

C93-2

M 1092

1965

CS_3^{2-} (Vi; Christine Mosen)

Fadini A., Müller A., Krebs B.
Z.Naturforsch., 1965, 20a, N9, 1241

Die Berechnung der Kräftekonstanten
des CS_3^{2-} Ions nach dem Quadrat-
summen- Minimum - Verfahren

J

F

PX., 1966, 215119

1965

CS₂-

3

Сил. конст.

4 Д219. Силловые постоянные тритиокарбоната. Krebs Bernt, Müller Achim. Kraftkonstanten des Trithiocarbonat-Ions. «Z. Naturforsch.», 1965, 20a, № 9, 1124—1127 (нем.)

Плоский ион CS₃²⁻ обладает симметрией D_{3L} . В его ИК-спектре измерены частоты колебаний 905, 520, 505, 320 см⁻¹, отнесенные к типам симметрии E' , A_1' , A_2'' , E' . Они использованы для вычисления 5 силовых постоянных естественных колебательных координат. Приводятся их численные значения, а также координаты симметрии, ф-лы для кинематич. коэф. и вековые ур-ния. По ф-ле Бэджера получено значение длины связи CS, равное 1,68 Å. По силовым постоянным вычислен порядок этой связи, для которого получены два возможных значения: 1,16 и 1,24. Этот порядок указывает на участие определенной структуры CS₃²⁻.
М. Ковнер

ф. 1966.

ЛН

CS_3^{2-}

1965

ик-спектр

7 Д256. Колебательные спектры CS_3^{2-} ионов. ИК-спектры $PbCS_3$ и Tl_2CS_3 . Krebs B., Müller A., Gattow G. Zum Schwingungsspektrum des CS_3^{2-} -Ions. IR-Spektren von $PbCS_3$ und Tl_2CS_3 ¹. «Z. Naturforsch.», 1965, 20b, № 11, 1017—1020 (нем.)

Получены ИК-спектры твердых $PbCS_3$ (I) и Tl_2CS_3 (II), а также $Ni(NH_3)_3CS_3$ (III) и $Zn(NH_3)_2CS_3$ (IV) в области $4000—250\text{ см}^{-1}$. Предложено отнесение частот собств. колебаний групп CS_3 в I и II. В соответствии с приближенным расчетом полосы в спектрах I, II, IV в области 520 см^{-1} отнесены к полностью симметричным колебаниям иона CS_3^{2-} . Б. Жад

ф. 1966. 72

1965

PbCS₃Tl₂CS₃(Y_i)

UK-chemtp

+1ms

C.A. 1966. 64. 8

10585 de

Chalcogenocarbonates. XV. The vibrational spectrum of the CS_3^{2-} ion. Infrared spectra of PbCS_3 and Tl_2CS_3 . B. Krebs, A. Mueller, and G. Gattow (Univ. Goettingen, Ger.). *Z. Naturforsch.*, b 20(11), 1017-20(1965)(Ger); cf. CA 64, 7458a. The frequency $\nu_1(A_1')$ of the sym. C-S bond vibration in CS_3^{2-} was calcd. to be $\sim 520 \text{ cm}^{-1}$. Exptl. ir spectra of PbCS_3 and Tl_2CS_3 show weak absorption bands at 510 and 520 cm^{-1} , which were assigned to $\nu_1(A_1')$. The coordinated, less sym. compds. $\text{Ni}(\text{NH}_3)_3\text{CS}_3$ and $\text{Zn}(\text{NH}_3)_3\text{CS}_3$ show similar bands at 508 and 519 cm^{-1} .

Hannah Feilchenfeld

X

CS₃²⁻
3

1965

4 Д220. Вычисление силовых постоянных иона CS₃²⁻ по методу наименьших квадратов. Fadini A Tois, Müller Achim, Krebs Bernt. Die Berechnung der Kraftkonstanten des CS₃²⁻-Ions nach dem Quadratsummen-Minimum-Verfahren. «Z. Naturforsch.», 1965, 20a, № 9, 1241 (нем.)

Колебания типа симметрии E' иона CS₃²⁻ описываются квадратным вековым ур-нием. Матрица силовых постоянных содержит 2 неизвестных, для определения которых имеются лишь две частоты колебаний. Приближенное решение выполняется с диагональными матрицами кинематич. коэф., силовых постоянных и форм колебаний. Затем из множества значений силовых постоянных выбираются наиболее близкие к найденным при приближенном решении. Определение трех силовых постоянных, относящихся к типу E', вместе с решением векового ур-ния для типа A₁' позволяет вычислить 5 силовых постоянных в естественных колебательных координатах.

М. Ковнер

11-2601M-0601

7.1966-4A

CS₃⁻

Copy 1/2

Cur. no. 1

Bop-M 1092-1V

1968

Calculation of the force constant of CS₃⁻ ions by the square sums-minimum method. A. Fadini, A. Mueller, and B. Krebs (Tech. Univ., Stuttgart, Ger.). Z. Naturforsch. 20a, 1241 (1965)(Ger). The method of calcn. avoids the estn. of the force consts., $f_{ra} - f_{ra'}$, (Pistorious, CA 53, 4841i). The present calcn. of the complete F -matrix starts with the irreducible representation E' of the assocd. G -matrix. The calcd. F -matrix and the secular equations lead to the following force consts. of the nonplanar vibrations: $f_r = 3.72$, $f_{rr} = 0.68$, $f_{ra} - f_{ra'} = 0.26$, and $f_a - f_{aa} = 0.39$ millidyne/A. F. Schossberger

C.A. 1966. 64.7

89351-8936a

1966

M 1496

CS_3^{2-} (MOM. nom., CMJ. nom.)

Krebs B., Müller A.

spectrochim. acta, 1966, 22, II 8, 1532-1535

Urey-Bradley-Kraftkonstanten und
andere Schwingungseigenschaften
des Trithiocarbonat -Ions

PX., 1967, 75135

J

CS₃²⁻

1966

9 Б108. Отношение частоты невырожденного деформационного колебания ν_2 к частоте полносимметричного валентного колебания ν_1 в тритиокарбонатах. Müller A., Krebs B. Die Lage der nichtebenen Deformationsschwingung ν_2 relativ zur Lage der totalsymmetrischen Valenzschwingung ν_1 in Trithiocarbonaten. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 8, 1535—1536 (нем.; рез. англ.)

Прослежено соотношение между частотами $\nu_1(A_1')$ и $\nu_2(E')$ иона CS₃²⁻ в спектрах 9 тритиокарбонатных солей. Показано, что соотношение ν_1/ν_2 может быть больше или меньше 1, что объясняется эффектами кристаллич. поля и влиянием координационной связи металл — сера.

В. Калинин

X. 1967. 9.

1966

4 Б94. Средние колебательные амплитуды тритиокарбонатных и триселенокарбонатных ионов. Naga-
rajan G., Müller A. Mittlere Schwingungsamplituden
des Trithiocarbonat- und Triselenocarbonations. «Z. Na-
turforsch.», 1966, 21b, № 5, 393—396 (нем.; рез. англ.)

Составлены вековые ур-ния, определяющие элементы матриц ϵ средних квадратичных амплитуд колебаний в координатах симметрии ионов CS_3^{2-} и CSe_3^{2-} . Численные значения элементов матриц ϵ получены для т-р 298 и 500° К. Получены ф-лы, связывающие элементы ϵ с величинами σ средних квадратичных амплитуд колебаний естественных колебательных координат и расстояний между несвязанными атомами. Для обоих ионов получены значения σ и средних амплитуд колебаний расстояний между атомами для тех же т-р. Эти амплитуды в ионах несколько больше, чем в нейтральных молекулах CS_2 и CSe_2 . Наибольшее значение имеет σ для неплоского деф. кол. Последовательности значений силовых постоянных K и F поля Юри-Брэдли и соотв-их амплитуд колебаний противоположны. М. Ковнер

CS_3^{2-}
 CSe_3^{2-}

(+ 1 экз)

х. 1967. 4

⊗

1966

CS₃²⁻
CSe₃²⁻paw
C. A. 1966. 65. 7
9925d

Average oscillation amplitude of trithiocarbonate and triselenocarbonate ions. G. Nagarajan and A. Mueller (Univ. of Maryland, College Park). *Z. Naturforsch.*, b 21(5), 393-6(1966) (Ger). Mean sq. amplitudes and mean amplitudes of vibration of CS₃²⁻ and CSe₃²⁻ at 298 and 500° were computed by the method which utilizes symmetry coordinates (Cyvin, CA 54, 5235d). The following values were obtained: (at 298°, at 500°): CS₃²⁻, C-S = 0.0461, 0.0520; S...S = 0.0653, 0.0775; CSe₃²⁻ = 0.0472, 0.0551; and Se...Se = 0.0663, 0.0815.

F. R. Zwanzig

C. A. 1966. 65. 7
9925d

CS₃²⁻

1966

5 Д105. Силовые постоянные Юри — Брэдли и другие колебательные характеристики иона тритиокарбоната. Krebs B., Müller A. Urey—Bradley-Kraftkonstanten und andere Schwingungseigenschaften des Trithiocarbonat-Ions. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 8, 1532—1535 (нем.; рез. англ.)

(м. п.

симпсий.)

Частоты колебаний 520, 905 и 320 см⁻¹ иона CS₃²⁻ отнесены к типам симметрии A₁' и E' (две последние). Для этих типов составлены вековые уравнения, из которых определены силовые постоянные системы Юри — Брэдли K, H и F. В расчете использовано соотношение F' = -0,1F. Найденные значения силовых постоянных близки к значениям соответствующих силовых постоянных модели орбитально-валентных сил. Вычислены значения постоянных Кориолиса: $\zeta_3 = 0,912$ и $\zeta_{23} = 0,488$. Они сравниваются с постоянными Кориолиса боргалогенидов. Средние амплитуды колебаний расстояний S...S и связи C—S равны 0,057 и 0,049 Å (при T = 298° K). М. Ковнер

ф. 1967. 52

CS₃²⁻

1966
Urey-Bradley force constants and other vibration properties of the trithiocarbonate ion. B. Krebs and A. Mueller (Univ. Goettingen, Ger.). *Spectrochim. Acta* 22(8), 1532-5(1966)(Ger); cf. CA 64, 5768g. The Urey-Bradley force consts. were calcd. for the CS₃²⁻ by the FG-method of Wilson (W., et al: *Molecular Vibrations*. New York: McGraw-Hill. 1955. 388 pp.) and compared to the force consts. found with the orbital valence force field model (OVFF). The 3 independent force consts. of the Urey-Bradley potential K , H , and F correspond in the main with K_1 valence force const., $K_\beta/3$ deformation force const., and 2 A repulsion const. of the OVFF and show good agreement. The force const. values calcd. by the Urey-Bradley potential are always lower ($K = 2.68$ millidynes/A.) than the values calcd. by the general valence force field ($f_r = 3.71$ millidynes/A.), for the former overvalues the repelling forces between the chem. non-bonded atoms opposite to those between chem. bonded atoms. The calcd. values of the coupling coeffs. and the vibration amplitudes of the CS₃²⁻ are very similar to the corresponding values of BCl₃.
H. Schindlbauer

C.A. 1966 65.10

14445 de

M 2335

1967

серов. ионов. (CO_3^{2-} , CS_3^{2-} , CSe_3^{2-})

Müller H., Fadini A.

Z. Phys. Chem. (BRD), 1967, 54, II 3-4, 129-136

Näherungsberechnung der Kraft-konstanten von CO_3^{2-} , CS_3^{2-} und CSe_3^{2-} auf einem Verfahren zur Bereichabschätzung von Wechselwirkungskraftkonstanten.

PJF., 1967, 10D152

J

Cs_3^{2-}

Müller A.,
Seidel H.
Rittner W.

1964

эмиссион.
спектр

Spectrochim. acta, A23,
v6, 1619.

Эмиссионные спектры
помощью и расщеплен
по ме-● поду ЛО ионов

прихлещен карбонатом.

(см. CO_3^{2-}) III

CS₂²⁻
3

сериозно
кисфур у.

Peacock C. J.

Müller A., Kebabcioglu R.

J. Mol. Struct., 2 (2), 163

(cu, SO₃) II

30809.614

Ph, Ch, TE
Ex-Ch/XHB-zCS₃²⁻

31603

9-1347

Müller A., Mohan N., Cristophlienk P.,
Tossidis I., Dräger M. Investigation of
the vibrational spectra of PS₄³⁻, CS₃²⁻,
CS₂Se²⁻, CSSe₂, CSe₃²⁻, BCl₂Br and BClBr₂.
"Spectrochim. acta", 1973, A29, N7, 1345-
1356 (англ.)

см. PS₄³⁻ 09.34 III

922 923 9 2 7.

ВИНИТИ

CS₂²⁻

1973

Дневник
наблюдений

Perkins Peter G.,

Nov. Jour. Chim., 1973,

18, No 9, 1501-1512.

(all. CS₂; III)

CS_3^{2-}

CSe_3^{2-}

ХЧ-7650

XIV-6139 1974

4 Д539. Определение кинематических коэффициентов и средние амплитуды колебаний систем CX_3^{2-} . Sanyal Nitish K., Dixit L., Parvez Ahmad, Pandey C. P. Evaluation of kinetic constants and vibrational mean amplitudes of CX_3^{2-} systems. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1974, 12, № 6, 437—439 (англ.)

Определены элементы матриц F и G и кинематич. коэф. плоских молекул XY_3 . По литературным данным о колебательных частотах в приближении обобщенного силового поля найдены численные значения элементов этих матриц для ионов CS_3^{2-} и CSe_3^{2-} . Вычислены среднеквадратич. амплитуды колебаний этих ионов для 298, и 500 и 0° К. Библ. 13.

М. В. Тонков

Ср. ампл.
колеб.

Кинемат.
коэф.

ф. 1975 НЧ



CS₃²⁻

*4-7650

XIV-6139

1974

CSe₃²⁻

Di; Cud. noc

112955u Evaluation of kinetic constants and vibrational mean amplitudes of CX₃²⁻ systems. Sanyal, Nitish K.; Dixit, L.; Ahmad, Parvez; Pandey, C. P. (Dep. Phys., Univ. Gorakhpur, Gorakhpur, India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1974, 12(6), 437-9 (Eng). Mol. vibrations in planar CS₃²⁻ and CSe₃²⁻ ionic systems were analyzed by using a general valence force field. The procedure proposed by P. Tairugnanasambandam and G. Srinivasan (1969) was used. The mean amplitude quantities are reported and characteristic mean amplitudes for C-S and C-Se bonds were examd. in various systems.

(+1) ☒

C.A. 1974. 81. N18

SCS₂ -

1978

Lin, M.J., et al.

J. Magn. Reson. 1978, 29(I),
151-7.

Структ.
парам;
кв. мех.
расшир

см. SO₂ - II

CS₃²⁻

ommuca 90871

1979.

Gothi A; et al.

cus. 1001

Bull. Soc. chim. Belg.

Sp. acid.
mellodum

1979, 88 (10), 781-86

superficial
pachyneura

Free field studies

(see. Alcl₃; III)

CS_2-S^+

В-9-ХІV-9502

1980

энергия
связи
(А.Р.)

12 Д203. Исследование хемионизации $\text{CS}_2^*(n) + \text{CS}_2 \rightarrow \text{CS}_3^+ + \text{CS} + e^-$ с помощью метода фотоионизации молекулярного пучка. A study of the chemiionization process $\text{CS}_2^*(n) + \text{CS}_2 \rightarrow \text{CS}_3^+ + \text{CS} + e^-$ using the molecular beam photoionization method. Gress M. E., Linn S. H., Ono Y., Prest H. F., Ng C. Y. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 7, 4242—4244 (англ.)

Кривая эффективности образования CS_3^+ в результате возбуждения димеров $(\text{CS}_2)_2$ излучением и последующей хемионизации $(\text{CS}_2)_2 + h\nu \rightarrow \text{CS}_2^*(V, n) \rightarrow \text{CS}_2 \rightarrow \text{CS}_3^+ + \text{CS} + e^-$ зафиксирована в диапазоне $13 < h\nu < 15$ эв. Димеры $(\text{CS}_2)_2$ получены в расширяющемся молекулярном пучке. Сопоставление максимумов кривой с аналогичной зависимостью для CS_2 позволило оценить сечения хемионизации ридберговских состояний серии V с квантовыми числами $4 \leq n \leq 8$. На основании полученных потенциалов появления энергии связи CS_2-S^+ оценивается в $1,72 \pm 0,04$ эв. Г: А.

ф. 1980 N 12

CS_3^+

they are
charged

93: 54165w A study of the chemiionization process [excited carbon disulfide(n) + carbon disulfide $\rightarrow$ carbon sulfide (CS_3^+) + carbon monosulfide + e^-] using the molecular beam photoionization method. Gress, M. E.; Linn, S. H.; Ono, Y.; Prest, H. F.; Ng, C. Y. (Dep. Chem., Iowa State Univ., Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 72(7), 4242-4 (Eng). A study of the chemiionization process $CS_2^*(n) + CS_2 \rightarrow CS_3^+ + CS + e^-$ (1) using a mol.-beam photoionization method showed that the appearance energy for the formation of CS_3^+ is 13.12 ± 0.02 eV. The binding energy between CS_2 and S^+ was estd. to be 1.72 ± 0.04 eV. A photoionization efficiency curve for CS_3^+ at 950-735 Å, and relative cross sections for reaction (1) as a function of the principal quantum no. (n) for Rydberg series V are also given.

1980

7056-11X-681

CRA 1980 93 N6

1980

CS₃⁺

1 Б895. Изучение хемионизационного процесса $CS_2^*(n) + CS_2 \rightarrow CS_3^+ + CS + e$ фотоионизационным молекулярно-пучковым методом. Gress M. E., Linn S. H., Ono Y., Prest H. F., Ng C. Y. A study of the chemi-ionization process $CS_2^*(n) + CS_2 \rightarrow CS_3^+ + CS + e$ using the molecular beam photoionization method. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 7, 4242—4244 (англ.)

хемиониз.

Исследована фотоионизация димеров CS_2 — CS_2 , образующихся при сверхзвуковом расширении молек. пучка CS_2 . Кривые эффективности образования ионов CS_3^+ получены в диапазоне длин волн 950—750 Å с оптич. разрешением 1,4 Å. Кривые образования CS_2^+ из CS_2 получены с такой же разрешающей способностью в диапазоне 850—750 Å. Отмечается, что все резонансы, наблюдаемые в спектре образования CH_3^+ смещены примерно на 5 Å по сравнению с соотв. резонансами в спектре CS_2^+ . Определены относительные сечения процесса хемионизации $CS_2^*(n) + CS_2 \rightarrow CS_3^+ + CS + e$ как функции главного квантового числа n для 5-й серии Ридберга. Для $n=4, 5, 6, 7$, и 8 они соотв. равны 1; 0,32; 0,24; 0,23 и 0,23. Определена энергия образования иона CS_3^+ ($13,12 \pm 0,02$) эВ, и энергия связи CS_2 — S^+ ($1,72 \pm 0,04$) эВ.

В. И. Захарын

X. 1981 n. 1

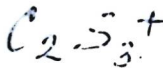
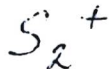
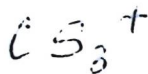
1342-XIV-9502

Отмиск 11471

1981

9 Д249. Исследование высокого ридберговского состояния и ион-молекулярных реакций сероуглерода с использованием метода фотоионизации молекулярного пучка. A study of the high Rydberg state and ion-molecule reactions of carbon disulfide using the molecular beam photoionization method. Ono Y., Linn S. H., Prest H. F., Gress M. E., Ng C. Y. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 2, 1125—1132 (англ.)

Исследовано влияние возбуждения внутренних степеней свободы на динамику и энергетику ион-молекулярных реакций сероуглерода: $CS_2^+ \dots CS_2 \rightarrow CS_3^+ + CS$, $S_2^+ + 2CS$, $C_2S_3^+ + S$ и $CS_4^+ + C$ на основе использования метода фотоионизации молекулярного пучка нейтральных ван-дер-ваальсовых димеров сероуглерода. С использованием относит. значений коэф. Франка—Кондона, определенных методом фотоэлектронной спектроскопии, из результатов анализа эффективностей фотоионизации для CS_3^+ , S_2^+ , $C_2S_3^+$ и CS_4^+ найдены относит. вероятности различных каналов указанной реакции



фотоионизация

(13) ☒ф. 1981 N 9 ☐ (13) CS_3^+ ; $C_2S_3^+$; CS_4^+

с CS_2^+ в электронных состояниях $\tilde{B}^2\Sigma_u^+$ и $\tilde{C}^2\Sigma_u^g$. По измеренным порогам образования CS_3^+ , C_2S_3^+ и CS_4^+ определены теплоты их образования, которые составили соответственно $291,7 \pm 1,7$; 318 ± 3 и 246 ± 6 ккал/моль. Путем сравнения высот пиков автоионизационных резонансов на кривых эффективностей фотоионизации для CS_3^+ , S_2^+ и C_2S_3^+ , нормированных на известные сечения поглощения соответствующих ридберговских состояний CS_2 , определены относит. вероятности процессов хемионизации $\text{CS}_2^*(V, n) \dots \text{CS}_2 \rightarrow \text{CS}_3^+ + \text{CS} + e$, $\text{C}_2\text{S}_3^+ + \text{S} + e$, $\text{S}_2^+ + 2\text{CS} + e$ и $(\text{CS}_2)_2^+ + e$ в зависимости от ридберговского уровня n . В частности, для случая $n=4$ и 5 определены относит. эффективности каналов реакции $\text{CS}_2^* + \text{CS}_2$. Результаты эксперимента показали, что предложенная методика фотоионизации в молекулярном пучке позволяет получать детальную информацию о механизмах реакций высоковозбужденных молекул.

А. И. Ш.

C₃S

1992

MacLagan R.G.A.R.,
Sudkeaw P.

u.n.

Chem. Phys. Lett. 1992.
194, N3.C. 147-157.

( cell. C₂S; III)