

SOF

11-762

SO_2F^+ (A.P.)

1958

SO_2^+

SOF^+

SO^+ , SO^-

SO_2 (I, D)

S^+

(A.P.)

SO_2F_2 (Δ H)

O^+

F_2 (A)

O_2^+ , O^-

Reese R.M., Dibeler V.H., Franklin J.L.

J.Chem.Phys., 1958, 29, N 4, 880-883 (англ.)

Изучение двуокиси серы и сульфорила-
рида методом электронного удара.

РЖХ, 1959, № 18,

63424.

и, 10

✓ 9

FCS
FSO

1980

Hinchliffe A, et al.

J. Mol. Struct. 1980, 66,
235-42.

ко. экз.
расст

см. HD3 - III

Ommuck 10544

1980

FSO

Кл. мех.
присоедин.
ссылкам, Di,
ссыл. не см.

95: 86730j Ab initio studies on the electronic structure of the FSO radical. Sakai, Shogo; Morokuma, Keiji (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *Chem. Phys.* 1980, 52(1-2), 33-8 (Eng). The geometries of the FSO radical in the ground ($^2A''$) and first excited ($^2A', n \rightarrow \pi^*$) state were calcd. with the ab initio UHF SCF gradient method. The geometry in the first excited state is predicted to be $r_{SO} = 1.693 \text{ \AA}$, $r_{SF} = 1.609 \text{ \AA}$, and $\angle FSO = 95.5^\circ$. The force consts., vibrational frequencies and dipole moments were calcd. The predicted $^2A' \leftarrow ^2A''$ transition energy, calcd. at the optimized geometries with an UHF-NO-CI method, is 3.9 eV for the vertical excitation, 0.9 eV for the vertical emission and 2.6 eV for the electronic term value. The oscillator strength is also calcd. A brief discussion is given on the role of bound functions on the calcd. geometry.

C.A. 1981, 95, N10

FSO

Омтиск 10544 1980

4 Д61. Неэмпирическое исследование электронного строения радикала FSO. Ab initio studies on the electronic structure of the FSO radical. Sakai Shogo, Morokuma Keiji. «Chem. Phys.», 1980, 52, № 1—2, 33—38 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в рамках неограниченного метода Хартри—Фока в базисе ОСТ-4-31ГФ, дополнительно включавшем связевые s - и p -ф-ции, с оптимизацией геометрии исследовано электронное строение радикала FSO в основном (${}^2A'$, π -радикал) и $n \rightarrow \pi^*$ -возбужденном (${}^2A'$, σ -радикал) состояниях. Длины связей SO и SF и угол для основного состояния найдены равными (в скобках эксперим. значения) 1,443 (1,452) и 1,560 (1,602) Å и 107,9° (108,3), аналогичные значения для возбужденного состояния оценены в 1,693 и 1,609 Å, 95,5° соответственно. Дипольный момент найден равным 2,3 ед. Дебая

м. н;
геометрия

Ф. 1981 № 4

(1,662) для основного состояния, для возбужденного состояния получено 1,4 ед. Дебая. Также оценены частоты и силовые постоянные валентных и деформационных колебаний, удовлетворительно согласующиеся с эксперим. значениями для основного состояния. С учетом конфигурац. взаимодействия оценены энергии перехода ${}^2A' \leftarrow {}^2A''$, найденные равными 3,9 эв для вертикального возбуждения, 0,9 эв для вертикальной эмиссии и 2,6 эв для величины электронного терма. Подчеркнуто, что удовлетворительную равновесную геометрию удастся получить только при включении в базис связевых функций.

В. Л. Лебедев

FSO

Виттиса 10544

1980

7 Б25. Неэмпирические исследования электронного строения радикала FSO. Sakai Shogo, Morokuma Keiji. Ab initio studies on the electronic structure of the FSO radical. «Chem. Phys.», 1980, 52, № 1—2, 33—38 (англ.)

Неограниченным методом ССП МО ЛКАО с использованием градиентного метода проведена оптимизация равновесных геометрич. параметров радикала FSO в основном ($^2A''$) и первом возбужденном ($^2A'$, $n \rightarrow \pi^*$) состояниях. В расчетах использовался базис гауссовых функций 4-31 ГФ с добавлением s- и p-ГФ, локализованных на связях. Исследовано влияние учета связевых ГФ на результаты расчета геометрич. параметров FSO, в частности, показана важность оптимизации места локализации базисных ГФ на связях. Равновесные геометрич. параметры для обоих состояний FSO составили: $^2A''$ — $R(SO)=1,44$ А, $R(SF)=1,56$ А, $\angle FSO=107,9^\circ$; $^2A'$ — $R(SO)=1,68$ А, $R(SF)=1,56$ А, $\angle FSO=95,1^\circ$. Помимо геометрич. параметров для состояний

Мол. зам.

М.Н.

X. 1981 N 7

$^2A''$ и $^2A'$ вычислены силовые постоянные, частоты колебаний и дипольные моменты. При равновесных геометриях обоих состояний методом КВ (с последующей экстраполяцией к полному КВ) вычислена энергия вертикальных переходов $^2A' \leftarrow ^2A''$, 3,9 эВ, и $^2A' \rightarrow ^2A''$, 0,9, а также адиабатич. перехода, 2,6 эВ. При равновесных геометрич. параметрах состояний $^2A''$ и $^2A'$ радикала FSO рассчитаны силы осцилляторов перехода $^2A' \leftarrow ^2A''$, составившие $0,55 \cdot 10^{-4}$ и $0,44 \cdot 10^{-4}$, соотв.

И. А. Тополь

FSO

Оттиски 11412

1981

8 Д486. Микроволновый спектр, спин-вращательное взаимодействие, постоянные сверхтонкого взаимодействия, дипольный момент, молекулярная структура и силовые постоянные радикала FSO. Microwave spectrum, spin-rotation, and hyperfine interaction constants, dipole moment, molecular structure, and harmonic force constants of the FSO radical. Endo Yasuki, Saito Shuji, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 3, 1568—1579 (англ.)

м. в.

спектр

Ф. 1981/18

[Оттиск 11412]

1981

FSO

17 Б313. Микроволновый спектр, постоянные спин-вращательного и сверхтонкого взаимодействий, дипольный момент, молекулярная структура и постоянные гармонического силового поля радикала FSO. Endo Y., Saito S., Hirota E. Microwave spectrum, spin-rotation, and hyperfine interaction constants; dipole moment, molecular structure, and harmonic force constants of the FSO radical. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 3, 1568—1579 (англ.)

М.И.

Измерены в области частот 30—80 ГГц МВ-спектры двух изотопич. образцов нестабильного радикала, $F^{32}SO$ (I) и $F^{34}SO$ (II), в основном колебательном состоянии и I в первом возбужденном колебательном состоянии деф. моды. Радикал FSO получен в результате р-ции между карбонилсульфидом и продуктами МВ-разряда в смеси O_2/CF_4 . Анализ спектров выполнен в приближении асимметричного волчка с учетом кватерного центробежного искажения, спин-вращательного взаимодействия и магнитного сверхтонкого взаимодействия. Сделан вывод о том, что I является π -радикалом с основным электронным состоянием $^2A''$ по ана-

X. 1981/12

логии с соединениями HO_2 и HSO . Вращательные постоянные в основном состоянии I и II, соответственно, равны (в МГц): $A=38698,179(19)$ и $37536,604(63)$, $B=9340,810(4)$ и $9334,694(7)$, $C=7505,064(5)$ и $7456,138(6)$. По эффекту Штарка для 5 МВ-переходов определены компоненты дипольного момента I $\mu_a=0,374(12)D$, $\mu_b=1,624(9)D$ и полный дипольный момент $\mu=1,666(13)D$. Из данных для I и II вычислены параметры r_0 -структуры молекулы $r(\text{S—F})=1,603(3) \text{ \AA}$, $r(\text{S—O})=1,452(3) \text{ \AA}$, $\angle \text{FSO}=108,32(6)^\circ$. Вычисленные структурные параметры согласуются с соотв-щими величинами для родственных молекул. На основе полученных значений постоянных центробежного искажения вычислены коэф. гармонич. силового поля молекулы.

С. Н. Мурзин

VII/VLCK 11421 7981

4. 6. 2007

Действительные

C.A. 1981. 24 N 1

94: 129672r Microwave spectrum, spin-rotation, and hyperfine interaction constants, dipole moment, molecular structure, and harmonic force constants of the FSO radical. Endo, Yasuki; Saito, Shuji; Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(3), 1568-79 (Eng). The FSO radical was identified by its microwave spectrum, in the reaction of COS with microwave discharge products of an O₂-CF₄ mixt. Spectra of the normal and ³⁴S species in the ground vibrational state and of the normal species in the 1st excited bending state were obsd. in the frequency region from 30 to 80 GHz. The rotational consts., centrifugal distortion consts., spin-rotation coupling consts. including their centrifugal distortion terms, and magnetic hyperfine coupling consts. of the F atom were detd. from analyses of the obsd. spectra. The off-diagonal components of the spin-rotation and hyperfine coupling $c_{ab} + c_{ba}$ T_{ab} were obtained with good accuracy. These mol. consts. lead to the conclusion that FSO is a π radical and its electronic ground state is ²A". The following structure parameters were calcd. from the rotational consts. of the normal and ³⁴S species: $r(S-F) = 1.602(3)$ Å, $r(S-O) = 1.452(3)$ Å, and $\angle FSO = 108.32(6)^\circ$. The dipole moment was detd. from Stark effect measurements as $\mu_a = 0.374(12)$ D, $\mu_c = 1.621(9)$ D, and $\mu_{total} = 1.666(13)$ D. The harmonic force field and 2 vibrational frequencies were estd. from the obsd. centrifugal distortion consts. and inertia defect.

FSO

[Ummuck 17190]

1983

Далекый
ИК лазерн.
плазменный
резонансн.
спектр
в газовой
среде.

Radford H.E.,
Wayne F.D., et al.,

J. Mol. Spectrosc., 1983,
99, N1, 209-220.



FSO
SOF

[out. 24/95]

1986

расчет

Енз. и
барьер
изомер.

Чарклен О. П.,
Зюбенко Т. С.

Координат. химия,
1986, 12, N 8, 1011-1037.



FSO

[30353]

1988

Краснов К.С.,
Филетенко М.В.,

ОНИИТЭХИМ.

М.П.
(обзор)

Деп. №378-ХП-86,
Черкассы, 1988.



FOS

1990

Зюбина Т.С.

ж. неорган. химии.

1990. 35, №6, с. 1393-
1396.

(см. ● FBeB; III)

FOS

1990

Зюбина Г. С.

Л. П.

ЖС. Морзав. Желтисы.

1990. 35, № 6. С. 1588-
1592.

(см. ● FNO; III)

SOF⁺

1994

Stricklett K.L.,

Kassoff J.M., et al.

Gaseous Dielectr. VII,

(A.P.) [Proc. Int. Symp.] 7th
1994, 257-64.

(en. SF₅⁺; II)

SFO

[Om. 38754]

1996

Luis A. Muñoz, Brad R.
Weiner et al.,

u.n.
 ΔH

J. Mol. Struct. (Theo-
chem) 1996, 388, 1-6.

F80

[Om. 39178]

1997

F80₂

trump. comp-pa

Zhuanaile Li,

ab initio
pacem

J. Phys. Chem. 1997, A101,
9545-9550.