

OSCE

O, S | Cl

1974

Nishikida Koichi,
Williams Efranceon.

"J. Magn. Reson" 1974, 14,
N3, 348-357 (awad)

Examples

(cu O, S e Cl; III)



x. 1975 N2

OSCE

Ommuck 13149!

1981

Hunchliffe A.,

некорр.
структура

J. Mol. Struct., 1981, 86,
N 1-2, 189-192.

OSCl

[AT. 13149]

1981

neopen.
racem

' 96: 74922f Electronic structure and properties of OSCl and OSeCl. Hinchliffe, Alan (Chem. Dep., Univ. Manchester Inst. Sci. Technol., Manchester, UK M60 1QD). *THEOCHEM* 1981, 3(1-2), 189-92 (Eng). For the OSCl and OSeCl radicals, the mol. structures, total energies, orbital energies, Mulliken electron populations, dipole moments, quadrupole moments, elec. field gradients at the nuclei, isotropic hyperfine coupling consts., and spin densities were obtained in ab-initio SCF-MO calcs.

 OSeCl

C.A. 1982, 96, N10.



OSCl

[055. 13149]

1981

8 Б30. Электронное строение и свойства OSCl и OSeCl. Hinechcliffe Alan. Electronic structure and properties of OSCl and OSeCl. «J. Mol. Struct.», 1981, 86, № 1—2, («Theorchem», 1981, 3, № 1—2), 189—192 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базисе сгруппированных гауссовых функций проведены расчеты электронного строения и оптимизация равновесной геометрии молекул OSCl и OSeCl. Для молекулы OSCl межъядерное расстояние $R(O-S)=1,47$ А, $R(S-Cl)=2,08$ А, $OSCl=104^\circ$, а для молекулы OSeCl. $R(O-Se)=1,72$ А, $R(Se-Cl)=2,2$ А и $OSeCl=107^\circ$. Вычислены дипольные и квадрупольные моменты, а также градиенты электр. поля на ядрах О, S, Se и Cl. С использованием волновых функций неограниченного по спину метода Хартри-Фока найдены константы изотропного сверхтонкого взаимодействия на ядрах О, S, Se и Cl, к-рые полуколичественно согласуются с данными спектров ЭПР исследованных молекул.

И. А. Тополь

геометрия,
структура

(H) X

X. 1982,
19, и 8

SOCl

1982

22 Б907. Абсолютные поперечные сечения хемилюминесцентных и хемиионизационных реакций $Mg^*(^3P)$, $Ca^*(^3P) + SOCl_2$. Kowalski Andrzej. Absolute cross sections for the chemiluminescent and chemiionizing reactions $Mg^*(^3P), Ca^*(^3P) + SOCl_2$. «Z. Naturforsch.», 1982, A 37, № 4, 387—389 (англ.)

Методом молек. пучка исследованы хемилюминесцентный и ионизац. каналы при взаимодействии возбужденных атомов Mg и Ca с $SOCl_2$: $Mg(^3P) + SOCl_2 \rightarrow MgCl(A^2\Pi, B^2\Sigma, C^2\Pi) + SOCl$ (1a) $Mg(^3P) + SOCl_2 \rightarrow MgCl^+ + SOCl^-$ (1б); $Ca(^3P) + SOCl_2 \rightarrow CaCl(A^2\Pi, B^2\Sigma, C^2\Pi) + SOCl$ (2a) и $Ca(^3P) + SOCl_2 \rightarrow CaCl^+ + SOCl^-$ (2б). Методика получения пучка атомов с 20%-ным содержанием метастабильных состояний описан в работе (Heldt J., Kowalski A., «Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Math. Phys. Astrophys.», 1977, 25, 1293). Давл. $SOCl_2$ составляли $1 \cdot 10^{-4} - 3 \cdot 10^{-3}$ мм. Полное поперечное сечение $\sigma_{полн}$ для р-ции (1), измеренные по хемилюминесценции (Хл), составляют $58 \pm 12 \text{ \AA}^2$, в то

Acj

X. 1982, 19, 422

время как величина $\sigma_{\text{полн}}$, измеренная по расходуванню
 состояния 3P_1 составляет $58 \pm 9 \text{ \AA}^2$. Для р-ции (2)
 $\sigma_{\text{полн}}$ составляют 47 ± 6 и $43 \pm 6 \text{ \AA}^2$ соотв. Согласие ве-
 личин, полученных обоими методами подтверждает, что
 основная доля Хл связана с хим. р-цией $\text{Ca}^*(^3P)$.
 Абсолютные поперечные сечения Хл (в $\text{\AA}^2$) из различ-
 ных электронных состояний MgCl и CaCl составляет
 для $\text{MgCl}(A^2\Pi)$ 0,1, $\text{CaCl}(A^2\Pi)$ 0,86, для $\text{CaCl}(B^3\Sigma)$ 0,1
 и $\text{CaCl}(C^2\Pi)$ 0,1. Для процессов ионизации $\sigma_{16} = 0,86 \text{ \AA}^2$
 и $\sigma_{26} = 0,2 \text{ \AA}^2$. Полученные данные хорошо объяснены с
 точки зрения энергетики процессов, если принять верх-
 ний предел величины сродства к электрону для SOCl
 равным $80,2 \pm 8,8 \text{ ккал/моль}$. Заселенности электронных
~~уровней не совпадают с рассчитанными по статистич.~~
 теории, что уже отмечалось для р-ций возбужденных
 атомов Mg и Ca с SF_6 и нек-рыми галогенами. (Ko-
 walski A., Menzinger M., European Conference on At-
 omic Physics 1981, Book of Abstracts 5A, p938; Kowalski
 Menzinger M., «Chem. Phys. Lett.», 1981, 78, 461).
 Л. Ю. Русин

DM 7490

1983

1 Л193. Длинноволновые ИК-спектры лазерного магнитного резонанса радикалов ClSO и FSO в газовой фазе. Far infrared laser magnetic resonance spectra of the ClSO and FSO radicals in the gas phase. Radford Harrison E., Wayne F. David, Brown John M. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 99, № 1, 209—220 (англ.)

Получены спектры лазерного магн. резонанса радикалов ClSO и FSO, образованных в электрич. разряде. Спектры возбуждены лазером HCOOH с линиями в интервале 302—513 мкм. Для интерпретации спектров и отождествления линий радикалов рассмотрены различные реакции образования этих радикалов. Приведены значения резонансных магн. полей и интенсивности наблюдаемых линий. Подробно изучен спектр FSO на линии 513 мкм, в котором обнаружено антипересечение M-состояний уровней $15_{5,K_C}$ и $15_{4,K_C+2}$. Полученные данные согласуются с результатами исследования микроволн. спектров. Обсуждаются возможности наблюдения антипересечений уровней в спектрах лазерного магн. резонанса. Библ. 22.

М. В. Т.

(41) 18

фр. 1984, 18, N1

ClSO

M. N.

ClSO

От 17190

1983

22 Б215. Спектры лазерного магнитного резонанса в далекой ИК-области радикалов ClSO и FSO в газовой фазе. Far infrared laser magnetic resonance spectra of the ClSO and FSO radicals in the gas phase. Radford Harrison E., Wayne F. David, Brown John M. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 99, № 1, 209—220 (англ.)

спектр;

Методом лазерного (HCOOH-лазер, 302—513 мкм) магнитного резонанса исследованы радикалы ClSO и FSO. Описание ЛМР-спектрометра дано авторами ранее («Mol. Phys.», 1976, 32, 1407). Радикалы ClSO образовывались: при добавлении SCl_2 к O_2 предварительно пропущенному через МВ-разряд; взаимодействии SCl_2 с атомарным кислородом получающимся по схеме $\text{N} + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$; при добавлении Cl_2 к продуктам разряда в O_2 и CS_2 или SO_2 , а также добавлении SOCl_2 к продуктам разряда в O_2 . Радикалы FSO образовывались при добавлении CS_2 к продуктам разряда в атмосфере смеси CF_4 и O_2 . Идентифицированы враща-



X. 1983, 19, № 22

тельные переходы, наблюдаемые в спектрах FSO. Спектры, приписываемые на основании предполагаемых хим. р-ций молекуле ClSO оказались очень сложны и не были отнесены к каким-либо определенным переходам. В случае FSO наиболее детально исследован спектр при 513 мкм, связанный с антипересечением уровней $14_{5,K_C}$ и $15_{4,K_C+2}$. Проведено сопоставление измеренных и рассчитанных положений и интенсивностей ряда линий в спектре.

В. М. Ковба

ы .
(кон
.

ClSO

On 20/9/83 1984

Kawasaki Masahiro,
Kasatani Kazuo, et al.

Chem. Phys., 1984,
91, N2, 285-291.

($\bullet$ Cl₂SO; III)

3062

1992

118: 48202z Nuclear quadrupole coupling in the rotational spectrum of thionyl chloride. Merke, Ilona; Dreizler, Helmut (Inst. Phys. Chem., Univ. Kiel, 2300 Kiel, 1 Germany). *Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1992, 47(11), 1150-2 (Eng). The authors report on the anal. of the Cl quadrupole hyperfine structure of thionyl chloride, $\text{SO}^{35}\text{Cl}^{37}$, obsd. with a mol. beam microwave Fourier transform spectrometer.

(спектр)
стерхтонков
расщепление

C.A. 1993, 118, N6

ClSO⁺ [Om. 38452]

1996

Pavel M. Mayer, Tomas
Baer,

A&H; Chem. Phys. Lett.,
1996, 261, 155-159

ClSO
ClSO₂

(Dm. 39178)

1997

Zhuangjie Li,

некомп-
комп-ра,
ab initio
расчет

J. Phys. Chem. 1997, A101,
9545-50