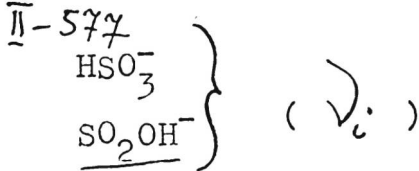


HSO_3^-



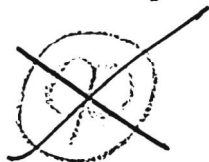
1956

Simon A., Kriegsmann H.

Chem. Ber., 1956, 89, N 10, 2442-2446
(нем.)

Об ионном равновесии в водных раство-
рах кислых сульфитов.

РЖХим., 1958, № 9, 27622



HSO_3^-

Müller A.,

1986

Nagarajan G.

0:

Z. anorgan. und allgem.

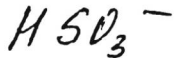
Chem., 349, n 1-2, 87-91.

Сред. посм.

Средние полевые элементы
ассимилируют в. разномыш

поком и соединен
шина ZrY_3 с стилией-
реей Cr_3 .



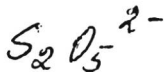


1049

91: 148712h Raman spectra of isotopic bisulfite and disulfite ions in alkali salts and aqueous solution. Meyer, B.; Peter, L.; Shaskey-Rosenlund, C. (Chem. Dep., Univ. Washington, Seattle, WA USA). *Spectrochim. Acta, Part A* 1979, 35A(4), 345-54 (Eng). The Raman spectra of solid $\text{M}_2\text{S}_2\text{O}_5$ ($\text{M} = \text{Li, Na, K, Rb, Cs, NH}_4$), RbHSO_3 , and CsHSO_3 were compared with the spectrum of 1.2M $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_5$ in aq. soln. All the fundamentals of HSO_3^- and most of those of $\text{S}_2\text{O}_5^{2-}$ were obsd., and correlated with previous data. Assignments in the low frequency region were tentative.

(2)

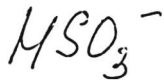
⊕1



(2)



C.A. 1049, 91N18

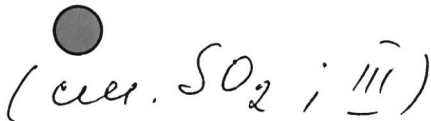


1981

Baird N.C., et al.

J. Comput. Chem. 1981,
2 (3), 225-230.

кв. и их.
расчёт,
стабильн.
и структура.



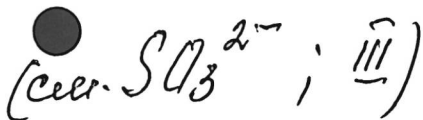
1983



Stroemberg, Ann, Groper
Odd, et al.

теорет.
практич.
эксперимент.
наблюдения.

Inorg. chem. 1983, 22(7),
1129-33.



SO_3H^-

[OM. 22 242]

1984

Chopra F. R., Pandey A. N.,

curr. noem;
pacrem.

Indian J. Phys., 1984,
B58, N4-5, 376-383.

SO_2OH^- (om. 22 490)

1985

Strömberg A., Wahlgren
U., et al.

мзоо.
паэрім.
сэпрыкм.

Chem. Phys., 1985, 100,
N2, 229-235.

HSO_3^- (om. 22490) 1985

Strömberg A., Wahlgren U.,
et al.

түер.

раерім.

енпуком.

Chem. Phys., 1985, 100,

N2, 229-235.

HSO_3^-

(M. 25729)

1986

SO_2OH^-

Strömberg A.,

Strömberg D.,

Wahlgren U., et al

реакт.,

эксперим.,

теорет.

расчет.

Acta chem. scand.,

1986, A 40, N 9,

601-606.

HOSO_2^+

1988

1 24 Б1159. Экспериментальное обнаружение газообразного радикала $\text{HSO}_3\cdot$, важнейшего интермедиата при атмосферном окислении SO_2 . Experimental evidence for the gaseous $\text{HSO}_3\cdot$ radical the key intermediate in the oxidation of SO_2 in the atmosphere. Egsgaard H., Carlsen L., Florencio H., Drewello T., Schwarz H. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 148, № 6, 537—540 (англ.)

М.П. Путем ионизации $\text{CH}_3\text{SO}_2(\text{OH})^+\cdot$ получены ионы HOSO_2^+ , охарактеризованные методом МС нейтрализации-реионизации (НР) и спектроскопии активирующих столкновений (АС). В условиях АС наиболее интенсивные пики дочерних ионов отвечают потере О или OD из DOSO_2^+ . Отщепление этих фрагментов происходит и из $\text{DOSO}_2\cdot$. В спектре НР присутствуют также пики ионов HOSO_2^+ (DOSO_2^+), что свидетельствует о достаточно большом времени жизни ($\geq 0,7$ мкс) соотв. радикалов. Д. В. Загоревский

X. 1988, № 24

HOSO_2
 HOSO_4

1988

15 Б1081. Исследование радикалов HOSO_2 и HOSO_4 с помощью неэмпирических расчетов и методом матричной изоляции. HOSO_2 and HOSO_4 radicals studied by ab initio calculation and matrix isolation technique. Nagase S., Hashimoto S., Akimoto H. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 3, 641—644 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в базисе 3—21 ГФ* определены равновесные геометрии сульфо- и сульфоксирадикалов HOSO_2 и HOSO_4 . Рассчитаны колебат. частоты и изотопные сдвиги. С учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка в базисе 6—31 ГФ** рассчитана энергетика р-ций $\text{HOSO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{SO}_3$ и $\text{HOSO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HOSO}_4$. На основании расчетов проведено отнесение ИК-спектров, полученных в аргонной матрице. Показано, что радикал HOSO_4 отвечает минимуму Пв потенциальной энергии, хотя он не был обнаружен в матрице O_2 . Отмечено, что рассчитанная энтальпия первой из изученных р-ций на 10 ккал/моль превышает эксперим. величину. Обсуждены причины этого расхождения.

Н. В. Харчевникова

М.А.

Х. 1988, 19, N 15

HOSO_2
 HOSO_4

М.П.

1988

7 Д136. Исследование радикалов HOSO_2 и HOSO_4 при помощи неэмпирических расчетов и техники изоляции в матрице. HOSO_2 and HOSO_4 radicals studied by ab initio calculation and matrix isolation technique. Nagase Shigeru, Hashimoto Satoshi, Akimoto Hajime. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 3, 641—644 (англ.)

Строение радикалов HOSO_2 и HOSO_4 изучено неэмпирич. квантовохимич. методами. Равновесные геометрич. параметры и частоты колебаний определены в рамках спин-неограниченного приближения ССП с использованием стандартного базиса Попла 3—21ГФ*. Значения энергии уточнены путем расширения базиса до 6—31ГФ** и учета корреляц. поправок в 4-м порядке теории возмущений Меллера — Плессета. Найдены параметры распределений зарядовой и спиновой плотности. Вычислены изменения термодинамич. ф-ций в ходе реакций $\text{HOSO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{SO}_3$ и $\text{HOSO}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HOSO}_4$. Записан ИК-спектр HOSO_2 и HOSO_4 в аргонной матрице при температуре 11 К и проведено его отнесение.

А. В. Зайцевский

Ф. 1988, 18, N 7

HOSO₂
HOSO₄

1988

uk b nam-
nise, neop
paciem

108: 84269d Bisulfite and peroxybisulfate radicals studied by ab initio calculation and matrix isolation technique. Nagase, Shigeru; Hashimoto, Satoshi; Akimoto, Hajime (Fac. Educ., Yokohama Natl. Univ., Yokohama, Japan 240). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(3), 641-4 (Eng). HOSO₂ and HOSO₄ radicals were characterized by use of ab initio calcns. at the HF/3-21G^(*) level, and the results were compared with the IR spectral data from low temp. matrix expts. The calcd. vibrational frequencies and the isotope shift as well as a supplemental exptl. result supported the assignment of the obsd. IR absorption bands in the Ar matrix at 3539.9 (3528.6), 1309.2 (1308.7), 1097.3 (1096.0), and 759.5 (735.1) cm⁻¹ to the O-H st, S(:O)₂ asym st, S(:O)₂ sym st, and S-OH st modes of the H¹⁶OS¹⁶O₂ (H¹⁸OS¹⁶O₂) radical, resp. The HOSO₄ radical was located as a min. on the potential surface, and the fully optimized geometry and vibrational frequencies were obtained, although the detection of the radical in the O₂ matrix was unsuccessful. Enthalpy changes for the reactions HOSO₂ + O₂ → HO₂ + SO₃ and HOSO₂ + O₂ → HOSO₄ were calcd. at the MP4(SDTQ)/6-31G^{**}//3-21G^(*) and MP3/6-31G^{**}//3-21G^(*) levels, resp., and the results were discussed in comparison with the exptl. evidence.

C.A. 1988, 108, N 10.

H_2O_3^-

(OM: 35274)

1990

Movay J.K., Hepler L.G.,

J. Chem. Soc. Faraday

Trans. 1990, 86, N16,

2831-2839.

(Gaq)

HOSO_2^-

1992

Squires R.R.,

Int. J. Mass Spectrom. Ion

Processes 1992; 117, 565-600

(Δ_5 H₂₉₈)

($\text{cal. } \text{HOCO}_2^-$;
I)

HSO_3^-

1994

HOSO_2^-

и.п.

Х. 1994, № 19.

19 Б1046. Структуры и относительная устойчивость изомеров иона бисульфита. Structures and relative stabilities of bisulfite ion isomers /Noblet James A., Schugart Kimberly A. //J. Mol. Struct. Theochem. —1994 .—304 № 1 .—С. 1—11 .—Англ.

Неэмпирическими методами исследован ион $\text{HSO}_3^-(\text{C}_{3v})$ и его таутомерные (син- и анти-) формы $\text{HOSO}_2^-(\text{C})$. Оптимизированные геометрии и полные энергии определены с использованием различных базисных наборов и на различных уровнях расчета (ХФ, МП2). Для корректного описания относит. устойчивости изомеров необходимы расчеты с включением диффузных ф-ций и/или использования более высокого приближения МП4 с учетом возбуждений от одно- до четырехкратных. Рассчитаны частоты нормальных колебаний всех изомеров. Показано, что самой низкоэнергетич. структурой является асимметричная форма син-конформации.

Н. С.

1995

F: HSO₃-

P: 3

4Б149. эмпирическое исследование термодимических свойств бисульфитного и сульфатного ионов и родственных соединений. At initio studies of the thermochemistry of the bisulfite and the sulfonate ions and related compounds / Brown Richard E., Barber Frank // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 20. - С. 8071-8075. - Англ.

В рамках теории Гауссиан-2, а также на уровне МП2 исследовано электронное строение бисульфитного HOSO[2]{-} (I) и таутомерного сульфатного HSO[3]{-} (II) ионов и ряда родственных систем. Показано что II стабильнее, чем I в газ. и водной фазах (примерно на 4-5 ккал/моль). При плохом наборе поляризац. ф-ций атомов S получаются противоречивые результаты. Газофазные теплоты образования I и II найдены равными -165 (эксперим. значение -165,6'±-2,5) и -169 ккал/мол. Библ. 22.

Р.М.Х. №4, 1996.

1995

F: HOSO₂-

P: 3

4Б149. эмпирическое исследование термохимических свойств бисульфитного и сульфонатного ионов и родственных соединений. Ab initio studies of the thermochemistry of the bisulfite and the sulfonate ions and related compounds / Brown Richard E., Barber Frank // J. Phys. Chem. - 1995. - 99, N 20. - С. 8071-8075. - Англ.

В рамках теории Гауссиан-2, а также на уровне МП2 исследовано электронное строение бисульфитного HOSO[2]{-} (I) и таутомерного сульфонатного HSO[3]{-} (II) ионов и ряда родственных систем. Показано, что II стабильнее, чем I в газ. и водной фазах (примерно на 4-5 ккал/моль). При плохом наборе поляризац. ф-ций атомов S получаются противоречивые результаты. Газофазные теплоты образования I и II найдены равными -165 (эксперим. значение -165,6'±'2,5) и -169 ккал/мол. Библ. 22.

Р. Ж. Х. №4, 1996.

HSO_3^-

1997

127: 113616q An ab initio study of the structure and energetics of the bisulfite ion in the gas phase and in aqueous solution. Vincent, Mark A.; Palmer, Ian J.; Hillier, Ian (Department of Chemistry, University of Manchester, Oxford Road, Manchester, UK). *THEOCHEM* 1997, 394(1), 1-9 (Eng), Elsevier. Ab initio MO methods, employing large basis sets and the MP2, B3LYP and BD(T) correlation approaches, have been used to study the two low energy isomers of bisulfite (HSO_3^{1-}) in the gas phase and in aq. soln. Explicit solvation is found to be essential to predict the correct order of isomer stability and yields an excellent prediction of the relative energies of the C_1 and C_{3v} forms. The effect of explicit solvent on mol. geometry must be included to allow accurate prediction of the obsd. NMR shifts, which are calcd. using the GIAO method. The vibrational frequencies are also calcd. The results of our study are discussed in terms of the role of bisulfite in the atm. oxidn. of SO_2 .

ab initio
param
cm⁻¹ - k
cm⁻¹ at 298 K

C.A. 1997, 127, N8