

N-H-S-O

982-III

$T_m$  (  $H.NH.SO_3H$  )

1946

Oberhauser B.F., Urbina C.H.B.  
Anales Facultad filosóf. y  
educación, Univ. Chile, Sección quim  
1946, 3, 109-17.

"Physical and chemical properties  
of sulfamic acid".

C.A., 1947, 1944d

Heft 6  
8-кач 9

K

$\text{NO}_2\text{H}\cdot\text{SO}_4$  (we)

988-III

1957

Gerding H., Steeman J.W.M.

Rec. trav. chim. 1957, 70, 1089-1092

Raman. effect of an equimolecular liquid  
mixture of  $\text{HNO}_3$  and  $\text{SO}_3$

Chem. Abstr. 1957, 46,  
N10, 4368a

980-115

1951

$\text{NH}_2\text{SO}_3\text{H}$  (супернатант)

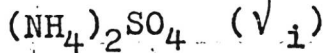
Kanda F. A., King A. J.

J. Am. Chem. Soc., 1951, 73, 2315-19

The crystal structure of sulfamic acid.

2

C. A., 1951, 7405h



1953

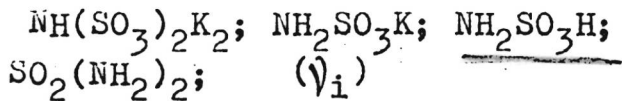
Shantakumari C.

Proc. Indian Acad. Sci., 1953,  
37A, 393-400

Raman spectra of crystalline  
sulfates of zinc, magnesium, and  
sodium

C.A., 1953, 7895i

979-III



1954

Hofmann H.J., Andress K.R.

Naturwissenschaften, 1954, 41,  
N 4, 94 (Review)

Raman spektren einiger Schwefel-  
stickstoff-Verbindungen.

PX., 1954, N 17, 39172

981-III

$\text{H}_3\text{SO}_3$  (V), словесные постаты) 1958

Nakagawa J., Mizushima S., Saraceno A.J.,  
Lane T.J., Quagliano J.V.  
Spectrochim. acta, 1958, 12, N 2-3,  
239-243.

Инфракрасные спектры поглощения  
неорганических координационных комплексов  
XV. Нормальные колебания сульфаминовой  
кислоты  $\text{H}_3\text{N}^+-\text{SO}_3^-$ .

PX., 1959, N 12, 41361

III-989

 $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_3$ 

U.K.

C. A. Wiedemann

The infrared absorption spectrum of ammonium sulfite. Yu. Ya Kharitonov. *Zhur. Neorg. Khim.* 6, 2601-2(1961).  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_3$  was synthesized by treatment of an aq. soln. of  $\text{NH}_4$  with  $\text{SO}_2$ . The salt was desiccated by heating to  $100^\circ$  or by use of a vacuum desiccator. The spectrum was registered, 400-2000  $\text{cm}^{-1}$ , with a double beam spectrophotometer. Some differences between the 2 preps. and between them and other sulfites were observed; they are due to variable amts. of sulfate, formed by air oxidation. The vibration frequency of the S—O bond is approx. 950  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu_2$ ) and, to a lesser degree, 480  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu_4$ ).

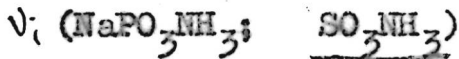
M. Wiedemann.

C.A. 1962. 56. 8

2180 e

4099

1963



Steger E.

Z. anorg. und allgem.chem., 1963, 325,  
N 1-2, 89-97

Infrarotspektroskopische Untersu-  
chungen zur Frage...

J

PF, 1965, 11 217

3560-III

1963

$\text{CH}_2\text{CO}$  ( $\gamma_i$ )

$\text{N}_2\text{F}_2$ ,  $\text{O}_2\text{F}_2$ ,  $\text{H}_2\text{SO}$  ( *сидфисмупа* )

Wilson E.B.,

Pura and appl.chem., 1963, 1,

N 1, 23-33 ( )

Recent results of chemical  
interest ...

PX., 1964, 24 162

10

Рез. химии

Bp 5878 - X 1965

$H_2NO_3SO_3H$  (Di, ~~суперкислота~~)

Dubini P.E., Ricca G.,

Bargigia F.,

Chim. e industrie, 1965, 47, NS  
577-23

$(NH_3)_2SO_2$   $\gamma$  (2, crystalline)  
 $(ND_3)_2SO_2$

1965

12

XIV 1610

Herrick I.W., Wagner E.L.

Spectrochim. acta, 1965, 21, 149, 1569-1574  
(unpubl.)

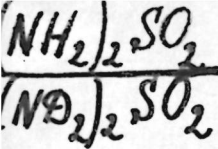
The vibrational spectra of crystalline  
sulfamide and deuterio-sulfamide.



7

Puckner, 1966, 75 L51

10



ИК-спектр,

силы

и сдв.

8 Д274. ИК-спектры сульфамида и сульфамида- $d_4$ .  
U no T., Machida K., Hanai K. Infra-red spectra of  
sulphamide and sulphamide- $d_4$ . «Spectrochim. acta», 1966,  
22, № 12, 2065—2073 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения ( $200-3600\text{ см}^{-1}$ ) сульфамида и сульфамида- $d_4$ . Приведены кривые поглощения, снятые в естественном и в поляризованном свете. Составлены таблицы измеренных частот с указанием дихроизма и с отнесением частот к фундаментальным и составным частотам, к типам симметрии группы  $C_{2v}$  и к колебаниям связей и углов. Отнесение проверено на основании правила произведений. Решена задача о норм. колебаниях обеих молекул, для которых определены системы фундаментальных частот, распределения потенц. энергии по отдельным частотам и координатам симметрии и 15 силовых постоянных в системе Юри — Брэдли. Показано, что сдвиг полос симметричных и антисимметричных вал. кол. N—S—N при дейтерировании обусловлен взаимодействием вал. кол. связи S—N и деф. кол. группы  $ND_2$ .

М. Ковнер

1966

9. 1967. 89

$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

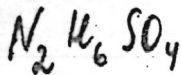
Oden L. L.

1966

Dissert. Abstr., 26(7), 3654.

Vi

Infrared investigation of some  
ferroelectric and related com-  
pounds.  $\text{NH}_4\text{CNS}$ ,  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ ,  
 $\text{RbHSO}_4$ ,  $\text{NH}_4\text{HSO}_4$   
(cm.  $\text{NH}_4\text{CNS}$ )



XIII - 969

1967

7 Б136. Инфракрасные спектры сульфата гидразония  $[\text{N}_2\text{H}_6\text{SO}_4]$  и сульфата дигидразиния  $[(\text{N}_2\text{H}_5)_2\text{SO}_4]$ . W a r -  
r e r A. V. R., N a r a y a n a n P. S. Infrared spectra of  
hydrazonium sulphate  $[\text{N}_2\text{H}_6\text{SO}_4]$  and dihydrazinium sul-  
phate  $[(\text{N}_2\text{H}_5)_2\text{SO}_4]$ . «Indian J. Pure and Appl. Phys.»,  
1967, 5, № 6, 216—219 (англ.)

Исследованы ИК-спектры гидразонийсульфата  $[\text{N}_2\text{H}_6\text{SO}_4]$  (I) и дигидразинийсульфата  $[(\text{N}_2\text{H}_5)_2\text{SO}_4]$  (II).  
Приведено отнесение всех полос в исследованных спек-  
трах. В спектре I наблюдается расщепление полос вы-  
рожденных колебаний  $\text{SO}_4^{2-}$ , что указывает на понижение  
симметрии сульфат-иона. Полосы вал. кол. групп N—H,  
связанных H-связями, в спектре I расположены в диапа-  
зоне  $3200\text{—}2600\text{ см}^{-1}$ , что, в соответствии с литературны-

X, 1968. 7

ми данными, говорит о наличии в I Н-связей только типа  $N^+—H\cdots O$ . В ИК-спектре II полосы вал. кол.  $N—H$  расположены при 3270 и 3160  $см^{-1}$  ( $N—H\cdots O$ ) и 3050, 2960, 2720 и 2600  $см^{-1}$  ( $N^+—H\cdots O$ ). Значения частот деф. кол.  $N—H$  подтверждают для I структуру катиона  $N^+H_3—N^+H_3$ , а для II — структуру  $NH_2—N^+H_3$ . Полосы вал. кол.  $N—N$  в спектре I расположены при 1040  $см^{-1}$ , а в спектре II — при 980  $см^{-1}$ . Обсуждается отнесение полосы при 2100  $см^{-1}$ , наблюдающейся в спектрах I и II, а также в спектрах солей аммония, первичн. и вторичн. аминов и в аминок-т. Авторы предполагают, что эта полоса не обусловлена ангармоничной комбинацией деф. кол. при 1600  $см^{-1}$  и крутильных кол. при 500  $см^{-1}$ , как это считали раньше, а является, по-видимому, основной частотой, характеризующей связанные Н-связями группы  $N—H$ .

А. Упадышева

N-O-S, Se Чаркин О. П., 1968  
Деткина М. Е.

Ж. Структ. Химии, 1968,  
9, № 4, 645.

— Рассматривается строение  
молекулярных ионов типа  
 $MX'X^+$ ;  $MXX''X^+$ ;  $MYX^+$ ;  $MX'X''X'''X^+$ , ...  
 $MY'X^+$ ;  $MY'Y^+$ , где  
 $X = F, Cl, Br, I, CH_3$   
 $Y = O, S, Se$

(См. В-Нал) III

1968

(NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>  
(no analysis)  
(U.K.)

14238v Low-temperature infrared studies. II. Preliminary communication on the phase transitions of ammonium sulfate and ammonium-d<sub>4</sub> sulfate. Schutte, C. J. H.; Heyns, A. M. (Univ. South Africa, Pretoria, S. Africa). *Chem. Phys. Lett.* 1968, 1(11), 511-14 (Eng). The temp. dependence (18-298°K.) of the ir spectrum of thin, polycryst. (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> and (ND<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> films on KBr and NaCl windows was investigated. The form of the sets of bands in the N-D and N-H stretching regions were similar. Splittings observed in the various (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> bands agree with those predicted by the factor group approach. The ir spectra do not show the reported existence of 2 independent sets of reorienting NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. The peak heights above the base line of the 2  $\nu_2$  (mode of NH<sub>4</sub><sup>+</sup>) at 3300 cm.<sup>-1</sup> and  $\nu_4'$  (SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> vibration) at 612 cm.<sup>-1</sup> were plotted as functions of temp. The ferroelec. phase transition at 223°K. is clear. There is increased

C.A. 1968. 69.4

H-bonding below the ferroelec. point. There is also a discontinuity at  $\sim 168^\circ\text{K}$ . which is correlated with the 2nd-moment variation and line-width transition which were observed in the N.M.R. spectrum. No evidence was observed for the predicted frequency shifts of N-H and  $\nu_4$ . Considerable fine structure on the high-frequency side of the bonding N-H mode owing to coupling of ions in the same unit cells was observed. This coupling could be enhanced by the type of H-bonding predicted by Schlemper and Hamilton (1966). As in the N.M.R. spectrum,  $(\text{ND}_4)_2\text{SO}_4$  exhibited anomalous behavior. Three types of spectra were observed for the N-D stretching region in  $(\text{ND}_4)_2\text{SO}_4$ : from room temp. to  $-48^\circ$ , from  $-48$  to  $-49.5^\circ$ , and from  $-49.5$  to  $-256^\circ$ . No such behavior was observed in  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ .

FBJN

$\text{KNO}_2\text{S}_2\text{O}_7$ , (vi, enpyrin) 10- 1969  
 $\text{NOHS}_2\text{O}_7$ . X4299

Gerding H., Griben H.; Stufkens D.J.

Recl. Trav. Chim. Pays-Bas 1969, 88(6),

667-70.

Vibrational spectra and structure  
of the compounds  $\text{KNO}_2\text{S}_2\text{O}_7$

$\text{NOHS}_2\text{O}_7$ . 6

CA, 1969, 71, N8, 34720r

1969

XIII-323

 $\text{NH}_2\text{SO}_3$ 

17 Б38. Потенциальная функция Юри — Бредли для иона сульфамата  $[\text{NH}_2\text{SO}_3]$ . Katiyar R. S. Urey—Bradley potential function for the sulphamate ion. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1969, 7, № 1, 10—12 (англ.)

На основе матричного метода Вильсона произведен расчет внутренних колебаний иона сульфамата  $[\text{NH}_2\text{SO}_3]$  — при использовании силового поля Юри — Бредли. Р. Ф.

расчет  
колеб.

X. 1969. 17

XIII-323

1969

[NH<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>]<sup>-</sup>

8 Д116. Потенциальная функция Юри — Брэдли для иона сульфамата. K a t i y a r R. S. Urey—Bradley potential function for the sulphonate ion. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1969, 7, № 1, 10—12 (англ.)

На основе матричного метода Вильсона произведен расчет внутренних колебаний иона сульфамата [NH<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>]<sup>-</sup>. Используется силовое поле Юри — Брэдли. Силовые постоянные взяты для молекулы сульфоновой кислоты. Проведен анализ норм. координат с использованием нового приближения, согласно которому сложный ион рассматривается расщепленным на 2 части: SO<sub>2</sub>—R<sub>1</sub>(B) и NH<sub>2</sub>—R<sub>2</sub>(C). В части (B) группа NH<sub>2</sub>=R<sub>1</sub> считается как один атом, а в части (C) — группа SO<sub>3</sub>=R<sub>2</sub>. Связь NS общая для каждой части. Задача решается

$\nu_i$ ,  
см. нсм.

ф. 1969. 8А

отдельно для части (B) и (C). Отнесение фундаментальных частот сделано на основе распределения потенц. энергии. Геометрич. параметры взяты из работы по дифракции нейтронов:  $SO=1,489 \text{ \AA}$ ,  $NS=1,69 \text{ \AA}$ ,  $NH=1,083 \text{ \AA}$ ,  $OSO=112,1^\circ$ ,  $OSN=106,2^\circ$ ,  $\hat{H}NH=110,1^\circ$ ,  $\hat{H}NS=110,2^\circ$ . На основе полученного силового поля рассчитаны частоты норм. колебаний основного и дейтерированного иона  $[ND_2SO_3]^-$ . Частоты вычисленные и экспериментальные, силовые постоянные и распределение потенц. энергии сведены в таблицы. Совпадение с эксперим. данными хорошее. Однако из-за принятого приближения нельзя определить частоту крутильного колебания NS.

Е. К.

$H_2SO_4$  N

UK, -

KP-

chemisor

Deporcq-Stratmanns 11970  
M., Vast P.

J. Chim. phys. et  
phys.-chim. biol., 67(5),  
1000.

● (sol.  $NaSO_3 F$ ) III

HON; LiON; H<sub>2</sub>NN; HSN 1972  
(об, патн. экон. пакет)

Hayes L. J., Billingsley  
Frank P. II, Trindle C.,  
J. Org. Chem., 1972, 37, No 4,  
3924-29  
(см. HON; III)

10 (99)

ЕСТЬ Ф. К.

1970

XIII 208

DN50 (cont. next) 4 gr.

Eysel H.H.,

7. Mol. Street., 1940,

5/41, 275-82

ecr. p.m. ● 140

21, с.л. н. (ОСНН, ОСНД) 13 1971

Саруханов М.А., Харитонов Ю.Ф.

XIII 1459

В сб. "Колебательные процессы в неорг. химии",

М., Наука, 1971, 310-313

Нормальные колебания молекул  
тиоантимона.

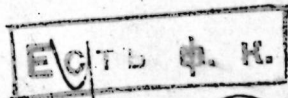


Рис. 91, 1971, 50134

10



$\text{NH}_4\text{HSO}_4$ ,  $\text{ND}_4\text{DSO}_4$  (Tex, Vi) 13  
Schutte C. J. H., Van Rensburg D. J. J.,  
J. Mol. Struct., 1971, 9, N1-2, 77-90 (and.)

Low-temperature infrared studies  
VIII. Ferroelectric ammonium  
hydrogen sulfate and ammo-  
nium -  $\text{d}_4$  deuterium sulfate  
10, 5 ( $\phi$ ) CA, 1972, 76, N4, 1980/c

$\text{NH}_4\text{NH}_2\text{SO}_3$

1972

23 Б472. Кристаллическая структура сульфамата аммония. Wadhawan V. K., Radmanabhan V. M. The crystal structure of ammonium sulphamate. «Acta crystallogr.», 1972, B28, № 6, 1903—1907 (англ.)

Структ.

Проведено рентгенографич. определение структуры кристаллов  $\text{NH}_4\text{NH}_2\text{SO}_3$  (метод Вейсенберга,  $\lambda$  Cu, 345; отражений, определение знаков по методу сложения; символов, МНК в анизотропном приближении до  $R=0,095$ ). Параметры ромбич. решетки, определенные на основе нейтронографич. данных:  $a$  7,558,  $b$  7,835,  $c$  14,49А,  $\rho$  (изм.) 1,78,  $Z=8$ , ф. гр.  $Pbca$ . Сульфамат-ион слабо искажен: расстояния S—O 1,45; 1,46; 1,49А (ср. 1,47А); углы OSO отклоняются от тетраэдрич. и

X-1972-23

равны  $111,1^\circ$ — $112,3^\circ$ . Расстояние N—S  $1,63\text{\AA}$  меньше соотв. расстояния для ординарной связи ( $1,74\text{\AA}$ ). Это уменьшение объяснено, как результат  $d_\pi$ — $p_\pi$ -перекрывания  $d$  орбиталей атома S и  $p$  орбиталей атома N. Углы OSN несколько меньше тетраэдрич. и равны  $106,1$ ;  $107,1$ ;  $108,2^\circ$ . Ионы  $\text{NH}_2\text{SO}_3^-$  и  $\text{NH}_4^+$  образуют колонки, параллельные  $a$  и  $c$ . Колонки связаны водородными связями трех типов: N—H...O (атом N  $\text{NH}_2$ -группы сульфат-иона)  $3,02$ ;  $3,15$ ;  $3,25\text{\AA}$ ; N—H...O (атом N принадлежит иону  $\text{NH}_4^+$ )  $2,97$ — $3,10\text{\AA}$ ; N—H...N (атом N принадлежит  $\text{NH}_2$ -группе иона  $\text{NH}_2\text{SO}_3^-$ )  $3,17$ ;  $3,37\text{\AA}$ . Определить положение атомов H из разностного фурье-синтеза не удалось.

П. И. Лазарев

$\text{NH}_4^+$  (Vторз.)  $\leftarrow \frac{\text{NH}_4\text{HSO}_4}{(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SO}_4)_2}$  XIII 2403 1973

Acharya P.K., Narayanan P.S.,

Indian J. Pure Appl. Phys., 1973,  
11, N7, 519-21 (ann.)

Vibration spectra of ferroelectric sulfates. II. Rubidium sulfate, ammonium sulfate, and triammonium hydrogen disulfate.

CA, 1974, 80, N-10, 54076z

$\text{SO}_3\text{NHD}^-$

XIII-2632

1973

$\text{SO}_3\text{NHCH}_3^-$

$\text{SO}_3\text{ND}_2^-$

$\text{SO}_3\text{N}(\text{CH}_3)_2^-$

discuss.  
noem.

8678z Vibrational spectra of N-methylamidosenates and N-methylamidossulfates. Touzin, J. (J. E. Purkyne Univ., Brno, Czech.). *Collect. Czech. Chem. Commun.* 1973, 38(8), 2384-96 (Eng). On the basis of vibrational spectra assignments of  $\text{SeO}_3\text{NXY}^-$  (X, Y = H, Me), the quadratic potential consts. were calcd. in the diagonal valence force approxn. The assumption was confirmed that the unexpectedly low force const. value of the Se-O bond in  $\text{NH}_4\text{SeO}_3\text{NH}_2$  is due to the H bond formation to which the  $\text{NH}_4^+$  cations considerably contribute. The influence of H bonds formed by  $-\text{NH}_2$  groups on the Se-O bond force const. was examd. by a gradual substitution of H atoms by Me groups. The vibrational spectra of the  $\text{SO}_3\text{NXY}^-$  (X, Y = H, D, Me) anions were also measured and the calcn. of the quadratic potential consts. was attempted. The bonds in  $\text{SeO}_3\text{NH}_2^-$  and  $\text{SO}_3\text{NH}_2^-$  are not quite analogous. E. Erdos

C.A. 1974. 80. N2

(41)  $\boxtimes$

$O_3SONH_3$

[Деп. № 97]

1974

Деп. 21 Б740 Термодинамические функции сульфопроизводных гидроксиламина. Бедрина М. Е., Са-  
руханов М. А., Парпиев Н. А. (Редколлегия «Ж.  
физ. химии» АН СССР). М., 1974. 5 с., библиогр.  
10 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 17 июня 1974 г.,  
№ 1629—74 Деп.)

Полуэмпирическим методом рассчитаны частоты ко-  
лебаний моделей  $O_3SONH_3$  (I),  $[HONHSO_3]^-$  (II),

$[O_3SONHSO_3]^{2-}$  (III),  $[HON(SO_3)_2]^{2-}$  (IV) и  $[O_3SON-$   
 $(SO_3)_2]^{3-}$  (V). На основании молек. и рассчитанных  
спектральных данных в приближении идеального газа  
вычислены и табулированы в интервале 273—700°K  
термодинамич. функции I—V. При 298,15°K значения  
 $C_p$ ,  $(H - H_0)/T$ ,  $-(\Phi - H_0)/T$  и  $S'$  (кал/град·моль) со-  
ставили соотв.: I 19,8; 12,6; 59,7 и 72,3, II 19,6; 12,3;  
60,6 и 72,9; III 29,2; 16,2; 68,0 и 84,3; IV 28,9; 15,9;  
65,5 и 81,4; V 37,4; 19,5; 71,1 и 90,6. А. Гузей

Di  
т.г.р.

1974-2444  
XIII

ж. 1974. № 21

☑ (41) т.г.р.

[HONHSO<sub>3</sub>]<sup>-</sup>

XIII - 2445

1974

15 Б252. Анализ нормальных колебаний иона. Са-  
руханов М. А., Парпиев Н. А. «Ж. неорганич. хи-  
мии», 1974, 19, № 4, 883—885

Проведен анализ нормальных колебаний гидроксила-  
минсульфат-иона [HONHSO<sub>3</sub>]<sup>-</sup> и его дейтероаналога.  
Дана интерпретация колебательного спектра, оценено  
силовое поле и вклад различных координат в колеба-  
ния, исследована характеристичность по частоте и фор-  
ме. Резюме

калеб.  
спектр

X 1974 N 15

1975  
 $O_3SONH_3, [HONH_3SO_3]^-$  XIII 3064  
 $[O_3SONH_3SO_3]^-$ ,  $(C_p, H_T^0 - H_T^0 / T, G_T^0 - H_T^0 / T)$

Бедрина М.Е., Саружанов М.А.,  
Тартчев Н.А.,

Ис. физ. химии, 1975, 49 (7),  
1843-4.

Термодинамические функции  
сульфурозамещ. (гидроксиамина)  
С.А. 1975.83N18.153627у. М, В (Ф) 6

$\text{SO}_2(\text{NH}_2)_2$

ВФ - ХИИ - 3156 1975

М. П.

Т. Г. СР

(V) 12 Д118. Анализ нормальных координат сульфамида. Gopinath C. R., Raghavendra Rao K. S. Normal coordinate analysis of sulphamide. «Curr. Sci.» (India), 1975, 44, № 4, 107—109 (англ.)

(1/4) Из эксперим. значений частот колебаний приближенным методом характеристик. набора валентных координат вычислены силовые постоянные, средние амплитуды колебаний, постоянные корриолисова взаимодействия и термодинамич. ф-ции (при т-рах 100—1000° K) молекулы  $\text{SO}_2(\text{NH}_2)_2$  (группы  $\text{NH}_2$  рассмотрены как точечные массы.)

М. Р. Алиев

(+1) ☒

ф. 1975 N 12

$\text{SO}_2(\text{NH}_2)_2$

$\nu_i$ , см. по сф.

ВФ-ХИИ-3156 1975

1 Б268. Расчет частот и форм нормальных колебаний сульфамида. Gopinath C. R., Raghavendra Rao K. S. Normal coordinate analysis of sulphamide. «Curr. Sci.» (India), 1975, 44, № 4, 107—109 (англ.)

Проведен анализ нормальных колебаний  $\text{SO}_2(\text{NH}_2)_2$  (симметрия  $C_{2v}$ ) и вычислены силовые постоянные в валентно-силовом поле методом Эрранца и Кастано. Рассчитаны средние-квадратичные амплитуды (методом Сивина), кориолисовы постоянные и термодинамич. функции в приближении гармонич. осциллятора в интервале т-р 100—1000° К. Все расчеты проведены в предположении, что группа  $\text{NH}_2$  является точечной массой. Е. Разумова

α 1976 N1

$(\text{NH}_2)_2\text{SO}$

1975

8 Д173. Расчет электронной структуры молекул тиомочевины и аллилтиомочевины. Китаев Г. А., Макурин Ю. Н., Двойнин В. И., Миролубов В. Р. «Ж. физ. химии», 1975, 49, № 4, 1011—1013.

Методом CNDO/2 выполнены расчеты электронной структуры молекул тиомочевины и аллилтиомочевины. Найдено, что в тиомочевине атом серы является более отрицательно заряженным, чем в аллилтиомочевине. Сделана попытка связать между собой электронное строение молекулы сульфидизатора и кинетику протекания процесса.

Резюме

расчет  
эл. структ.

ф. 1975 № 8

50829.6606

Ch, TC, Ph

 $\text{ND}_3\text{SO}_3$   
96625 $\text{NH}_3\text{SO}_3$ 

1975

\* 4-9713

Lucazeau G., Lautie A., Novak A.

Low temperature Raman spectra of

 $\text{NH}_3\text{SO}_3$  and  $\text{ND}_3\text{SO}_3$  single crystals."J. Raman Spectrosc.", 1975, 3, N 2-3,  
161-176 (англ.)

0442

408 409

ВИНИТИ

61020.6708

Ph, Ch, TC

$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  Russian  
52017

1976  
\*5-14870

Ikawa Shun-ichi, Kimura Masao.  
The study of the Raman band shape of  
sulfuric acid and proton transfer.  
"Bull. Chem. Soc. Jap.", 1976, 49, N 3,  
2051-2054 (англ.)

(Сел.  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , III)  
0728 пик

714 714

720

ВИНИТИ

$\text{NH}_3\text{SO}_2$

1976

Lucchese R.R., et al.

J. Am. Chem. Soc. 1976,  
98 (24), 7617-20.

(D class  
kv. del.  
pocer.)

(all  $\text{NH}_3\text{O}_3$ ) III

$(\text{NH}_3)_2\text{SO}_2$

1977

Mishra R.C., et al.

Indian J. Phys. 1977,  
51B (5), 329-35

(curr. notat.)

curr.  $\text{NCl}_3$  - III

XIII-3776

1977

SzND(78) ( $V_i$ , crea. n.)

Steudel R.,

J. Phys. Chem., 1947, 81, 343-49  
(am)

PMI, 1944, 165246

10

$H_3N...SO_3$

immua 6790

1978

Douglas J.E., et al.

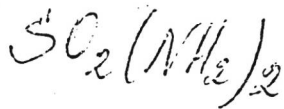
участки  
Кб. уч.х.  
пав.с  
Зем. уч.  
бумага 6

Chem. Phys. Lett.,

1978, 57 (4), 553-56



? III



number 6698 1978

Howard J; et al.

U.K. Patent  
Chemp  
Ind. Sect.

J. Chem. Soc. Dalton

Trans., 1978, 921-925

Torsional Vibrations

in ...

$\text{NOHSO}_4$

механизм  
образования

1948  
7 Б1482. Выделение и идентификация кислого сульфата нитрозония  $\text{NOHSO}_4$  — продукта фотохимической реакции в воздухе в присутствии двуокиси серы и двуокиси азота. Schroeder W. H., Urone P. Isolation and identification of nitrosonium hydrogen sulfate ( $\text{NOHSO}_4$ ) as a photochemical reaction product in air containing sulfur dioxide and nitrogen dioxide. «Environ. Sci. and Technol.», 1978, 12, № 5, 545—550 (англ.)

Методами хим. и инструментального анализа обнаружены и идентифицированы молекулы  $\text{NOHSO}_4$  (I) (тв. белый осадок) в продуктах фотохим. р-ции в воздухе в присутствии  $\text{SO}_2$  и  $\text{NO}_2$  (облучение светом в диапазоне 310—420 нм потоком  $\sim 2 \cdot 10^{16}$  см $^{-2}$ .сек $^{-1}$ ). Рассмотрен механизм р-ций образования I и отмечена возможная роль подобных процессов в химии атмосферы.  
Г. К. Васильев

ж. 1949, № 7

$\text{NM}_2\text{SO}_2$   
(радикал)

оттиски 9690

1980

Boyd R. J. et al

Can. J. Chem. 1980, 58,  
N 4, 331-8

кв. мех.  
расчет  
геометр.  
эл. строен.

См  $\text{H}_2\text{SO}_2$  i III

$O_2S(NH_2)_2$

2.

4

ор. 1981. N/14

1980  
14 Б205. Спектроскопическое исследование сульфамидов серебра. Popitsch A., Nachbaur E., Neißl W., Fritzer H. P. Spectroscopical investigations on silver sulfamides. «Monatsh. Chem.», 1980, 111, № 6, 1321—1328 (англ.; рез. нем.)

Измерены диффузные спектры отражения (ДСО) диамагнитных сульфамидов серебра  $O_2S(NHAg)_2$  (I) и  $O_2S(NAg_2)_2$  (II) при 300 и 77 К, а также ИК-спектры I, II и  $O_2S(NH_2)_2$  (III) в области  $\nu_{SO}$  и  $\nu_{SN}$ . Предложено отнесение наблюдаемых переходов. Обнаруженное значительное понижение частот  $\nu_{SO_2}$  и  $\nu_{SN_2}$  (на 170—270  $cm^{-1}$ ) при переходе от III к II и I объясняется пе-

переносом заряда из области  $S=O$  через атомы S и N к атомам Ag, что подтверждается удлинением связей SO и уменьшением термич. и мех. устойчивости. Наиболее длинноволновые полосы в спектрах ДСО отнесены к переходам с переносом заряда. Полоса 248 нм отнесена к внутримолек. переходу  $O_2SN^{2-}$ -иона, причем сдвиг ее в длинноволновую область по сравнению с III объясняется частичной ковалентностью связи Ag—N.

Т. Б. Ченская

$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

1981

(CRP)

95: 88397c Raman spectrum of an ammonium sulfate crystal. Goloborod'ko, E. V.; Khalimonova, I. N. (Kiev. Gos. Univ., Kiev, USSR). *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)* 1981, 23(5), 1514-16 (Russ). The Raman spectrum of  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  single crystals was obtained at 40-4000  $\text{cm}^{-1}$  for 6 different polarizations and assigned.

c.A. 1981, 95, 410

$H_2SNSO_2H$

1981

Teodorakopoulos G. et al

Зук.  
еіроен.  
кв.мх.  
раерет  
(J)

J Comput. Chem., 1981, 2,  
N 2, 212-217.

● (сн  $H_2S$ ) III

$\text{HN}(\text{SO}_3)_2^{-2}$  [Ommuck 13229] 1981

Touzin J., Ruzicka A.,

IR спекір,  
Раман.  
спекір

Collect. Czech. Chem.  
Commun., 1981, 11,  
2620-2632.

$\text{NH}_3^+ \text{SO}_3^-$

Оттиск 15040

1982

2Б184. Внутренние колебания и расчет нормальных колебаний сульфаминовой кислоты. Internal modes and normal coordinate analysis of sulphamic acid. Muthusubramanian P., Raj A. Sundara. «J. Mol. Struct.», 1982, 84, № 1—2, 25—37 (англ.)

vi;

X. 1983, 19, n 2

, Сульфаминовая к-та в кристалле имеет цвиттерионное строение  $\text{NH}_3^+\text{SO}_3^-$  (I). С целью уточнения отнесения колебательных частот I изучены спектры КР монокристаллов I при различных взаимных ориентациях кристалла и электрич. вектора падающего света. В областях  $680$  и  $1060\text{ см}^{-1}$  наблюдается резонанс Ферми. В первом случае резонанс имеется между вал. кол.  $\text{SO}_3(A_1)$  и обертоном деф. кол.  $\text{SO}_3(A_1)$ , а во втором между вал. кол. N—S и обертоном маятниковых кол.  $\text{SO}_3$ . Сдвиг частот вал. кол. NH в кристалле составляет  $280\text{ см}^{-1}$ , что соответствует Н-связи средн. силы. Предложено полное отнесение частот основных колебаний I, проведен расчет норм. кол., получены частоты, формы колебаний и распределение потенциальной энергии по колебательным координатам. Результаты согласуются с предположением об усилении Н-связей и ослаблении связи N—S в I по сравнению с ее солями, напр., сульфаматом калия. С. С. Букалов

$\text{SO}_2 \cdot \text{NH}_3$

1982

8 Б255. Комплексы двуокиси серы в твердом азоте.  
Some sulphur dioxide complexes in solid nitrogen. Nord  
Leif. «J. Mol. Struct.», 1982, 96, № 1—2, 27—35  
(англ.)

Исследованы ИК-спектры ( $400\text{--}1600\text{ см}^{-1}$ ) комплексов  $\text{SO}_2 \cdot \text{A}$ , где  $\text{A} = \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}, \text{Cl}_2, \text{HBr}$  и  $\text{C}_2\text{H}_4$ , полученных сокопденсацией паров  $\text{A/N}_2$  (при матричном разбавлении от 1/100 до 1/200) и  $\text{SO}_2/\text{N}_2$  (от 1/150 до 1/600) на подложке CsJ при  $t \approx 20\text{ K}$ . Изучение центрац. зависимости интенсивностей полос указывает на образование комплексов состава 1:1. Рассмотрены величины смещений полос колебаний  $\text{SO}_2$  в областях  $1360\text{--}1320\text{ см}^{-1}$  ( $\nu_1$ ),  $1160\text{--}1120\text{ см}^{-1}$  ( $\nu_2$ ) и  $540\text{--}500\text{ см}^{-1}$  ( $\nu_3$ ) при образовании комплексов. Величина смещения зависит от природы A и уменьшается в ряду  $\text{NH}_3 > \text{H}_2\text{O} > \text{HBr} > \text{Cl}_2 \approx \text{C}_2\text{H}_4$ , что означает ослабление силы связи между  $\text{SO}_2$  и A в этом ряду.  $\Delta\nu_1$  лежит в интервале от 3,2 до  $-2,3$ ,  $\Delta\nu_2$  от 11,5 до 0,5 и  $\Delta\nu_3$  от

Х. 1983, 19, №8.

—14,2 до —2,2 см<sup>-1</sup>. Знак смещения  $\nu_1$  различен для  $\pi$ -донорного лиганда C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> и  $\sigma$ -донорных лигандов NH<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>O. Не обнаружена строгая корреляция между величиной смещения  $\Delta\nu$  и донорной или акцепторной способностью лигандов. По-видимому, нек-рые из образовавшихся комплексов стабилизированы, в основном, электростатич. силами.

И. А. Гарбузова





Dmmuck 14344

1982



(2)

Popitsch A.,

ИК спектр,  
Раман-  
спектр

Monatsh. Chem.,  
1982, 113, 529-539

[Omniuck 16166]

1982

$\text{Na}_2\text{H}_6\text{SO}_4$

промоте-  
протестун-  
и паров-  
переходы

Reddy A.R., Sathyanara-  
rajan S.G., et al.,

J. Phys. C: Solid State  
Phys., 1982, 15, N36,

7325 - 7332.

$\text{SO}_3\text{NH}^+$

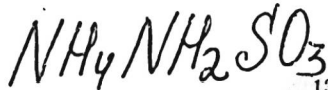
1982

Seeger Rolf, Seeger Ute,  
et al.

M. H.,  
Ed.

Inorg. Chem., 1982, 21,  
9, 3473-3477.

(Cm. NSF; III)



1982

13 Б180. Спектры комбинационного рассеяния монокристалла сульфамата аммония. Sundara Raj A., Muthusubramanian P. Raman spectra of ammonium sulphamate single crystal. «J. Raman Spectrosc.», 1982, 12, № 1, 24—29 (англ.)

Изучены поляризац. спектры КР ( $\lambda$  4416 Å) и ИК-спектры поглощения (область 20—4000  $\text{см}^{-1}$ ) монокристалла  $\text{NH}_4\text{NH}_2\text{SO}_3$  (I). Проведен теоретико-групповой анализ спектров, и произведено отнесение линий к различным типам внутренних колебаний ионов  $(\text{NH}_2\text{SO}_3)^-$ ,  $\text{NH}_4^+$  и колебаниям крист. решетки. Кристаллу приписана симметрия  $\text{Pbca} \equiv D_{2h}^{15}$ ,  $Z=8$ , позиционная симметрия ионов  $-C_1$ . Наблюдали расщепление ряда колебаний при понижении симметрии ионов  $(\text{NH}_2\text{SO}_3)^-$  и  $\text{NH}_4^+$  с  $C_s$  и  $T_d$  соотв. до  $C_1$ , а также давидовское расщепление. Величина давидовского расщепления ( $\sim 5\text{—}20$   $\text{см}^{-1}$ ) в I больше, чем в  $\text{KNH}_2\text{SO}_3$ , что обусловлено бóльшим числом молекул в элементарной ячейке.

А. В. Бобров

Спектр КР

х. 1982, 19, № 13.



Om. 16851

1982

8 Д60. Анализ нормальных координат иона сульфата. Normal coordinate analysis of the sulphamate ion. Sundara Raj A., Muthusubramanian P. «J. Mol. Struct.», 1982, 89, № 3—4, Suppl.: «Theochem.», 6, № 3—4, 291—296 (англ.)

С использованием силового поля Юри — Бредли и частот комб. рас. при лазерном возбуждении сульфамата калия проведен анализ норм. координат иона сульфамата  $\text{NH}_2\text{SO}_3^-$ . Считалось, что структура иона имеет симметрию  $C_s$ . Полученные значения силовых постоянных согласуются с возрастанием характера двойной связи N—S и наличием водородной связи. Сопоставление силовых постоянных с данными для сульфаминовой кислоты подтверждает заключение об укорочении связи N—S в  $\text{KNH}_2\text{SO}_3$ .

Резюме

$\nu_i$ , см. пост.,  
геометр.,  
структура

(4) ☒

CP. 1983, 18, N 8

ОСН<sub>2</sub>НН

[Отпуск 13557] 1982

барбер  
врачения

ΔЕв,  
ΔЕи

Злобин А. С., Заркин О. М.,  
ж. Мортал. Живущи,  
1982, 27, N3 565-570.



1983

4 Б1200. Температурная зависимость активного в спектре КР крутильного колебания типа  $B_{3g}$  в молекуле) сульфамовой кислоты. Temperature dependence of the Raman active  $B_{3g}$  torsional mode of sulphamic acid. Ratcliffe C. I., Sherman W. F., Wilkinson G. R. «J. Raman Spectrosc.», 1983, 14, № 4, 246—249 (англ.)

Исследована т-рная зависимость (в интервале от 70 до 300 К) активного в спектре КР крут. кол. типа  $B_{3g}$  (в монокристалле сульфамовой к-ты  $\text{NH}_3\text{SO}_3$ ). Спектры КР записывались на спектрометре Spex Ramalog с применением проточного криостата с регулируемой т-рой Oxford Instruments CF 100. Представлены спектрограммы, полученные при 71, 190 и 298 К. На участке 180—300  $\text{см}^{-1}$  графически сравниваются нормализованные контуры полосы крут. кол., относящиеся к семи различным т-рам. Охарактеризованы и обсуждаются происходящие с повышением т-ры понижение частоты с 272 до 245  $\text{см}^{-1}$  и заметно асимметричное уширение полосы

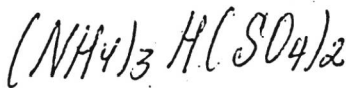
$$D_i, D_o$$

X. 1984, 19, N 4

указанного колебания. Снижение частоты рассматривается как следствие снижения высоты барьера внешнего вращения группы  $\text{NH}_3$  из-за ослабления Н-связи между протонами и атомами кислорода соседних молекул. С учетом ряда приближений, вычислен суммарный барьер вращения группы  $\text{NH}_3$  как функция  $t$ -ры. Обсуждается форма полученной зависимости.

Л. Н. Марголин





1984

102: 140013f Characterization of the hydrogen bond  $OH...O$  in ammonium and potassium hydrogen disulfates  $(NH_4)_3H(SO_4)_2$  and  $K_3H(SO_4)_2$ . Damak, M.; Daoud, A.; Novak, A. (Lab. Chim. Phys. Solide, Ec. Natl. Ing. Sfax, Sfax, Tunisia). *J. Soc. Chim. Tunis.* 1984, 12, 39-45 (Fr). The IR and Raman spectra of  $(NH_4)_3H(SO_4)_2$  and  $K_3H(SO_4)_2$  were measured. The spectra indicate the presence of strong, nonsym, H-bonds.

(ux u csp)

(H) ~~X~~C. A. 1985, 102, N 16.

HSNO

(Don. 19163) 1984

101: 80947f UV-, VIS- and IR-light-induced isomerization of thionitrous acid (HSNO) in a low-temperature matrix. Mueller, R. P.; Nonella, M.; Russegger, P.; Huber, J. Robert (Phys. Chem. Inst., Univ. Zurich, CH-8057 Zurich, Switz.). *Chem. Phys.* 1984, 87(3), 351-61 (Eng). An IR spectroscopic investigation was performed on the *trans* and *cis* isomers of thionitrous acid (HSNO) and their D- and <sup>15</sup>NO-isotopic modifications in Ar matrices at 12 K. The substances were prep'd. photolytically from thionylimide (HNSO) isotopes in the matrix. With UV (250 nm), VIS (585 nm), and IR irradiation, the *cis* → *trans* or the *trans* → *cis* isomerization of HSNO was induced, allowing an unequivocal distinction between the closely resembling IR spectra of the *trans* and *cis* isomers. Complete sets of fundamental frequencies of both rotamers were obtained and assigned by normal coordinate anal. using the transferable valence force field (TVFF) approach. Parallel to this anal. ab initio calcs. on the SCF- and CI-levels were performed to predict energy, geometry, and barrier of internal rotation for the 2 HSNO rotamers.

универсаль.

UK, YP,

вуген. черк.

C.A. 1984, 101, 210

$\text{SO}_2 \cdot \text{NH}_3$

1984

i 100: 76558s Matrix isolation infrared spectroscopic study of sulfur dioxide-amine complexes. Sass, Craig S.; Ault, Bruce S. (Dep. Chem., Univ. Cincinnati, Cincinnati, OH 45221 USA). *J. Phys. Chem.* 1984, 88(3), 432-40 (Eng). The reaction products of  $\text{SO}_2$  and a variety of Me-substituted amines were studied in Ar and N matrixes, after formation through both single and twin jet deposition. In each case, a 1:1 complex was obsd. and characterized by a shift in the IR absorptions of the  $\text{SO}_2$  subunit in the complex. The antisym. stretching mode shifted to lower energies upon complexation, from  $1350 \text{ cm}^{-1}$  for free  $\text{SO}_2$ , to  $1338 \text{ cm}^{-1}$  in the  $\text{SO}_2 \cdot \text{NH}_3$  complex, to approx.  $1270 \text{ cm}^{-1}$  for the  $\text{SO}_2 \cdot (\text{CH}_3)_3\text{N}$  complex. A similar trend was obsd. for the sym. stretching mode of the  $\text{SO}_2$  subunit. Band assignments were confirmed by the use of  $^{18}\text{O}$  labeled  $\text{SO}_2$ , and normal coordinate calcns. were used to fit the obsd. frequencies to a set of force consts. The primary S-O stretching force const.  $F$ , decreased linearly with increasing base strength of the amine, indicating the  $\text{SO}_2$  is serving as a  $\pi^*$  acceptor. The IR spectra were consistent with the theor. calcd. geometry, but an insufficient no. of product bands were obsd. to fully confirm the calcn. In addn., the 1:2 complex  $\text{SO}_2 \cdot 2\text{NH}_3$  was obsd. spectroscopically.

Di, UK &  
manipulate

(4) XI

c.A. 1984, 100, N10

$\text{SO}_2 \cdot (\text{CH}_3)_3\text{N}$

HNSO

Dom. 19222 1984

101: 12467z An ab initio study of isomerization in the cis=  
thionylimide, HNSO-cis-thiazyl S-hydroxide, HOSN system.  
Turner, Almon G. (Frank J. Seiler Res. Lab., U.S. Air Force Acad.,  
Colorado Springs, CO 80840 USA). *Inorg. Chim. Acta* 1984, 84(1),  
85-7 (Eng). The relative stabilities of HOSN and HNSO were  
studied as functions of the basis set by using ab-initio RHF-SCF-MO  
methods. The relative energies are very sensitive to the choice of  
basis set employed. The imide is the most stable form for the system  
for all basis sets of quality 3-21G\* or better.

неоп-рачем,  
узонеруал.

C.A. 1984, 101, N2

Om. 22952

1985

$H_2S_{111} NH_3$

Akagi K.,

ab initio  
param.

J. Mol. Struct., 1985,  
133, 67-82. Suppl.:  
"Theochem", 26.

$O_2SNH_3$

1985

Cachau R.E., Villar  
H.O., et al.

теор.  
расчет  
энергии  
взаимог.

An. Assoc. Quim. Argent.  
1985, 73 (3), 261-8.

(ср.  $Li^+ OH_2$ ; III)

$H_3NSO_3$

1985

4 Б1052. Роль  $d$ -функций в неэмпирических расчетах. Часть 1. Деформационные плотности  $H_3NSO_3$  и  $SO_3^-$ . The role of  $d$  functions in ab-initio calculations. Part 1. The deformation densities of  $H_3NSO_3$  and  $SO_3^-$ . Cruickshank D. W. J., Eisenstein M. «J. Mol. Struct.», 1985, 130, № 1—2: Mod. Exp. and Theor. Stud. Cryst. and Mol. Struct. Proc. Cruickshank Symp., Manchester, 11—13. Sept., 1984, 143—156. (англ.)

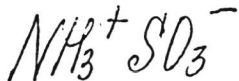
Методом ССП МО ЛКАО в различных базисах сгруппированных гауссовых ф-ций (ГФ) рассчитаны электронные строения и деформационные плотности (ДП) молекулы  $H_3NSO_3$  и иона  $SO_3^-$ . Для иона  $SO_3^-$  в каждом из рассмотренных базисов ГФ оптимизирована геометрия. При вычислении ДП использованы атомные плотности, рассчитанные неограниченным методом Хартри—Фока. Анализ зависимости полных энергий ДП и геометрических параметров от типа базиса показал, что учет  $d$ -ГФ оказывают сильное влияние на величины рассчитываемых  $\chi$ -к, причем это влияние сильнее всего зависит от учета  $d$ -ГФ на атоме S. Учет  $d$ -ГФ на атомах N и O оказывает существенно меньшее влияние на связь S—O.

И. А. Тополь

расчет  
структур

4

X. 1986, 19, №4



1985

104: 24479e Sulfamic acid in zwitterion form - an ab-initio SCF MO study. Kaliannan, P.; Vishveswara, S.; Rao, V. S. R. (Mol. Biophys. Unit, Indian Inst. Sci., Bangalore, 560 012 India). *Curr. Sci.* 1985, 54(22), 1174-6 (Eng). Ab initio LCAC-SCF-MO calcns. were carried out on the zwitterion  $\text{NH}_3^+\text{SO}_3^-$  at the RHF/STO-3G level. The mol. prefers the eclipsed arrangement (S-O cis to N-H) over the staggered arrangement by 0.7 kcal/mol and is higher in energy by ~11 kcal/mol over the neutral form. The calcd. barrier to rotation about N-S bond is 0.7 kcal/mol. Optimization stabilizes the zwitterion form by ~30 kcal/mol over the neutral form.

meopem.  
pacem  
CmafucetH, V<sub>0</sub>

C.A. 1986, 104, NY

[Om. 24066]

1986

$SO_3 \cdot NH_3$

Sass C.S., Ault B.S.,

(ик в  
матрице,  
Vi)

J. Phys. Chem., 1986,  
90, N8, 1547 - 1551.

$NH_4 HSO_4 \in [Om. 25281]$

1986

$NH_4 H_2 PO_4$

Viswanathan K., Nayar V.H.,  
et al.,

ИК, Раман.  
спектры,  
кристал.  
структура

Indian J. Pure and Appl.  
Phys., 1986, 24, N 5,  
222 - 225.

$\text{NH}_2 \text{ SO}_2$

1987

7 Б4468. Реакция радикала  $\text{NH}_2$  с диоксидом серы. Reaction of  $\text{NH}_2$  radical with sulfur dioxide / Iofe A. A., Bulatov V. P., Lozovsky V. A., Goldenberg M. Ya., Sarkisov O. M., Umanisky S. Ya. // 13th Int. Conf. Photochem., Budapest, Aug. 9—14, 1987: Abstr. Vol. 2.— S. 1., s. a.— С. 326.— Англ.

Метод внутривибрационной лазерной спектроскопии применен для изучения при  $T = 298 \pm 4 \text{ K}$  р-ций с  $\text{SO}_2$  свободных радикалов  $\text{NH}_2$ , к-рые получали путем ФТ светом  $\lambda > 190 \text{ нм}$   $\text{NH}_3$  в его смесях с  $\text{SO}_2$ . В условиях опытов р-циями свободных радикалов  $\text{SO}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{NH}_2$ ,  $\text{H}$  и  $\text{HSO}_2$  между собой можно было пренебречь. Главный процесс гибели  $\text{NH}_2$  таков:  $\text{NH}_2 + \text{SO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{NH}_2\text{SO}_2 + \text{M}$  (1), где  $\text{M} = \text{N}_2, \text{NH}_3, \text{CO}_2, \text{Ar}$ . Предельное значение константы скорости  $k_1$  при ВД равно:  $k_\infty = (1,5 \pm 0,3) \cdot 10^{-13} \text{ см}^3/\text{молекула} \cdot \text{с}$ , а при НД  $k_1 = (2,1 \pm 0,4) \cdot 10^{-31}$ ,  $(3,1 \pm 0,6) \cdot 10^{-32}$  и  $\leq 3 \cdot 10^{-33} \text{ см}^6/\text{с}$ .

(2)

Х. 1990, № 4

/молекула<sup>2</sup>·с соотв. при  $M=NH_3$ ,  $N_2$  и  $Ag$ . Методом Райса — Рамспергера — Касселя — Маркуса проведены расчеты  $k_1$  в зависимости от давл. в предположении о (сэндвичевой) структуре радикала  $NH_2SO_2$  и об отсутствии энергии активации для его образования. На основе эксперим. данных и результатов расчетов получена оценка  $25 \pm 2$  ккал/моль для энергии хим. связи  $N-S$  в радикале  $NH_2SO_2$  В. Е. Скурат

$H_2N-SO_2H$

01 28 877

1988

8 Д127. Неэмпирические расчеты амидосернистой кислоты,  $H_2N-SO_2H$ . Ab initio calculations of amido-sulfurous acid,  $H_2N-SO_2H$ . Catalan J., Paz J. L. G. de, Elguero J., Rozas I. «J. Mol. Struct. Theochem», 1988, 164, № 3—4, 335—342 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисах ОСТ-3ГФ, 4-31ГФ, ОСТ-3ГФ\* и 6-31ГФ\* исследовано электронное строение гипотетической амидосернистой кислоты,  $H_2NSO_2H$  (I). Найдены два наиболее стабильных конформера, различающиеся по энергии лишь на 0,7 ккал/моль, наиболее выгодный из которых соответствует проектированию связи S—O примерно на биссектрису угла H—N—H. Рассчитаны и проанализированы локализованные МО. Обнаружено, что расчеты с включением *d*-ф-ций позволяют корректно описать I в рамках представлений об ординарной и двойной связях SO. Подчеркнуто, что только достаточно большой базис приводит к удовлетворительным геометрическим и энергетич. характеристикам. Дипольный момент оценен в 3,36 ед. Дебая.

В. Л. Лебедев

М.Д.

ср. 1988, 18, № 8

$H_2N-SO_2H$

OM. 28877

1988

15 B1083. Неэмпирические расчеты амидосернистой кислоты  $H_2N-SO_2H$ . Ab initio calculations of amidosulfurous acid,  $H_2N-SO_2H$ . Catalan J., De Paz J. L. G., Elguero J., Rozas I. «Mol. Struct. Theorchem», 1988, 164, № 3—4, 335—342 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в четырех различных базисах — миним. ОСТ—3ГФ (Б1), Б1 с добавлением  $d$ -АО на атоме S (Б2), 4-31 ГФ (Б3), и 6-31ГФ\* (Б4) рассчитана геометрия и электронное строение амидосернистой к-ты  $H_2N-SO_2H$ . Расчет в Б1 переоценивает длину связи S—O; расчет в Б3 только частично корректирует этот недостаток. Включение в базис  $d$ -АО приводит к укорочению связи S—O, причем расчеты в

М.П.

Х. 1988, 19, N 15

базисах Б2 и Б4 дают близкую геометрию. Согласно малликеновскому анализу распределения электронной плотности и расчетам локализованных орбиталей базисы Б1 и Б3 приводят к структуре, в которой связь S—O описывается как  $S^+—O^-$ , тогда как базисы Б2 и Б4 дают описание, соотв. двойной связи  $S=O$ . Сделан вывод, что включение в базис  $d$  ф-ций необходимо для правильного описания строения гипервалентных молекул типа  $H_2N—SO_2H$ .

Н. В. Харчевникова

$H_2N \cdot SO_2H$

(Dm. 28877) 1988

108: 210547h Ab initio calculations of amidosulfurous acid ( $H_2N-SO_2H$ ). Catalan, J.; De Paz, J. L. G.; Elguero, J.; Rozas, I. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *THEOCHEM* 1988, 41(3-4), 335-42 (Eng). Four different basis sets, i.e., minimal, split-valence, without and with d functions (STO-3G, 4-31G, STO-3G\* and 6-31G\*) were used to det. the mol. structure of amidosulfurous acid. Boys localized orbitals provide a picture of the electronic distribution, particularly useful for this kind of mol. with so many lone pairs. Without d functions, the calcn. leads to an ylide picture, whereas the inclusion of d functions provides a description in terms of a S=O double bond.

ab initio  
parcm

C.A. 1988, 108, N 24

$\text{NH}_2\text{SO}_2$  | 10m. 32043 | 1989

Yoffe A.A., Bulatov V.P.  
et al.,

Журнал  
химии

N-3

Chem. Phys. Lett.,  
1989, 156, N 5,  
425- 432

$\text{NH}_2\text{SO}_2$

от 34004 1989

23 Б4960. Механизм реакции радикала  $\text{NH}_2$  с  $\text{SO}_2$  при 298 К / Иоффе А. А., Булатов В. П., Лозовский В. А., Гольденберг М. Я., Саркисов О. М., Уманский С. Я. // Хим. физ.— 1989.— 8, № 8.— С. 1078—1088.— Рус.

Методом кинетич. внутрирезонаторной лазерной спектроскопии изучена р-ция радикала  $\text{NH}_2$  с  $\text{SO}_2$  при комн. т-ре. Показано, что р-ция протекает с образованием радикала  $\text{NH}_2\text{SO}_2$ :  $\text{NH}_2 + \text{SO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{NH}_2\text{SO}_2 + \text{M}$ , где  $\text{M} = \text{N}_2, \text{NH}_3, \text{CO}_2, \text{Ar}$ . Определены константы скорости р-ции в пределе низких и высоких давл.:  $k_0 \text{N}_2 = (3,1 \pm 0,6) \cdot 10^{-32} \text{ см}^6 \cdot \text{молекула}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $k_0 \text{NH}_3 = (2,1 \pm 0,4) \cdot 10^{-31} \text{ см}^6 \cdot \text{молекула}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $k_\infty = (1,5 \pm 0,3) \cdot 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ . В предположении «сэндвичевой» структуры  $\text{NH}_2\text{SO}_2$  проведен расчет по теории РРКМ зависимости константы скорости от давл. Сравнение расчетных и эксперим. зависимостей позволило определить энергию разрыва связи N—S в радикале  $\text{NH}_2\text{SO}_2$ .

Резюме

Журнал  
радикала  
связи  
N-S

Х. 1989, N 23

$H_2N-SO_2-NH_2$

1989

16 Б1096. Исследование конформации (барьеров вращения и инверсии) и электронных свойств сульфамида методом молекулярных орбиталей. A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide / Mo O., de Paz J. L. G., Yáñez M., Alkorta I., Elguero J., Goya P., Rozas I. // Can. J. Chem.— 1989.— 67, № 12.— С. 2227—2236.— Англ.; рез. фр.

Неэмпирическим методом в базисе 6—31 ГФ\* при геометриях, оптимизир. в базисе ОСТ—3 ГФ\*, исследо-

М.П.

X.1990, N16



ваны барьеры вращения и инверсии на атоме молекулы сульфамида  $\text{H}_2\text{N}-\text{SO}_2-\text{NH}_2$ . Наиболее стабилен конформер с противоположно направленными вершинами пирамидальных  $\text{NH}_2$ -групп ( $\Phi_1=0$ ,  $\Phi_2=180^\circ$ ), несколько выше лежат структуры с  $\Phi_1=\Phi_2=180^\circ$  и  $\Phi_2=\Phi_2=0^\circ$ , а также  $\Phi_1=\Phi_2=30^\circ$ . Барьер перехода из глобального минимума к первым двум структурам равен соотв. 7,7 и 3,7 ккал/моль, что соотв. происхождению барьера за счет отталкивания протонов аминогрупп. Слабое сопряжение между  $\text{SO}_2$  и аминогруппами выражено пирамидальной структурой последних. Барьеры инверсии на атомах азота не превышают 2,8 и 3,7 ккал/моль для одиночной и одновременной инверсии (в базисе 6—31 ГФ\*). Базис ОСТ—3 ГФ\* правильно предсказывает глобальный минимум, но изменяет порядок следования др. конформеров. Базис 3—21 ГФ\* предсказывает только один стабильный конформер с почти чистой  $sp^2$ -гибридизацией атомов азота. Предложено использовать единичный расчет в базисе 3—21 ГФ\* на оптимизир. в базисе ОСТ—3 ГФ\* геометрии. В. А. Болотин

N-S-O-H con.

(SO<sub>2</sub> - NH<sub>2</sub>) ?

1989

112: 43050q A molecular orbital study of the conformation (inversion and rotational barriers) and electronic properties of sulfamide. Mo, Otilia; De Paz, Jose L. G.; Yanez, Manuel; Alkorta, Ibon; Elguero, Jose; Goya, Pilar; Rozas, Isabel (Dep. Quim., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *Can. J. Chem.* 1989, 67(12), 2227-36 (Eng). Ab initio calcns. have been used to study the conformational potential surface of sulfamide, by considering the S-N bond rotations and the nitrogen inversion processes. The lowest energy conformation (b) is found for a cis-trans arrangement of the amino groups, although conformations with cis-cis (a),

prerem

C.A. 1990, 112, N 6

trans-trans (c), and near staggered (c') arrangements have similar energy. Nitrogen inversion barriers are very low, and consequently one may expect forms b and c' to be the only ones present the gas phase. Conformer a is very polar, its dipole moment being twice that of b, so it may be favored in condensed media or in polar-solvent solns. The relative stability of the different isomers is governed by interactions between the amino protons and between the nitrogen pairs. Our results show that d- $\pi$  backbonding, involving the d orbitals on sulfur, is responsible for the multiple bond character of the S-O linkage, but is very small in the S-N interactions. The role of the sulfur d-orbital exponent, when a 6-31G\* basis is used, is analyzed on a series of model compds. contg. S<sup>II</sup>, S<sup>IV</sup>. Although the inclusion of d functions on sulfur is crucial to describing correctly the bonding in sulfamide, the results obtained do not change appreciably if a second set of d functions is centered on sulfur. Nevertheless, only when polarization functions are also included for first-row atoms is the description of the system reliable.

$^+H_3NO_3^-$  [Dm. 33 568]

1990

Hickling S. J., Woolley R. G.,  
Chem. Phys. Lett.,  
1990, 166, N1, 43-48.

An ab initio Hartree-Fock  
study of the  Zwitterion

of Sulphamic acid,  
 $+H_3NSO_3^-$

$\text{NH}_2\text{-SHO}$

1990

Sabio M.; Topiol Sid.

J. Mol. Struct. Theorchem.

1990, 206, N 3-4, C.

335-357.

(cell   $\text{NH}_2\text{-SH}$ ; III)

$\text{H}_2\text{NSO}_3^-$

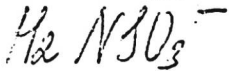
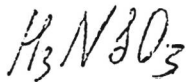
1991

№ 23 Б1200. Геометрия и частоты аминосерной кислоты  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$  и сульфаматного аниона  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ . Ab initio geometries and frequencies for aminosulphuric acid,  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$ , and the sulphamate anion,  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$  / Wolley R. G. // J. Mol. Struct. Theochem.—1991.—228.—С. 329—333.— Англ.

М.П.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисных наборов 3—21 ГФ\* и 6-31 ГФ\*\* проведены расчеты электронного и геометрич. строения и частот колебаний аминосерной к-ты  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$  и сульфаматного аниона  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ . Табулированы — рассчитанные в обоих базисах значения геометрич. параметров, полных энергий, зарядов на атомах, дипольных моментов и частот колебаний. Показано, что в противоположность проведенным ранее исследованиям сульфаминовой к-ты в жидк. и тв. состояниях в газ. фазе форма  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$  на 0,01 ат. ед./моль более стабильна, чем цвиттер-ион  $\text{H}_3\text{NSO}_3^+$ . Обсуждено различие в частотах колебаний  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$  и аниона  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ . И. Н. Сенченя

Х. 1991, № 23



М.П.

ср. 1991, № 11

1991

11 Д131. Неэмпирические геометрии и частоты для  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$  и  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ . Ab initio geometries and frequencies for aminosulphuric acid,  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$ , and the sulphamate anion,  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$  / Woolley R. G. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1991.— 228.— С. 329—333.— Англ.

Методом ССП выполнены расчеты геометрич. структуры, энергий и частот колебаний для молекулярных систем  $\text{H}_3\text{NSO}_3$  (I),  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$  (II) и  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ . Найдено, что в противоположность общепринятому взгляду, базирующемуся на структурных исследованиях в водных растворах и твердой фазе, форма II оказалась более стабильной, чем цвиттерионная форма I. Отмечено, однако, что результаты, полученные в данной работе, относятся фактически к газовой фазе и не учитывают межмолекулярные электростатич. эффекты, присутствующие в конденсированной фазе и стабилизирующие там цвиттерионную форму. Найдено также, что переход атома Н с одного конца молекулы на другой при трансформации I→II сопровождается значительным сокращением длины связи S—N (0,37 Å), что приводит к увеличению частоты внутреннего вращения.

А. И. К.



1991



115: 99700f Ab initio geometries and frequencies for aminosulfuric acid,  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$ , and the sulfamate anion,  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ . Woolley, R. G. (Dep. Chem. Phys., Nottingham Polytech., Nottingham, UK NG11 8NS). *THEOCHEM* 1991, 74, 329-33 (Eng). Aminosulfuric acid,  $\text{H}_2\text{NSO}_2(\text{OH})$ , and the sulfamate anion,  $\text{H}_2\text{NSO}_3^-$ , were studied using the 3-21G\* and 6-31G\*\* basis sets at the SCF level of ab initio theory. Contrary to aq. soln. and solid state structural studies, we found the aminosulfuric acid form of sulfamic acid to be more stable than the zwitterion,  $\text{H}_3\text{NSO}_3$ , by 0.01 hartree per mol; this prediction refers to sulfamic acid in the gas-phase.

смафунъН.  
расем



C. A. 1991, 115, ~ 10

$(\text{HSN})_3$

1994

Nyulaszi Laszlo,  
Karpati T. et al.

сеуабсав-  
носев

J. Am. Chem. Soc.

1994, 116 (16), 7239-  
- 42.

(сер.   $(\text{HNSi})_3$ ; III)

HSH-NH<sub>3</sub>

1995

122: 274505q Proton interchange tunneling and internal rotation in HSH-NH<sub>3</sub>. Hilpert, G.; Fraser, G. T.; Suenram, R. D.; Karyakin, E. N. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(11), 4321-8 (Eng). An elec.-resonance optothermal spectrometer and phase-locked backward-wave oscillators are used to investigate the b type,  $\Delta K = \pm 1$ ,  $\Delta m = 0$  spectrum of the hydrogen-bonded HSH-NH<sub>3</sub> and H<sup>34</sup>SH-NH<sub>3</sub> complexes near 300 GHz. The spectrum is characterized by nearly free internal rotation of the NH<sub>3</sub> subunit against the H<sub>2</sub>S, as initially concluded from Stark-effect measurements by Herbine, et al., [*J. Chem. Phys.* 93, 5485 (1990)]. Transitions are obsd. for the  $K = 1 \leftarrow 0$ ,  $m = 0$ , A symmetry and the  $K = 0 \leftarrow \pm 1$  and  $K = \pm 2 \leftarrow \pm 1$ ,  $m = \pm 1$ ,  $K_m > 0$ , E-symmetry subbands. The transitions are split into doublets with a 3:1 relative intensity ratio indicative of tunneling interchange of the two H<sub>2</sub>S protons. The obsd. selection rules, sym.  $\leftrightarrow$  antisym. in the tunneling state, indicate that the tunneling motion reverses the sign of the mol. elec. dipole moment component along the b inertial axis. The most likely interchange motion consists of a partial internal rotation of the H<sub>2</sub>S unit about its c inertial axis, through a bifurcated, doubly hydrogen-bonded

Hymp. Pra-  
UgeHue,  
D<sub>2</sub>, V<sub>0</sub>

C.A. 1995, 122, N22

transition state. The proton interchange tunneling splittings of 859–864 MHz vary little between K and m states, indicating that the interchange motion is only weakly coupled to the internal rotation. The barrier to proton interchange is detd. to be 510(3)  $\text{cm}^{-1}$ , which can be compared to the  $\sim 700 \text{ cm}^{-1}$  barrier estd. from the 57 MHz tunneling splittings assocd. with the  $\text{H}_2\text{O}$  proton interchange in the related  $\text{HOH-NH}_3$  complex. The observation of dissocn. of  $\text{HSH-NH}_3$  following excitation of the  $\text{NH}_3$  umbrella mode with a line-tunable  $\text{CO}_2$  laser places an upper bound of 992  $\text{cm}^{-1}$  on the hydrogen-bond zero-point dissocn. energy. The band origin for the umbrella vibration of 992.5(1)  $\text{cm}^{-1}$  is blue-shifted by 43  $\text{cm}^{-1}$  from the hypothetical inversion-free band origin of uncomplexed  $\text{NH}_3$ . Previous studies have shown that the  $\text{HOH-NH}_3$  binding energy is greater than 1021  $\text{cm}^{-1}$ .

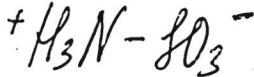
HN30

1995

123: 353256h Vibrational analysis of thionylimide and its isotopes. Kamaraj, V. (Dep. Phys., Anna Univ., Madras, 600 025 India). *Bull. Soc. Chim. Belg.* 1995, 104(9), 537-40 (Eng). The potential energy consts. of HNSO, DNSO and H<sup>15</sup>NSO were evaluated using Cyvin's W-matrix method employing the General Valence Force Field. Making use of these consts., the mean-square amplitudes of vibration, the Coriolis coupling consts. and centrifugal distortion consts. also were evaluated and presented here.

(C.M. NCM,  
Vi)

C.A. 1995, 123, N 26



(38379)

1996

124: 355107e Structure and Bonding of the Sulfamic Acid Zwitterion: Microwave Spectrum of  $^+\text{H}_3\text{N}-\text{SO}_3^-$ . Canagaratna, M.; Phillips, J. A.; Goodfriend, H.; Leopold, K. R. (Department of Chemistry, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1996, 118(22), 5290-5295 (Eng). The donor-acceptor complex formed from  $\text{NH}_3$  and  $\text{SO}_3$  was obsd. in the gas phase by pulsed nozzle Fourier transform microwave spectroscopy. The adduct has the expected  $\text{C}_{3v}$  geometry in which the N is bonded to the S. The N-S bond length is 1.957(23) Å and the NSO angle is 97.6(4)°. The complex is the gas-phase form of the zwitterion which constitutes solid sulfamic acid, but the obsd. structure differs significantly from the results of previous x-ray and neutron diffraction work on the crystal. The N-S distance is 0.186-(23) Å longer in the gas phase and the NSO angle is 4.9(4)° smaller. The obsd. structure suggests that the dative bond is only partially formed in the isolated complex. Anal. of the N quadrupole coupling const. supports this conclusion, indicating that -0.36 electron is transferred upon formation of the complex. The nature of the gas-phase adduct suggests that significant structural and electronic changes may occur within  $^+\text{H}_3\text{N}-\text{SO}_3^-$  monomer units during the early phases of homogeneous nucleation.

УВ сирм  
Смрхмрх  
Нарамрх

C. A. 1996, 124, N26

$\text{NH}_4\text{SO}_2\text{F}$

1997

Kornath, Andreas;  
et al.,

lek u CPP,  
re

Inorg. Chem. 1997, 36  
(24), 5570-73

(all.  $\text{KSO}_2\text{F}$ ;  III)

H<sub>2</sub>NS

1998

48 стр.,  
стр. 129-  
130.

129: 237019h Microwave spectrum and molecular structure of the H<sub>2</sub>NS radical. Habara, Hideta; Yamamoto, Satoshi; Saito, Shuji (Department of Physics and Research Center for the Early Universe, The University of Tokyo, Bunkyo-ku, Tokyo, Japan 113-0033). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(7), 2700-2707 (Eng), American Institute of Physics. The rotational spectral lines of the H<sub>2</sub>NS and D<sub>2</sub>NS radicals in the X<sup>2</sup>B<sub>1</sub> electronic ground state are obsd. with a source-modulation microwave spectrometer and a Fourier-transform microwave spectrometer. Mol. consts. including hyperfine interaction consts. are detd. for H<sub>2</sub>NS and D<sub>2</sub>NS by a least-squares method. By using the obtained centrifugal distortion consts. and inertial defects, the harmonic force field is evaluated, and the frequency of the  $\nu_4$  vibrational mode (out of plane) is 325 cm<sup>-1</sup>. This value is much smaller than that of the related mol. H<sub>2</sub>CS, indicating a floppy motion along the out-of-plane mode. The zero-point vibrational av. structure was detd. as follows;  $r_2(\text{N-H})=1.000(5)$  Å,  $r_2(\text{N-S})=1.6398(13)$  Å, and  $\angle_2(\text{HNH})=118.9(7)^\circ$ , where the nos. in parentheses represent three times the std. deviation.

C.A. 1998, 129, N 18

$(\text{N}_3(\text{O})\text{F})_3$

[Dm. 40369]

1998

non-  
cyclic

Ralph Haist, Heinz Oberham-  
mer et al.,

J. Fluor. Chem. 1998, 89, 51-54

Solid state and gas phase  
structure of cis--sulfamic

fluoride  $(\text{Nb}(\text{O})\text{F})_3$ .



$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$   
p-p

Rudolph, Wolfram W., 1998

ber Minsen - les 1998,

102(2), 183 - 196

CKP, UK,  
MERNOS  
CO-12

Pen.  $\text{CdSO}_4$ ; I

$(\text{NH}_4)_2 \text{SO}_4$   
(p-p)

Rudolph, Wolfram W,

1998

Ber. Bunsen - Ges. 1998.  
102: (2), 183-196

CKP, UK,  
memos  
cb-ta

(cu.  $\text{CdSO}_4$   ; -I)

1998

SO<sub>2</sub>-HNO<sub>3</sub>  
SO<sub>2</sub>-HONO

129: 3387Sc Infrared matrix isolation and theoretical studies of SO<sub>2</sub>-HNO<sub>3</sub> and SO<sub>2</sub>-HONO systems. Wierzejewska, Maria; Mielke, Zofia; Wieczorek, Robert; Latajka, Zdzislaw (Faculty Chem., Univ. Wroclaw, 53-343 Wroclaw, Pol.). *Chem. Phys.* 1998, 228(1-3), 17-29 (Eng), Elsevier Science B.V.. Ar matrix IR spectra SO<sub>2</sub> complexes with HNO<sub>3</sub> indicate formation of H-bonded structures. The red shifts of the OH stretching modes are equal to -179, 51, and 40 cm<sup>-1</sup> in SO<sub>2</sub>-HNO<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>-HONO-trans, and SO<sub>2</sub>-HONO-cis complexes, resp. Theor. studies of the structure and spectral characteristics of the title complexes were carried out on the electron correlation level with 6-31 G(d) basis set. For all studies systems only 1 stable structure was found with the OH group interacting with 1 O atom of the SO<sub>2</sub> mol. The calcd. IR spectra reproduce well the frequencies and the intensities of the measured spectra.

uk 8  
MAMPUCSE  
Vi

C.A. 1998, 129, N 3

$N_2 \cdot H_2SO_4$

Givan, Aharon; et al., 1999

Phys. Chem. Chem. Phys.

1999, 1(1), 37-43

uk  
chemp

(Chem. NO. ● #20, III)

Se(N3O)2 [Om. 40 133] 1999

Konstan-  
Camp Romano R.M., Della Vedo-  
va C.O.,

J. Mol. Struct., 1999,  
477, 159-173.

( $\text{N}_2\text{O}$ )<sub>2</sub>· $\text{SO}_2$

2000

133: 10385h ( $\text{N}_2\text{O}$ )<sub>2</sub>· $\text{SO}_2$ : Rotational spectrum and structure of the first van der Waals trimer containing sulfur dioxide. Peebles, Rebecca A.; Kuczkowski, Robert L. (Department of Chemistry, University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109-1055 USA). *J. Chem. Phys.* 2000, 112(20), 8839-8846 (Eng), American Institute of Physics. The trimer ( $\text{N}_2\text{O}$ )<sub>2</sub>· $\text{SO}_2$  was studied by Fourier transform microwave spectroscopy. The rotational consts. for the normal species are  $A = 1369.1014(11)$  MHz,  $B = 1115.5816(11)$  MHz, and  $C = 730.5790(4)$  MHz. Five isotopomers of the complex were studied, allowing a detn. of its structure. The configuration aligns the centers-of-mass of the three monomers in an approx. equilateral triangle. The monomers twist relative to this plane so that the two  $\text{N}_2\text{O}$ 's are intermediate between T-shaped and crossed rather than the usual slipped-parallel planar. The  $\text{SO}_2$  is oriented so that its oxygens are straddling one  $\text{N}_2\text{O}$  (similar to the  $\text{N}_2\text{O}$ · $\text{SO}_2$  dimer), while its S is closest to the O end of the other  $\text{N}_2\text{O}$ . The dipole moment of ( $^{15}\text{N}_2\text{O}$ )<sub>2</sub>· $\text{SO}_2$  was measured, giving  $\mu_a = 0.606(1)$  D,  $\mu_b = 1.256(2)$  D,  $\mu_c = 0.058(2)$  D, and  $\mu_{\text{total}} = 1.396(2)$  D. A semiempirical model was used to predict the trimer structure, and comparison is made with this model as well as with the dimer  $\text{N}_2\text{O}$ · $\text{SO}_2$ .

Фурье спектроскопия  
и структура.  
(FTMW)  
модель.

C.A. 2000, 133, N1