерения выполнены на установке с 5 м поглощающей ячейкой при зондировании вращательных переходов МВ-излучением в области частот 17—80 ГГц и мощностях ИК-накачки 5—200 Вт. Для одного из вращательных переходов (15_{4,12}—16_{3,13}) SO₂ в основном колебательном состоянии вблизи 38495,28 МГц при вклю-

спектр

⊗
(H)

X. 1985, 19, NY

чении непрерывной ИК-накачки наблюдалось изменение фазы сигнала двойного резонанса на 180° . Такое изменение фазы сигнала на 180° интерпретировано как переход молек. системы в условиях ИК-накачки от поглощения к излучению МВ-радиации. Измерены переходные характеристики нестационарных процессов и их зависимость от вращательного состояния и мощности ИК-накачки. В случае вращательного перехода ($40_{3,38} - 39_{3,27}$) NO_2 в основном колебательном состоянии вблизи $16023,65$ МГц показана сильная зависимость скорости изменения интенсивности перехода от используемой мощности ИК-накачки. При этом с ростом мощности накачки скорость изменения интенсивности возрастает. Характер изменения интенсивности для различных вращательных состояний претерпевает резкий скачок вблизи квантового числа $I=20$, как это показано на примере молекулы SO_2 . С. Н. Мурзин



SO₂

1983

3 Л160. Зондирование молекул SO₂ и NO₂ методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса. Infrared-microwave double resonance probing of the SO₂ and NO₂ molecules. Khoobehi B., Roberts J. A. «Spectral Line Shapes. Vol. 2. Proc. 6 Int. Conf., Boulder, Colo, July 12—16, 1982». Berlin; New York, 1983, 569—582 (англ.)

Приведены предварительные результаты экспериментов по импульсному двойному ИК—МВ-резонансу в молекулах SO₂ и NO₂ с использованием CO₂-лазера с мощностью 5—200 Вт в качестве источника накачки и клистронов в диапазоне 17—80 ГГц для зондирования вращательных переходов. Для SO₂ обнаружено >100 сигналов двойных резонансов. Показано, что в соответствии с больцмановским распределением заселенности вращательных уровней основного колебательного состояния знак изменения заселенности вращательных уровней при лазерной накачке изменяется при $J \approx 20$.

М. Р. Алиев

(41) 18

ср. 1985, 18, № 3

SO₂

1983

4 Л137. Поглощение атмосферных газов и загрязнений в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах. Millimeter and submillimeter wave absorption by atmospheric pollutants and constituents. Kolbe W. F., Leskovar B. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1983, 30, № 5, 463—478 (англ.)

Выполнен расчет частот и коэф. поглощения для сильных вращательных переходов молекул SO₂, H₂CO, O₃, H₂O, H₂S, OCS, CO, NO, OH, SO, NH₃ и CS при условиях, близких к атмосферным, в диапазоне 0—1400 ГГц. Результаты расчетов приведены в графич. форме. М. Р. Алиев

Францат-
спектр

(11) IX

ср. 1984, 18, № 4

SL2

OM. 18126

1983

7 Б1230. Полосы ν_1 $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ по данным инфракрасно-микроволнового двойного резонанса. The ν_1 bands of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ from infrared-microwave double resonance. Lindenmayer Josef, Jones Harold, Rudolph H. D. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 221—228 (англ.)

Методом двойного ИК-МВ-резонанса с использованием лазера на CO_2 и МВ-источников, дающих непрерывное изменение частоты в области 8—90 ГГц, измерены колебательно-вращательные спектры молекул $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ в области полос ν_1 . Приведено положение наблюдаемых линий и выполнено их отнесение к вращательным переходам в состояниях 000 и 100 и колебательно-вращательным переходам 000—100. Обработаны лит. данные по МВ-спектрам исследуемых молекул и рассчитаны молек. постоянные A , B , C , $\Delta_J \cdot 10^6$, $\Delta_{JK} \cdot 10^5$, $\Delta_K \cdot 10^3$, $\delta_J \cdot 10^6$, $\delta_K \cdot 10^5$ в основных колебательных состояниях (ГГц): $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ —57,3846, 9,17040, 7,88950, 4,7, —10,9, 2,315, 1,26, 1,97; $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ —55,5977, 9,17085, 7,85486, 5,14, —9,6, 2,147, 1,31, 1,96. С использованием

М.П.

X. 1984, 19, N 7

полученных значений рассчитаны указанные постоянные и для уровней 100 (ГГц): $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ —57,4471; 9,12744; 7,85237; 4,7, —10,4, 2,317, 1,28, 3,2, $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ —55,6419; 9,12854; 7,81867; 5,14; —9,6; 2,246; 1,31, 1,96. Частоты чисто колебательных переходов 100—000 составляют 1101, 1670 и 1093,453 см^{-1} . Вычисленные значения использованы для интерпретации лит. данных по поглощению излучения CO_2 -лазера молекулами S^{18}O_2 .

С. Б. Осин



SO₂

От. 18126 1983

5 Л216. Исследование полосы ν_1 молекул $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ методом инфракрасно-микроволнового двойного резонанса. The ν_1 bands of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ from infrared-microwave double resonance. Lindenmayer Josef, Jones Harold, Rudolph H. D. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 101, № 1, 221—228 (англ.)

Методом двойного ИК—МВ-резонанса с использованием CO₂-лазера для накачки исследована вращательная структура основного и первого возбужденного состояния колебания ν_1 молекул $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ с $n=32$ и 34. Идентифицированы линии всего 20 переходов. Исследованы также обычные микроволн. спектры поглощения этих молекул и путем совместного анализа полученных частот определены значения вращательных и центробежных постоянных основного и возбужденного состояний этих молекул. Проведена идентификация линий ИК-полос ^{18}O -содержащих молекул SO₂, ответственных за поглощение излучения CO₂-лазера, а также идентифицированы линии длинноволн. ИК-лазеров на SO₂ с оптич. накачкой от CO₂-лазера.

М. Р. Алиев

Vi, М.П.

ср. 1984, 18, №5.

SO₂

[Om. 18126]

1983

99: 148683q 'The ν_1 bands of sulfur dioxide ($^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$) from infrared-microwave double resonance. Lindenmayer, Josef; Jones, Harold; Rudolph, H. D. (Dep. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 101(1), 221-8 (Eng). Effective band consts. for the ν_1 bands of both $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ were detd. from IR-microwave double resonance spectroscopy. These results allow conclusions to be drawn over the processes involved in previously reported expts. with CO₂ lasers and ^{18}O samples of SO₂.

(21)

C.A. 1983, 99, N 18

SO₂

Om 18178

1983

5 Д130. Неэмпирические расчеты соединений серы методом молекулярных орбиталей. I. Выбор и построение базиса. Ab initio molecular orbital calculations on sulphur compounds. Part I. Choice and performance of basis set. Marsden Colin J., Smith Brian J. «J. Mol. Struct.», 1983, 105, № 3—4, Suppl: «Theochem», 14, № 3—4, 385—392 (англ.)

теор.
расчет

Расчеты предприняты для выяснения особенностей геометрии и влияния окружения на соединения серы, в частности, большой длины связи S—S. На модельных системах SO₂ и H₂SO₂ проведен выбор базиса. Такая процедура мотивирована необходимостью найти достаточно экономичный по затратам машинного времени и вместе с тем удовлетворительный по получаемой геометрии базис, т. к. ранее проводившиеся оптимизации базисов не учитывали градиентной схемы выбора оптимальной геометрии, включенной в используемую программу Гауссиан 80. Проведенные расчеты геометрии,

ⓧ(H)

ф. 1984, 18, №5

энергии, силовых постоянных, дипольных моментов для обеих молекул при 17 различных базисах позволили заключить, что упомянутому условию удовлетворяют базисы, включающие d -ф-ции для кислорода и серы, а именно $10s6p1d$, контрактированный до $[6s3p1d]$ для серы и $8s4p$, контрактированный до $[4s2p]$ для кислорода. В таком базисе сделан пробный расчет иона SO_2^- , который дал удовлетворительные результаты как для угла OSO , так и для силовых постоянных.

М. М. Местечкин

SO₂

Om. 17884

1983

6 Б1090. Колебательно-усредненная, температурно-зависимая структура многоатомных молекул. II. SO₂. The vibrationally averaged, temperature-dependent structure of polyatomic molecules. II. SO₂. Mawhorter R. J., Fink M. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 7, 3292—3295 (англ.)

Методом газовой электронографии определены термически-средние параметры молекулы SO₂ в т-рном интервале 298—979 К. Интенсивности рассеяния измерены счетчиками. Найденная т-рная зависимость термически усредненных межъядерных расстояний хорошо согласуется с теор. расчетами Кола и Хильдербрандта («J. Mol. Struct. Theochem.», 1981, 85, 25 и 325), однако измеренные амплитуды колебаний для всех пар атомов на 0,002 А больше теоретически предсказанных. В. Спиридонов

теметр.,
структура

Х. 1984, 19, № 6

SO₂

10m. 17884

1983

99: 164355q The vibrationally averaged, temperature-dependent structure of polyatomic molecules. II. Sulfur dioxide. Mawhorter, R. J.; Fink, M. (Phys. Dep., Univ. Texas, Austin, TX 78712 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 79(7), 3292-5 (Eng). The thermally-averaged, mol.-structure parameters of gaseous SO₂ were measured by electron diffraction. Due to the anharmonicity of the mol. potentials and the resulting coordinate interactions in the potential, the exptl. parameters were temp. dependent. The data showed this function. The exptl. results agreed with predictions of the theory of D. A. Kohl and R. L. Hilderbrandt (1981) for the change of the structure values with temp. As in the previous studies, the measured mean square amplitudes of all atom pairs were consistently about 0.002 Å larger than the theories predict.

М. гуагара.
уесны чмык
мгн

©.A.1983, 99, N20

SO_2

1983

Mayer I., Revesz M.

раствор Inorg. Chim. Acta,
1983, 77, N 6, 205-206.

● (ср. H_2S ; III)

SD₂

Om. 17403

1983

1 Д97. Изучение силового поля некоторых нелинейных молекул типа XY_2 . Force field study of some non-linear XY_2 -type molecules. Mohan S., Gunasekaran S., Ravikumar K. G. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1983, 21, № 2, 121—122 (англ.)

Введен в рассмотрение тензор

$$t_{\alpha\beta\gamma\delta} = -2I_{\alpha\alpha}^e I_{\beta\beta}^e I_{\gamma\gamma}^e I_{\delta\delta}^e \tau_{\alpha\beta\gamma\delta},$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta = x, y, z$; I^e — равновесные моменты инерции и τ — постоянные центробежного искажения. Значения t могут быть найдены по эксперим. значениям τ . Показано, что $t = \tilde{L}_0^{-1} \tilde{T}_s A \Lambda^{-1} \tilde{A} \tilde{L}_0^{-1} T_s$, где $T_s = G J_s$, G_s — матрица кинематич. коэф., J_s — матрица равновесных значений производных от моментов инерции по координате симметрии s ; Λ — матрица квадратов частот колебаний и A — матрица, зависящая от

сил. пост.

(42) ☒

сп. 1984, 18, №1

параметра a и фиксирующая матрицу форм колебаний $L = L_0 A$, где L_0 — исходное приближение для L . Параметр a подбирается так, чтобы вычисленные значения t были наиболее близки к эксперим. t . Если матрица A известна, то силовые постоянные в координатах симметрии вычисляются по ф-ле $F = \tilde{L}_0^{-1} A \Lambda \tilde{A} L_0^{-1}$. Приводятся численные значения a , τ и F для молекул SO_2 , ClO_2 и CF_2 .

М. А. Ковнер

SO₂

(Om. 17403)

1983

/ 99: 12971z Force field study of some nonlinear XY₂-type molecules. Mohan, S.; Gunasekaran, S.; Ravikumar, K. G. (Madras Inst. Technol., Anna Univ., Madras, 600 044 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1983, 21(2), 121-2 (Eng). The most probable force fields of the nonlinear XY₂-type mols. like SO₂, ClO₂, and CF₂ were fixed by a parametric method. The centrifugal distortion consts. were used as addnl. data to fix the potential consts. unambiguously.

Cell. NCCM.

(+2) $\boxtimes$

C.A. 1983, 89, N2

SD₂

Ommex 16564

1983

Orient O. Y., Srivasta-
va S. K.,

монексн-
нырок

J. Chem. Phys., 1983,
78, N 6, Pt 1, 2949-
2952.

SO₂

[Am. 17742]

1983

Phillips P., Davidson E.R.,

$\tilde{\nu}$,
racem

J. Comput. Chem., 1983,
4, N3, 337-344.

SDa

1983

4 Л138. Исследование вращательных спектров SO_2 с помощью ИК-лазеров с фиксированной частотой. Pure rotational spectroscopy of SO_2 using fix line far infrared lasers. Rinehart E. A., Hrubesh L. W., Stevens C. G. «8th Int. Conf. Infrared and Millimeter Waves, Miami Beach, Fla, 12—17 Dec., 1983. Conf. Dig». New York, N. Y., 1983, TH5.6/1—TH5.6/2 (англ.)

Измерены частоты 8 линий вращательного спектра газообразной SO_2 в ИК-поглощении в интервале частот $35\text{—}60\text{ см}^{-1}$. Для измерений использован длинноволн. CH_3OH -лазер с накачкой лазером CO_2 , генерирующий линии фиксированной частоты. По изменению коэф. поглощения при изменении давления газа определены параметры лоренцевского контура линии, в частности, ее отстройка от линии генерации. Уточненные частоты линий SO_2 заметно отличаются от рассчитанных по известным вращательным константам, что связано с неточностью констант центробежной деформации.

М. В. Т.

М. П.

ф. 1985, 18, № 4.

SL₂

DM. 20053

1983

Subramanian N., Srinivasa-
moorthy R., et al.,
pacrem
et al.

Indian. J. Pure and
Appl. Phys., 1983, N 12,
● 731-732

50₂

(Om. 18238)

1983

6 Л129. Вращательный спектр молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.
Spectre de rotation de la molécule $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Van Rie-
et R., Steenbeckeliers G. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1983, sér. 1, 97, № 3, 117—153 (фр.)

В диапазоне 8—60 ГГц исследован микроволн. спектр молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 80$ основного и возбужденного (010)-состояния, а также переходов с $J \leq 50$ состояний (020), (100) и (001). Определены значения вращательных постоянных и постоянных кватертичного и секстичного центробежного искажения. Вычислены равновесные значения структурных параметров: $\text{SO} = 1,4308 \text{ \AA}$, $\text{QSO} = 119''18'$.

М. Р. Алиев

М. Р., коллектр.
структура

фр. 1984, 18, № 6

SO_2

1983

1) 1 Л135. Вклад в исследование вращательного спектра молекулы $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Contribution à l'étude du spectre de rotation de la molécule $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Van Riet R., Steenbeckeliers G. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1983, 97, № 4, 243—258 (фр.)

Получены спектры микроволн. поглощения газообразной $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ в области 8—59,5 ГГц. Приведены таблицы частот наблюдаемых линий и их отнесение к вращательным переходам молекулы в основном состоянии и колебательных состояниях 010 и 020. По эксперим. частотам определены молекулярные постоянные 0-го, 1-го и 2-го порядков. Рассчитанные с этими постоянными частоты согласуются с измеренными в пределах $\sim 0,2$ МГц. Обсуждается отсутствие в спектре ряда рассчитанных линий.

М. В. Т.

ф. 1985, 18, №1

SO₂

1983

7 Д69. Колебания большой амплитуды в трехатомных молекулах. Ч. II. Введение улучшенного потенциала в модель ЛАВ, примененную к молекуле диоксида серы. Large-amplitude vibration in triatoms. II. Introduction of potential refinement within a LAV model applied to the sulfur dioxide molecule. Wallace R. «Chem. Phys.», 1983, 74, № 3, 339—345 (англ.)

Р. 1983, 18, № 7

SO₂

1983

(Vi)

, 98:134431y Large-amplitude vibration in triatoms. II. Introduction of potential refinement within a LAV model applied to the sulfur dioxide molecule. Wallace, R. (Chem. Dep., Univ. Manitoba, Winnipeg, MB Can. R3T 2N2). *Chem. Phys.* 1983, 74(3), 339-45 (Eng). The recent theor. approach of R. Wallace (1982) to LAV (large amplitude vibration) in triatoms was applied to SO₂ in a form which permits least-squares potential refinement. Close agreement of the model with 25 fundamentals, overtones, and combination bands was attained.

C. A. 1983, 98, N16.

SO₂

1983

9 Д698. Квантовые биения во флуоресценции SO₂ из состояния A^1A_2 в условиях охлаждения в струе в слабом магнитном поле. Quantum beats in the fluorescence of jet-cooled SO₂(A^1A_2) under a weak magnetic field. Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji, Koda Seiichiro. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 6, 906—908 (англ.)

спектр

При импульсном лазерном возбуждении в E -полосе при переходе $^1P_0(0)$ на один колебательно-вращательный уровень двуокиси серы в сверхзвуковой струе наблюдались биения интенсивности флуоресценции с частотой, задаваемой магн. полем. Результаты наблюдения за поляризацией излучения и частотой биений проанализированы на основе нестационарной теории пересечения уровней. Установлено, что выделенный

ор. 1983, 18, № 9

уровень верхнего электронного состояния 1A_2 обладает аномально высоким магн. моментом ($g_v=0,14$), что истолковано как проявление внутримолекулярных связей между близкими электронными состояниями. Е. А.

1983

6 Л434. Зависящие от вращения внутримолекулярные процессы $\text{SO}_2(\tilde{A}^1A_2)$ в сверхзвуковой струе. Rotation-dependent intramolecular processes of $\text{SO}_2(\tilde{A}^1A_2)$ in a supersonic jet. Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji, Koda Seiichiro. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1983, № 75: Intramol. Kinet. Gen. Discuss., Warwick, 18—20 Apr., 1983, 365—376. Discuss., 407—427 (англ.)

В области 300—320 нм получены спектры возбуждения $\text{SO}_2(\tilde{A}^1A_2)$ в сверхзвуковой струе Ar и исследованы временные зависимости затухания флуоресценции при импульсном лазерном возбуждении отдельных вращательных уровней. Для всех изученных уровней получены биэкспоненц. зависимости интенсивности флуоресценции от времени, причем время жизни короткоживущей компоненты составляет 3—5 мкс, долгоживущей — 15—30 мкс. Показано, что при наложении внешнего магн.

ф. 1984, 18, № 6

поля затухание некоторых уровней приобретает характер осцилляций, описываемых классической зеемановской теорией квантовых биений. Наблюдаемые явления объяснены взаимными возмущениями вращательных уровней состояния $\tilde{A}^1A_2$ и других электронных состояний SO_2 , возникающими вследствие эффекта Реннера—Теллера или спин-орбитального взаимодействия. Библ. 30.
Е. Н. Т.

SO₂

1983

10 Д440. Наблюдение перехода $3_{1,3}-2_{0,2}$ молекулы SO₂. Observations of the $3_{1,3}-2_{0,2}$ transition of SO₂. White Glenn J., Phillips J. P. «Mon. Notic. Roy. Astron. Soc.», 1983, 203, № 2, 661—666 (англ.)

На 11-метровом радиотелескопе обсерватории «Кит Пик» в ноябре 1981 г. обнаружено излучение на линии вращательного перехода $3_{1,3}-2_{0,2}$ молекулы SO₂ в направлении газовых туманностей W49, W51, Орион-А, Стрелец-132 и других 7 молекулярных облаков. В источниках W49 и W51 молекула SO₂ зарегистрирована впервые. Показано, что общее число молекул SO₂ в этих источниках составляет от $2 \cdot 10^{51}$ до 10^{53} , отношение конц-ии SO₂ к конц-ии H₂ составляет от 10^{-6} (в Орион-А) до $10^{-8}-10^{-9}$ (в остальных источниках).
М. Р. Алиев.

Спектр

ф. 1983, 18, N 10

SO₂

1984

Baldeocchi M. G., Carli B.,
et al.

Фурье-
прекмп

Int. J. Infrared Milli-
meter Waves 1984, 5(3),
381-401.

●
(cur. CO; III)

SO₂

1984

102: 122730h Submillimeter laser transitions in isotopic modifications of sulfur dioxide. Bugaev, V. A.; Shliteris, E. P. (Inst. Radlotekh. Elektron., Moscow, USSR). *Kvantovaya Elektron. (Moscow)* 1984, 11(10), 1984-91 (Russ). The observation is reported of 23 laser transitions at 134.2-1570.2 μm for isotopic modifications of SO₂ with ^{32,34,36}S and ^{16,18}O atoms and their partial assignment is presented.

(cncmp)

C. A. 1985, 102, N 14.

SD₂

[OM. 20785]

1984

Burden F.R., Quiney M.M.

Mol. Phys., 1984, 53,

N4, 917-927.

Vi, pacem

SO₂

DM. 18897 1984

9 Д126. Определение сродства к электрону по равновесным данным об электронном переносе в газовой фазе и сродство SO₂ к электрону. Electron affinities from electron transfer equilibria in the gas phase and the electron affinity of SO₂. Caldwell Gary, Ke-
barle P. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 577—579 (англ.)

Приводятся относительные значения сродства к электрону для CH₃NO₂, CS₂, SO₂, ряда производных бензола и некоторых других соединений, полученные методом ион-молекулярных равновесий в газовой фазе (реакции типа $A^- + B \rightleftharpoons A + B^-$) с использованием масс-спектрометра высокого давления ($p=5$ Тор). Результаты находятся в хорошем согласии с данными Мак Ивера (McIver R. T. et al. «Lecture Notes in Chem.», 1982, 164), полученными в экспериментах с $p=10^{-6}$ Тор. Абс. значение сродства к электрону для SO₂ равно 1,1 эВ (~2,2 эВ по Мак-Иверу). Обсуждаются возможные причины указанного расхождения.

Ae;

ср. 1984, 18, № 9

В. И. Барановский

SO₂

Am. 18897

1984

(Ae)

/ 100: 109393q Electron affinities from electron transfer equilibria in the gas phase and the electron affinity of sulfur dioxide. Caldwell, Gary; Kebarle, P. (Dep. Chem., Univ. Alberta, Edmonton, AB Can. T6G 2G2). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(1), 577-9 (Eng). Electron affinities (EA) were detd. by several compds. by using a pulsed electron high-pressure mass spectrometer (HPMS). Ion mol. equil. were first detd. by HPMS and free energies ΔG were then calcd. from the equil. consts. The EA was calcd. by using the relation $\Delta G^\circ \approx \Delta H_1^\circ \approx \Delta EA$. By using EA value of benzophenone as std. EA values of other compds. were colcd. The results are in agreement with the literature data; particular ref. is made to SO₂ data.

c. A. 1984, 100, N 14

SO₂

От. 19 599

1984

11 Л200. Субмиллиметровый спектр и спектроскопические постоянные основного состояния молекулы SO₂. The submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of SO₂ in the ground state. Carlotti M., Di Leonardo G., Fusina L., Carli B., Men-caraglia F. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 106, № 1, 235—244 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра с разрешением 0,004 см исследован спектр поглощения молекулы SO₂ в области 8—90 см⁻¹. Идентифицированы линии около 1500 вращательных переходов с $J \leq 63$, $K_a \leq 24$ в основном колебательном состоянии: около 500 из наблюдаемых линий не идентифицировано. Определены значения вращательных постоянных и постоянных кватичного и секстичного центробежных искажений.

М.П.

ср. 1984, 18, N 11

SO₂

Om. 19599

1984

23 Б1179. Сумбиллиметровоговолновой спектр и спектроскопические константы SO₂ в основном состоянии. The submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of SO₂ in the ground state. Carlotti M., Di Leonardo G., Fusina L., Carliand B., Men-
caraglia F. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 106, № 1, 235—244 (англ.)

С использованием фурье-спектрометра с разрешением: 0,004 см⁻¹ в области 8—90 см⁻¹ измерены спектры поглощения молекул SO₂ (длина погл. слоя 1,45 м, давл. 1—10 Торр). Приведены волновые числа ~1500 линий, обусловленных чисто вращательными переходами в основном состоянии SO₂, и их отнесение по *I*, *K_a* и *K_c*. Измеренные частоты линий с *K_a* до 24 и *I* до 63, а также имеющиеся в лит-ре данные МВ-спектров обработаны совместно с использованием *s*-приведенного Гамильтониана Уотсона в *J^r*-представлении и рассчитаны спектроскопич. постоянные ³²SO₂ в основном

М.П.

Х. 1984, 19, № 23

колебательном состоянии: $B_z = 60778,55730$ (572) МГц,
 $B_x = 10318,02225$ (104) МГц, $B_y = 8799,754114$ (917) МГц,
 $D_I = 6,42134$ (105) КГц, $D_{IK} = -115,8881$ (164) КГц,
 $D_K = 2589,5989$ (746) КГц, $d_1 = -1,699967$ (132) КГц,
 $d_2 = -0,0940644$ (634) КГц, $H_I = 0,009581$ (200) Гц,
 $H_{IK} = -0,32693$ (534) Гц, $H_{KI} = -18,0881$ (438) Гц,
 $H_K = 369,255$ (769) Гц, $h_1 = 3,9660$ (491) $\cdot 10^{-3}$ Гц, $h_2 =$
 $= 1,5861$ (321) $\cdot 10^{-3}$ Гц, $L_{KKI} = 3,7542$ (669) $\cdot 10^{-3}$ Гц,
 $L_K = -75,06$ (225) $\cdot 10^{-3}$ Гц, $P_K = 0,01453$ (194) $\cdot 10^{-3}$ Гц.
 Полученные константы воспроизводят наблюдаемый
 спектр в области 8—90 см⁻¹ с точностью, близкой к
 точности измерения линий ($2 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹). С. Б. Осин

SO₂

(Om. 19599)

1984

1/8 cm⁻¹mp

ll. n.

101: 62867a The submillimeter-wave spectrum and spectroscopic constants of sulfur dioxide in the ground state. Carlotti, M.; Di Lonardo, G.; Fusina, L.; Carli, B.; Mencaraglia, F. (Ist. Chim. Fis. Spettrosc., Univ. Bologna, 40136 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 106(1), 235-44 (Eng). The submillimeter-wave spectrum of SO₂ was recorded with 0.004 cm⁻¹ resoln. at 8-90 cm⁻¹. About 2000 lines were obsd., 1500 of which were assigned to the ground state rotational transitions of ³²SO₂. Mol. consts. up to the 10th order were derived, combining the data with the available microwave data in the literature. SO₂ rotational spectrum line positions up to 90 cm⁻¹ can be reproduced from these consts., within the exptl. accuracy (2×10^{-4} cm⁻¹).

C.A. 1984, 101, N8

SO₂

(Dm. 20318)

1984

Cyvin S. J., Cyvin B. N.

раствор Si, Spectrosc. Lett., 1984,
сер. II, 17, n 9, 541-550.

●
(сер. H₂O; III)

SO₂

DM. 20263

1984

I 101: 158090t Semiclassical vibrational eigenvalues of triatomic molecules: application of the FFT method to sulfur dioxide, water, hydrogen ion (H₃⁺) and carbon dioxide. Eaker, Charles W.; Schatz, George C. (Dep. Chem., Northwestern Univ., Evanston, IL 60201 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(5), 2394-9 (Eng). The described fast-Fourier-transform (FFT) method for detg. vibrational action variables was used to calc. vibrational energies for SO₂, H₂O, H₃⁺, and CO₂ (all for zero rotational angular momenta). The results for SO₂ and H₂O are essentially equiv. in accuracy to results from previous semiclassical applications. H₃⁺ and CO₂ have not been studied previously by semiclassical methods, in part because of the 1:1 and 2:1 resonances, resp., present in these molcs. The results of the present calcs. are in reasonable agreement with existing quantum eigenvalues calcd. for H₃⁺ and CO₂, with errors that are consistent with those obtained for H₂O and SO₂.

конечам. Неп
нел, падем

(+3) ☒



C. A. 1984, 101, N 18