

\$02



11-199

1922

Bergstrom

2.J.Phys.Chem.26, 358 (1922)

SO₂; $T_m, \Delta H_m$

SO₃; $T_m, \Delta H_m$

$T_s, \Delta H_s$

$T_b, \Delta H_b$

Circ. 500

K

egb op. 1

11 - 1399

1930

SO₂ (ω; 75-0; 70-0; 4080)

Bailey C.R., Cassie A.E.D., Angus W.R.
Proc. Roy. Soc. (London) 1930, A130,
142-56

"The absorption spectrum of
sulfur dioxide"

C.A., 1931, 641

11400

SO₂ (ν)

1930

Bailey C.R., Cassie A.B.D., Angus W.R.
Nature 1930, 126, 59

"Infra-red absorption spectrum
of sulfur dioxide

C.A., 1930, 5230

1930

ω (SO₂)

Bhagavantam S.

Indian J. Physics 1930, 5,
35-48,

"Raman spectra of some elements
and simple compounds"

C.A., 1930, 5131

19312. (502)
W. Tinkelnburg, H. J. Schumacher

referred
207c

Z. Phys. Chem. Bodensteinfestung

p 704 (1931)

11390

SO₂ (γ)

1931

Watson Wm.W., Parker A.E.

Phys.Rev. 1931, 37, 1484-92

"The ultra-violet absorption
spectrum of sulfur dioxide"

C.A., 1931, 5092

II-1405
SO₂ (ν , ν_{0-0} ; $\angle$)

1932

Dadien A., Kohlrausch K.W.F.

Physik Z. 1932, 33, 165-72

"Raman effect and molecular
structure of some simple inorganic
substances

C.A., 1932, 2655

111403

SO₂ (D)

1932

Franck J., Sponer H., Teller E.

Z.physik.Chem. 1932, B18, 88-101

"Predissociation spectra of
triatomic molecules"

C.A., 1932, 4753

SO₂ Nature no, 847 (1932)

обсуждается процесс гниения
и, связанный со спектром

2000 - 2500 Å

Вращающ. стр-ра молекул. поглощению
при 1900 Å. Это предположительно
связано с гниением & SO₂
→ SO и O₂ и т.д. и т.д. и т.д.
было показано (Франк)
Многие и Гилберт (L. Phys. Chem)

В, 18, 88, 1932. При минимальной
давлении не исчерпано многого Жид-
кости диссоциирующей, однако
при 450°C и $p = 1.5 \text{ мм.}$, Спектр
почти полностью исчезает. SO_2
почти полностью исчезает
совершенно различным след.
показ. между $2850 - 2570 \text{ см}^{-1}$
коб. идентично с хорошо
известной SO_2 -системой и сильно

SO₂ Nature 180, 877 (1950)
сарабоинские)

и в обл. 1800 - 1650 °, каб. такие
суде по ^{интервал} коштад. газоб. 725 см³ / урния.

S₂ м. ие. При той же т-ре,
но 4,5 мм как SO₂, так и S₂

суд. каб. л. После окисления
кросви. незначительные SO₂ коюса
как и до нагревания.

Итак, предполож. газоб. кислос. SO₂
в 1/2 S₂ + O (сильно пошл. O₂

при 1 м 52 мм кр. симметрич. склад, это
наблюдается в 5 см. трубе.

Давнее изд. слабые неточные
расширения и диссон. 502
от Трм. Счета лансы
(так одно тра не может вызвать
диссон) и так Трмо - Орт -
вскосе диссон. 502.

Неб. аномия аек. тра, неб. условия
Женеринский. Начало переведено дос.

SO₂

Bp - 7063-II
~~Bp~~ - 1375-II

1933

Chow

T - Ch;

Phys. Rev., 1933, 44
638-43

II-1454

SO₂ (2050)

1933

Jonescu A.

Compt.rend.1933, 196, 1476-8

"The fine structure of the
absorption bands of sulfur dioxide
in the ultra-violet"

C.A., 1933, 4171

SO₂ Collins and Price 1934.

Rev. Sci. Instrum. 5, 423 (1934).

On the absorption of
ultra-violet light
by SO₂.

412

A.G. Gaydon

SO₂CO₂?Proc. Roy. Soc 146A, 901 (1934)Смесь полевых газов SO₂

удерживается между 2400-6000 Å
и обнаружено, что они состоят
из 20 диатомических молекул.
наиболее в об. 3828-4699 Å
3900-8400 Å континуум от 2400 Å-4000 Å

и ил дитт штерва ил 11404
520 (чи ош. сост) и 265 дитт
ишисю вур. Отисеише иш.
квандовне ишисю иш иш предвур
отисеише ишисю. сѣ Qдо 3.

II-1450

1934

$H_2, N_2, CO, C_2, CO_2, CH_4,$

$HCl, Cl_2, \underline{SO_2}, HCN, C_2N_2, O_2$ (Е образований)

Savard J.

Compt. rend. 198, 751-3,

J. phys. radium 5, 27-36. (1934)

"Ionization potential and
energies of formation of non-polar
molecules"

C.A., 1934, 2582³

M

SO₂ (w)

II 1458

1935

Clements J. H.

Phys. Rev. 1935, 47, 224-32

"The absorption spectrum of
sulfur dioxide" 2

AD

C.A., 1935, 2084⁸

II-1459

ω (SO_2)

1935

Duncan A.B.F.

J.Chem.Physics 1935, 3, 384-5

"The vibrations of polyatomic
molecules in excited electronic
states"

C.A., 1935, 5743⁶

SO_2 (2s-o ; L^{OSO}) Π -1472 1935
 CS_2 (2c-s)
 COS (2c-o ; 2c-s)

Gross I. C., Brockway L. O.

J. Chem. Physics 1935, 3, 821-4

"The molecular structure of

HO

1-3

C.A., 1936, 663²

sulfur dioxide; carbon disulfide and
carbonyl sulfide."

SO₂ (w)

1471-11

1936

Gerding H., Nijveld W. J.

Nature 1936, 137, 1070

Raman spectrum of gaseous and
liquid sulfur dioxide and its solutions
in water"

2

10

c.a., 1936, 5887 1

SO₂

BGP-7094-II

1938

Piargue W.F.
et al.

гроздья
(соединения)

J. Amer. Chem. Soc.
1938, 60, 1389-94

J (SO₂; CS₂; CS₂⁺) π-1521

1938

Price W.C., Simpson D.M.

Proc. Roy. Soc. (London) 1938, A 165, 272-91

"The absorption spectra of sulfur dioxide and carbon disulfide in the vacuum ultraviolet"

HO



C.A., 1938, 53036

SO₂

om-20263

1984

5 Д57. Полуклассические собственные значения колебательной энергии для трехатомных молекул: применение метода БФП для молекул SO₂, H₂O, H₃⁺ и CO₂. Semiclassical vibrational eigenvalues of triatomic molecules. Application of the FFT method to SO₂, H₂O, H₃⁺, and CO₂. Eaker Charles W., Schatz George C. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 5, 2394—2399 (англ.)

Для полуклассич. расчета собств. значений колебат. энергии трехатомных молекул разрабатывается и практически применяется метод быстрого фурье-преобразования (БФП). Метод применяется к молекулам SO₂, H₂O, H₃⁺ и CO₂ для нулевых значений вращательного квантового числа. Гамильтониан записывается в терминах нормальных или декартовых координат, а поверхности потенц. энергии представляются разложением по степеням отклонений межъядерных расстояний и угла между связями от равновесных значений. Коэф. разложений определяются либо из неэмпирич., либо из полуэмпирич. данных. Суть БФП метода состоит в пред-

М.П.

43

сф. 1985, 18, N5

ставлении координат и импульсов, определяющих действие системы (а следовательно, и уровни энергии) в виде рядов Фурье. Показано, что точность рассчитанных для SO_2 и H_2O колебательных уровней эквивалентна точности других полуклассич. методов; а величины рассчитанных энергий для H_3^+ и CO_2 являются по существу новыми, т. к. ранее полуклассич. метод не применялся к этим молекулам ввиду трудностей, связанных со свойственными им 1:1 и 2:1 резонансами. Отмечается хорошее совпадение полученных полуклассич. данных с результатами квантовых расчетов.

А. А. Зембеков

SO₂

от. 20263 1984

7 Б1082. Квазиклассические колебательные энергии трехатомных молекул. Применение метода быстрого преобразования Фурье к молекулам SO₂, H₂O, H₃⁺ и CO₂. Semiclassical vibrational eigenvalues of triatomic molecules: Application of the FFT method to SO₂, H₂O, H₃⁺, and CO₂. Eaker Charles W., Schatz George C. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 5, 2394—2399 (англ.)

Развитый авторами метод быстрого преобразования Фурье применен к расчету квазиклассич. колебательных уровней энергии трехатомных молекул SO₂, H₂O, H₃⁺ и CO₂ для состояний с нулевым значением углового момента. Метод основан на использовании приближения Сорби для колебательных фазовых интегралов и вычислении последних методом быстрого преобразования Фурье. Результаты для пяти нижних колебательных состояний молекул SO₂ и H₂O не уступают по точности др. квазиклассич. результатам. Квазиклассич. колебательные уровни энергии для молекул H₃⁺ и CO₂ полу-

расчет ξ_i ,
М.П.

17
(42)

Х. 1985, 19, 47

чены впервые. Найдено, что они удовлетворительно согласуются с результатами полного квантовомех. расчета. Отмечено, что вычислительное время предложенным методом растет пропорционально первой степени числа нормальных колебаний в отличие от третьей степени для обычных квантовомех. методов.

В. Б. Павлов-Веревкин



562

[Am. 18474]

1984

6 Л187. Спектроскопия полосы E молекулы SO_2 с использованием лазера на красителе с удвоением частоты. Spectroscopy of the E band of SO_2 with a frequency-doubled single-mode dye laser. Fischer A., Kullmer R., Demtröder W. «Chem. Phys.», 1984, 83, № 3, 415—428 (англ.)

С использованием непрерывного одномодового лазера на красителе с удвоением частоты получен спектр поглощения полосы E ($\nu = 32\,720\text{—}32\,900\text{ см}^{-1}$) молекулы SO_2 в охлажденной кювете ($T = 190\text{ K}$) с разрешением, ограниченным доплеровским уширением (1,2 ГГц). В спектре идентифицировано >400 линий. Идентификация ряда других линий затруднена вследствие наличия возмущений в возбужденном состоянии. Выполнен колебательно-вращательный анализ спектра и определены молекулярные постоянные SO_2 в верхнем состоянии. В результате сопоставления спектра при $T = 190\text{ K}$ со

спектр

ср. 1984, 18, № 6

спектром очень высокого разрешения, полученном при использовании коллимированного сверхзвукового молекулярного пучка, ($\Delta\nu_{\text{допл}}=150$ МГц), установлено, что фактич. плотность уровней в первом случае делает недостаточным разрешение эксперим. установки.
Библ. 23. В. А. Елохин

SO₂

[Om. 18474]

1984

100: 111415s Spectroscopy of the E band of sulfur dioxide with a frequency-doubled single-mode dye laser. Fischer, A.; Kullmer, R.; Demtroeder, W. (Fachbereich Phys., Univ. Kaiserslautern, D-6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys.* 1984, 83(3), 415-28 (Eng). The rotational structure of the E band of SO₂ between 32,720 and 32,900 cm⁻¹ was investigated by absorption spectroscopy with reduced Doppler width in a cooled cell at 190 K using a frequency-doubled continuous-wave single-mode dye laser. More than 400 lines in this band could be assigned, starting from a former partial anal. Severe perturbations in the upper state impede the assignment and prevent the unambiguous identification of many other lines in the spectrum. From the measured lines, term values and mol. consts. of the upper levels were derived. A comparison with spectra of very high resoln., taken in a collimated supersonic SO₂ beam demonstrates that the actual line d. is by far higher than the spectral resoln. in the cooled cell.

Гранулам -
Смесь

C.A. 1984, 100, N14

SD₂

От. 18896

1984

21 Б1107. Исследование сродства SO₂ к электрону методом потока послесвечения. Flowing afterglow studies of the electron affinity of SO₂. Grabowski Joseph J., Van Doren Jane M., DePuy Charles H., Bierbaum Veronica M. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 575—577 (англ.)

Методом потока послесвечения исследованы р-ции переноса электрона на SO₂ ($A^- + SO_2 \rightarrow A + SO_2^-$) с 11 различных анионов, имеющих сродство к электрону в диапазоне 0,44—2,317 эВ, а также р-ции типа $B + SO_2^- \rightarrow B^- + SO_2$ для $B = SO_2, O_2$. На основании анализа результатов для сродства к электрону SO₂ получено значение 1,1 эВ.

Н. Николаев

Ae;

X. 1984, 19, № 21

SO₂

Om. 18896 1984

8 Д215. Исследование сродства SO₂ к электрону в продуктах тлеющего разряда. Flowing afterglow studies of the electron affinity of SO₂. Grabowski Joseph J., Van Doren Jane M., DePuy Charles H., Bierbaum Veronica M. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 1, 575—577 (англ.)

Процессы $A^- + SO_2 \rightarrow A + SO_2$ (I) и $B + SO_2^- \rightarrow B^- + SO_2$ (II) изучены в проточном реакторе, на входе в который осуществлялось смешение заряженных продуктов тлеющего разряда и исходной нейтральной компоненты. Перечислены II анионов A⁻, для которых величина сродства к электрону (EA) заключена в пределах от 1,4 до 2,4 эВ и процесс I практически не наблюдается. Указано три аниона с $0,44 < EA < 0,57$ эВ, для которых отмечается высокая скорость процесса I и $A^- = H_2P^-$ (EA = 1,27 эВ), соответствующий очень низкой скорости I: $k_1 = 9 \cdot 10^{-12}$ см³/с. Процесс II наблюдался для $B = O_2(^1\Delta_g)$ и $O(^3P)$, у которых $EA \approx 1,4$ эВ. Приведен-

Ac;

ср. 1984, 18, № 8

ная сводка результатов свидетельствует о том, что $EA(SO_2) \approx 1,1$ эВ, но не 2,2 эВ, как было получено из эксперимента по методу ион-циклотронного резонанса, обсуждаются возможные причины получения более высокого значения $EA(SO_2)$ последним методом.

Г. А. Вомпе

SO₂

Om. 18896)

1984

' 100: 74307k Flowing afterglow studies of the electron affinity of sulfur dioxide. Grabowski, Joseph J.; Van Doren, Jane M.; DePuy, Charles H.; Bierbaum, Veronica M. (Dep. Chem., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(1), 575-7 (Eng). The electron affinity (1.1 ± 0.1 eV) of SO₂ was detd. from flowing-afterglow and selected-ion-flow-tube measurements involving electron-exchange reactions of (a) SO₂ with O₂⁻, Me₂N⁻, and H₂N⁻, and (b) SO₂ with O₂(¹Δ_g), and O(³P).

(Ar)

C.A. 1984, 100, N10

SO₂

1984

4 Л180. Анализ полученного с фурье-преобразованием спектра поглощения SO₂ в области полосы $\nu_2 + \nu_3$.
(Analysis of the Fourier-transform SO₂ absorption spectrum in the $\nu_2 + \nu_2$ band. Guelachvili G., Naumenko O. V., Ulenikov O. N. «Appl. Opt.», 1984, 23, № 17, 2862—2867 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получен спектр ИК-поглощения газообразной SO₂ в области полосы $\nu_2 + \nu_2$ с разрешением 0,005 см⁻¹. Измерены частоты колебательно-вращательных линий. С привлечением литературных данных для основного состояния молекулы из эксперим. частот определены энергии 433 колебательно-вращательных уровней энергии в состоянии молекулы 011. Для анализа спектра использован гамилтониан Уотсона. Найдены колебательная частота $\nu_0 = 1875,79751$ см⁻¹, вращательные постоянные и константы центробежного искажения молекулы. Приведена таблица энергетич. уровней.

М. В. Т.

Vi, M. N;

сф 1985, 18, №4.

SO₂

Om. 19819

1984

101: 218800m Analysis of the Fourier-transform sulfur dioxide absorption spectrum in the $\nu_2 + \nu_3$ band. Guelachvili, G.; Naumenko, O. V.; Ulenikov, O. N. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91450 Orsay, Fr.). *Appl. Opt.* 1984, 23(17), 2862-7 (Eng). The Fourier-transform SO₂ absorption spectrum in the $\nu_2 + \nu_3$ band was analyzed by using J. K. G. Watson's (1967) Hamiltonian. A total of 433 vibration-rotation energy levels with $J(\text{max}) = 50$ and $K_1(\text{max}) = 16$ were detd. from the exptl. data. These energy levels are listed and the values of the parameters obtained from fitting the exptl. data and 95% confidence intervals for these parameters are given.

($\nu_2 + \nu_3$)



c. A. 1984, 101, 424

SO_2

от. 20418

1984

7 Б1184. Анализ полос поглощения ν_1 и ν_3 $^{32}S^{16}O_2$.
Analysis of the ν_1 and ν_3 absorption bands of $^{32}S^{16}O_2$.
Guelachvili G., Ulenikov O. N., Ushakova G. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 108, № 1, 1—5
(англ.)

С высоким разрешением (вакуумный фурье-интерферометр $\sim 0,005 \text{ см}^{-1}$) измерена вращательная структура полос ν_1 (B-типа) и ν_3 (A-типа) в спектре поглощения $^{32}S^{16}O_2$ (область $1055\text{—}2000 \text{ см}^{-1}$). Значения молекул. постоянных (в см^{-1}) ν , A , B , C , Δ_k (10^{-5}), Δ_{jk} (10^{-6}), Δ_j (10^{-7}), δ_k (10^{-7}), δ_ν (10^{-8}), H_k (10^{-8}), H_{kv} (10^{-10}):
основное состояние — 0; 2,0273653; 0,3441747;
0,2935269; 8,634805; —3,8429; 2,1933; 8,2676; 5,611;
1,136370; —2,6518, $H_\nu = 1,323 \cdot 10^{-13}$, $h_k = 2,951 \cdot 10^{-10}$;
состояние 100—1151,71299; 2,0284601; 0,3425109;
0,2921140; 8,75587; —3,70276; 2,1754; 8,9654; 5,5687;
1,147237; —3,4439, $H_{\nu k} = -8,458 \cdot 10^{-12}$; состояние 001—
1362,0607; 2,0066675; 0,3430100; 0,2924287; 8,50138;
—3,98563; 2,2143; 7,685; 5,700; 1,103745; —1,3669,
В. М. Ковба

анализ
полос поглощ.
 ν_1 и ν_3

х. 1985, 19, 47

SO₂

(Dm. 20418)

1984

(ν_1 , ν_3)

101: 218848h Analysis of the ν_1 and ν_3 absorption bands of sulfur dioxide ($^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$). Guelachvili, G.; Ulenikov, O. N.; Ushakova, G. A. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1984, 108(1), 1-5 (Eng). The spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ between 1055 and 2000 cm^{-1} was investigated under high resolu. with a Fourier transform interferometer. Two fundamental bands were analyzed; the A-type band ν_3 and the B-type band ν_1 . A careful anal. of these bands led to the availability of an extended and more precise set of rotational levels belonging to the vibrational states (000), (100), and (001). From this set of improved vibrational energies, rotational and centrifugal consts. for the states (000), (100), and (001) were obtained.



c.A. 1984, 101, N24

SD₂

1984

4 J1181. Анализ полос поглощения ν_1 и ν_3 молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Analysis of the ν_1 and ν_3 Absorption Bands of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Guelachvili G., Ulenikov O. N., Ushakova G. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1984, 108, № 1, 1—5 (англ.)

Получены ИК-спектры (2000—1055 cm^{-1}) молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ (I) в газовой фазе при комнатной т-ре со спектральным разрешением 0,005 cm^{-1} . Проведен теоретич. анализ параметров ИК-полос колебаний ν_1 и ν_3 I типов В и А соответственно. Идентифицированы компоненты вращательной структуры колебательных состояний (000), (100) и (001) этих молекул. Рассчитаны вращательные постоянные I и константы центробежного искажения I. Отмечено, что расхождение теоретич. и экспериментальных значений частот вращательных подуровней колебаний I не превышали 0,04—0,2%. Показано, что наблюдаемые расхождения теоретич. оценок и частот вращательных компонент при больших значениях числа J обусловлены случайным вырождением частот некоторых компонент во вращательной структуре полос ν_1 и ν_3 I.

И. В. А.

ν_i , м.п;

Ф. 1985, 18, №4.

SO₂

1984

12 B1208. Расчеты методом молекулярной динамики колебательных спектров двуокиси серы. MD simulation of vibrational spectra of sulphur dioxide. Hayashi S., Oobatake M., Ooi T., Machida K. «Proc. 9 Int. Conf. Raman Spectrosc. Tokyo, Aug. 27 — Sept. 1, 1984». Tokyo, 1984, 578—579 (англ.)

Методом молекулярной динамики рассчитаны ИК- и КР-спектры SO₂ в газ. и жидк. фазах. Учитывали внутри- (в гармонич. приближении) и межмолек. (кулоновский и типа Букингема) атом-атомный потенциал. Ур-ния движения интегрировали с периодич. граничными условиями. Вычислены колебательные и ориентац. корреляционные функции. С. И. Темкин

ИК- и КР-
спектры

Х. 1985, 19, N 12

SO₂

1984

12 Б1213. Колебательная зависимость тензора молекулярных G-факторов и тензора восприимчивости для двуокиси серы. Vibrational dependence in the molecular G- and susceptibility-tensors of sulfur dioxide. Hübner D., Sutter D. H. «Z. Naturforsch.», 1984, A39, № 1, 63—65 (англ.)

Исследован эффект Зеемана на вращательных переходах $2_{02}—1_{11}$ и $3_{13}—4_{04}$ молекулы SO₂ в основном и первом возбужденном состояниях колебания ν_2 . Определены значения вращательных g-факторов и компонентов тензора магнитной восприимчивости. Показано, что в пределах погрешностей измерений тензор восприимчивости не зависит от колебательного состояния, а слабая колебательная зависимость g-факторов сводится только к колебательной зависимости вращательных постоянных.

Е. В. Алиева

М.П.

X. 1984, 19, N 12

SO₂

1984

101; 100477h The vibrational modes of a nonrigid molecule: the C^1B_2 electronic state of sulfur dioxide. Jaffe, Charles (Dep. Chem., Univ. Toronto, Toronto, ON Can. M5S 1A5). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(2), 616-24 (Eng). Classical mechanics is used to study the dynamical nature of the vibrational modes of a nonrigid mol. This study reveals the existence of 2 qual. different sets of vibrational modes. One set is identified as local modes, while the other is identified as normal modes. These results are used to assign the obs. vibrational structure of $C^1B_2 \leftarrow X^1A_1$, electronic transition of SO₂. The implications for NO₂, ClO₂, and SeO₂ are discussed.

$(C^1B_2 \leftarrow X^1A_1)$

C.A. 1984, 101, N 12

От 19869

1984

SO₂

2 Б1049. Типы колебаний нежесткой молекулы: электронное состояние $\tilde{C}^1B_2$ двуокиси серы. The vibrational modes of a nonrigid molecule: The $\tilde{C}^1B_2$ electronic state of sulfur dioxide. Jaffé Charles. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 2, 616—624 (англ.)

Вычислены классич. траектории двумерного осциллятора, моделирующего вал. кол. молекулы SO₂ в электронном состоянии $\tilde{C}^1B_2$ с неравноценными (длинной и короткой) связями S—O. Результаты расчетов указывают на существование двух качественно различных типов колебательных состояний SO₂: локальных и нормальных. В нормальных состояниях, в отличие от локальных, происходит обмен колебательной энергией между связями S—O и периодич. изменение характера каждой связи (длинная $\rightleftharpoons$ короткая). Рассмотренная модель использована при отнесении колебательной структуры электронного перехода $\tilde{C}^1B_2 \leftarrow X^1A_1$ молекулы SO₂, а также для объяснения спектров ряда др. молекул с потенциальной поверхностью, имеющей два минимума вдоль координаты антисимм. вал. 1 кол. ClO₂ (2A_2), SeO₂ (1B_2), NO₂ (2B_2). В. Г. Соломоник

спектр, $\tilde{C}^1B_2$

✗
#3

Х. 1985, 19, №2

SO₂

Ом. 19869

1984

2 Д64. Колебательные моды нежесткой молекулы: электронное состояние $\tilde{C}^1B_2$ двуокиси серы. The vibrational modes of a nonrigid molecule. The $\tilde{C}^1B_2$ electronic state of sulfur dioxide. Jaffé Charles. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 2, 616—624 (англ.)

Выполнен расчет классич. траекторий для вал. кол. в основном ($\tilde{X}^1A_1$) и возбужденном ($\tilde{C}^1B_2$) электронных состояниях молекулы SO₂. Использованы потенц. ф-ции Морзе для связей S—O, а для возбужденного состояния учтен гауссов барьер между эквив. минимумами потенц. поверхности, соответствующими двум конфигурациям с неравными S—O-связями. Показано, что ниже вершины барьера все классич. траектории регулярны и колебания являются локальными. Вблизи вершины барьера траектории частично нерегулярны, а выше барьера преобладают нерегулярные траектории, соответствующие колебанию более длинной S—O-связи. Спектральные закономерности, соответствующие такому характеру колебательных состояний, наблюдались в электронном спектре молекулы SO₂ вблизи 2350 Å.

М. Р. Алиев

Б. М. П.
(расчет)

ф. 1985, 18, № 2.

SO₂

1984

16 Б1215. Интегральные интенсивности инфракрасных полос и атомные полярные тензоры молекулы SO₂. Integrated infrared intensities and the atomic polar tensors in SO₂. Kim Kwan, King W. T. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 3, 969—973 (англ.)

Измерены интегральные интенсивности основных ИК-полос поглощения молекулы SO₂: $A_1=20,60$, $A_2=25,33$ и $A_3=192,13$ км/моль для $\nu_1=1151$, $\nu_2=518$ и $\nu_3=1362$ см⁻¹. Из полученных величин A_i вычислены компоненты полярных тензоров для атомов S и O. Получено хорошее согласие с результатами расчета полярных тензоров неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО.
Е. В. Алиева

Спектр,
интенсивн.,

ρ_i ;

х. 1984, 19, N 16

SO₂

Am. 20263

1984

/ 101: 218959v Sub-Doppler laser spectroscopy of sulfur dioxide in a supersonic beam. Kullmer, R.; Demtroeder, W. (Fachber. Phys., Univ. Kaiserslautern, D 6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *J. Chem. Phys.* 1984, 81(7), 2919-24 (Eng). Sub-Doppler excitation spectra of the *E* band of SO₂ around 304 nm were measured with a spectral resolu. down to 10 MHz, by crossing the frequency doubled output beam of a single mode continuous-wave dye laser perpendicularly with a supersonic mol. SO₂ beam. Although the spectral line d. is so large that the mean line sepn. becomes smaller than the Doppler width, there is no true background continuum. The anal. of the spectra proves that several upper vibrational levels are excited within the *E* band. A model explaining the obsd. phenomena is discussed.

субДопплер.
лазер. спектр.

C.A. 1984, 101, 424

SO₂

от. 20263

1984

3. Л484. Субдоплеровская лазерная спектроскопия SO₂ в сверхзвуковом пучке. Sub-Doppler laser spectroscopy of SO₂ in a supersonic beam. Kullmer R., Demtröder W. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 2919—2924 (англ.)

С использованием кольцевого лазера на красителе измерен спектр возбуждения E полосы молекулы SO₂ в диапазоне частот 32820—32885 см⁻¹ с разрешением 10—100 МГц. Высокое спектральное разрешение достигалось применением методики пересекающихся светового и сверхзвукового молекулярного пучков. Установлено, что спектр состоит из линий с расстоянием между ними меньше доплеровской ширины. Какая-либо континуальная составляющая отсутствовала. Определен ряд молекулярных констант. Распределение интенсивностей флуоресцентных линий указывает на возбуждение ¹B₁ состояния, а вращательная структура спектра и изотопные сдвиги линий характерны для ¹A₂ со-

Спектр

ср. 1985, 18, №3

стояния. Предложена модель явления, объяснившая полученные результаты взаимодействием каждого из уровней возбуждаемого 1B_1 состояния в пределах Е полосы сразу с несколькими уровнями 1A_2 состояния. В результате образуются «гибридные» состояния, обладающие признаками как 1B_1 так и 1A_2 состояний. Установлено, что полученные результаты не могут быть приписаны одному типу взаимодействия. Библ. 22.

М. Ю.



SO₂

DM-20263

1984

7 B1282. Субдоплеровская лазерная спектроскопия SO₂ в сверхзвуковом пучке. Sub-Doppler laser spectroscopy of SO₂ in a supersonic beam. Kullmer B., Demtröder W. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 7, 2919—2924 (англ.)

С субдоплеровским разрешением (~ 10 МГц) измерены лазерные спектры возбуждения в области E-полосы молекул SO₂ (304 нм), охлажденных в сверхзвуковом пучке. В спектре наблюдалось большое число вращательных линий и хотя среднее расстояние между линиями было меньше, чем доплеровская полуширина, фонового континуума не наблюдалось. Анализ спектра проводили на основании предв. расчета термов уровней I' , $K-1'$, $K+1'$ по лит. значениям молекулярных постоянных, на основании анализа относит. интенсивностей линий и по комбинац. соотношениям для основного состояния. Обнаружены возмущения вращательных уровней в верхнем состоянии, к-рые интерпретируются

M.N.

X. 1985, 19, № 7

в рамках модели, предполагающей взаимодействие одного колебательного уровня состояния 1B_1 в области полосы E с несколькими антисимм. колебательными уровнями состояния 1A_2 . Результирующие «гибридные состояния» соответствуют состоянию 1A_2 с точки зрения вращательной структуры и более близки к состоянию 1B_1 в отношении распределения интенсивностей линий поглощения и полос флуоресценции. Доп. возмущения приписаны влиянию высоколежащих уровней основного электронного состояния и уровней близлежащих триплетных состояний. Выполненные измерения компонент зеемановского расщепления ряда вращательных линий согласуются с предложенной интерпретацией.

С. Б. Осин



SO₂

[Om. 19697]

1984

frausam
nepexoxu

Mehrotra S.C., Bestmann
et al.,

Z. Naturforsch., 1984,
A39, NF, 633-636.

SO₂

1984

Murcray D. G., Murcray
F. J., et al.

UK chemp

Appl. Opt. 1984, 23
(20), 3502.

(cu. CCl₂F₂; III)

SO₂

[Am. 18894]

1984

Orient O. F., Srivastava
S. K.,

chemp,
&

J. Chem. Phys., 1984,
80, N 1, 140-143.

SO_2

1984

Rawat T. S., Sharma
R. G., et al.

М. н.,
Уч. н.
ноцен.
Acta Cienc. Indica,
Phys. 1984, 10(4), 179-
-190.

(ср. UD_2 ; III)

1984

SO₂

(обзор)

спектроскоп.
константы

18 Б4271. Лазеры субмиллиметровых волн на дву-
окиси серы. The sulfur dioxide submillimeter wave la-
sers. Sattler Joseph P., Lafferty Walter J.
«Rev. Infrar. and Millimeter Waves. Vol. 2.» New York;
London, 1984, 359—381 (англ.)

Обзор. Рассмотрены спектроскопич. характеристики
молекулы и генерация субмиллиметрового лазерного
излучения при оптич. накачке CO₂-лазерами и возбуж-
дении в эл. разряде. Табулированы спектроскопич. кон-
станты SO₂ и характеристики субмиллиметровых пе-
реходов. Библ. 42.
Г. Ш.

Х. 1984, 19, N 18

SO₂

On. 19845

1984

101: 180059m Vibrational levels of triatomic molecules - semiclassical self-consistent-field and classical spectral calculations. Smith, A. D.; Liu, W. K.; Noid, D. W. (Guelph-Waterloo Program Grad. Work Phys., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *Chem. Phys.* 1984, 89(3), 345-51 (Eng). The semiclassical SCF (SSCF) method was applied to the calcn. of vibrational energy levels of the triat. mols. SO₂ and O₃, and the results were compared with previous accurate quantum calcns. Furthermore, the fundamental and overtone transition frequencies of these mols. were calcd. by the classical spectral method, and good agreement with quantum results was found. Both the SSCF and classical spectral methods are simple to apply to multidimensional problems.

теор. расч.
теплов.
уровней

⑦ O₃

с. А. 1984, 101, ~ 20

SO₂

1984

Spiridonov V. P., Lyutsa-
rev V. S., Butayev B. S.

2, 1; Chem. Phys. Lett.,
1984, 110, N 1, 32-39.

●
(cell. CO₂; III)

[Om. 20 160]

1984

SO₂

Strömberg A., Wahlg-
ren U., et al.,

port d-
optimum
2(S-O)

Chem. Phys., 1984,
89, N 3, 323-328.

50₂

1984

6 Л186. УФ-полосы SO_2 , исследованные с помощью флуоресценции при однофотонном возбуждении и спектроскопии двойного оптически-оптического резонанса. The ultraviolet bands of SO_2 studied by LIF and optical-optical double-resonance spectroscopy. Tsukiya Koichi, Kobayashi Daisuke, Obi Kinichi, Tanaka Ikuzo. «Chem. Phys.», 1984, 84, № 3, 337—343 (англ.)

С помощью двух различных эксперим. методик: возбуждаемой лазером флуоресценции при однофотонном возбуждении (ФОВ) и спектроскопии двойного оптически-опт. резонанса (ДООР) исследована система полос $\text{SO}_2 \text{ } ^1\text{A}' - ^1\text{A}'$ в области 315—330 нм. В качестве промеж. состояния в экспериментах по ДООР использовалось триплетное состояние $\tilde{a}$. Приведены частоты и идентификация колебательных полос, проявившихся в спектрах ФОВ и ДООР. Для радиационного времени жизни и колебательных частот $\nu_1'(S-O)$, $\nu_2'(S-S)$, ν_3' (изгиб) состояния $^1\text{A}'$ получены значения 10 нс, 1090, 405 и 252 cm^{-1} . А. В. Н.

фр. 1984, 18, 46

SO₂

1984

"100: 200068y Rotational spectrum of the sulfur dioxide (³²S¹⁶O¹⁸O). Van Riet, R.; Steenbeckeliers, G. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Louvain, 1348 Louvain-la-Neuve, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. I* 1983 (Pub. 1984). 97(3), 117-53 (Fr). The rotational spectrum of ³²S¹⁶O¹⁸O was studied by using a Stark modulation spectrometer. The (0,0,0) fundamental state, the (0,1,0) vibrational state, and the (0,2,0), (1,0,0), and (0,0,1) states were obsd. in the frequency range studied (8-59.5 GHz). The structure (*r_e*) to the 1st order confirms the equil. structure proposed by Y. Morino (1964) and S. Saito (1969).

Грассан.

Спектр,

структурн.

параметр.

с. А. 1984, 100, N 24

SO₂

1984

102: 211796b Contribution to the study of rotational spectrum of sulfur-dioxide $^{34}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ in the (000) and (010) states. Van Riet, R.; Steenbeckeliers, G. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Cathol. Louvain, 1348 Louvain-la-Neuve, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1984, 98(2-3), 123-44 (Fr). The rotational transitions, obsd. in the microwave spectra of SO₂ enriched with ^{34}S and ^{18}O , were treated by a 2nd-order calcn. of the (000) and (010) states of $^{34}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$.

Pravzam-
Cnekmp

C. A. 1985, 102, N 24.

SO₂

1984

10 Д66. Вращательный спектр двуокиси серы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в состояниях (030) и (110). Spectre de rotation du dioxyde de soufre $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ dans les états (030) et (110). Van Riet R., Steenbeckeliers G., Stouffs P., Fayt A. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1984 (1986), ser. 1, 98, № 4, 187—194 (фр.)

На основе данных микроволновых спектроскопич. измерений при 500 К восстановлен вращательный спектр двух колебательных состояний двуокиси серы — (030) для $J \leq 39$ и (110) для $J \leq 37$. В области $J \leq 8$ для первого состояния и $J \leq 9$ для второго, где имеются данные о вращательном спектре SO₂, получено согласие с известными результатами Saito S. («Mol. Spectrosc.», 1969 30, 1). На основе эксперим. данных вычислены характеристики молекул в указанных состояниях — вращательные постоянные, а так же ряд констант 2-го порядка. Данные по вращательным постоянным хорошо согласуются с известными результатами, а проведенный анализ позволил уточнить их точность.

А. В. Богданов

М.А.

ср. 1986, 18, № 10

SD₂

1984

101: 140111r Rotational spectra of sulfur dioxide ($^{32}\text{S}^{18}\text{O}^{18}\text{O}$).
Van Riet, R.; Steenbeckeliers, G. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ.
Cathol. Louvain, 1348 Louvain-la-Neuve, Belg.). *Ann. Soc. Sci.
Bruxelles, Ser. 1* 1983 (Pub. 1984). 97(4), 243-58 (Fr).
The rotational spectra of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ in the (000), (010), and (020) states
were measured at 8-59.5 GHz. The line assignments, calcd.
frequencies, obsd. frequencies, and rotational consts. are given.

Francis-
Clemm

C.A. 1984, 101, N 16

SO₂

[om. 21272]

1984

Van Roosmalen O.S.,
Benjamin J., et al.

meopem.
porcem.

J. Chem. Phys., 1984, 81,
N12, Pt2, 5986-5997.

SO₂

1984

24 Б4467. Двухфотонная диссоциация SO₂ в области 285—311 нм. Two-photon dissociation of SO₂ in the region 285-311 nm. Venkitachalam T., Bersohn R. «J. Photochem.», 1984, 26, № 1, 65—67 (англ.)

При действии сфокусированного света в области 285—311 нм перестраиваемого импульсного лазера на красителе (спектральная ширина 0,12 см⁻¹, длительность импульса 10 нс, частота следования 5 Гц) на SO₂ при давл. 0,1 Торр в проточных условиях по спектрам флуоресценции (Фл) обнаружено образование перв. продуктов—атомов S(³P) и S(¹D) и молекул SO. Процесс обусловлен двухфотонной фотодиссоциацией SO₂ и последующим двухфотонным возбуждением фотофрагментов—атомов S(³P_J, (3p)⁴) в состояние 4³P_J (3p)²(4p), к-рое переходит с ИК-излучением в состояние 4³S⁰, возвращающееся в основное состояние с испусканием света 180,7 нм; атомов S(3'D₂) в состояние 4¹F₃(3p)³(4p) (поглощение двух фотонов света 288,2 нм) с последующим излучательным переходом в промежут. состояние 4¹D₂, радиац. дезактивация к-рого протекает с испусканием света 166,7 нм; молекул

двухфотонная
диссоциация

Х. 1984, 19, № 24

$\text{SO}(X^3\Sigma^-)$ в ридберговское состояние $E^3\Pi$, при радиац. дезактивации к-рого испускается свет 147,6 и 145,0 нм (канты полос (0,0) и (1,0) соотв.). Сделан вывод, что при поглощении двух фотонов света 285—311 нм (по энергии эквивалентно поглощению одного фотона света 142,5—155,5 нм) молекула SO_2 диссоциирует на атомы $\text{S}(^3P, ^1D) + \text{O}_2$, а также на $\text{SO} + \text{O}$. Согласно лит. данным, действие света 193 нм приводит к диссоциации SO_2 только на $\text{SO} + \text{O}$, а при действии света 147,0 нм и 123,6 нм с более высоким выходом идет диссоциация на $\text{S} + \text{O}_2$. Сформулирован вопрос об эквивалентности диссоциации молекул с одинаковыми энергиями возбуждения при одно- и дв 'хфотонном поглощении света.

В. Е. Скурат

SD₂

10m 20917

1984

Войцеховская О.К., Горков А.И.

и др.,

спектроскоп.
постоян.,
уровней
энергии,
банк
данных.

ВИНИТИ Дел. N. 1328-84.
Москва, 1984.

SD₂

Om. 18756

1984

Wu C.Y.R.,

checkmp

J. Phys. B: Atom. and
Mol. Phys., 1984, 17, N3,
405-416.



SO₂

(Om. 22352)

1985

103: 166376x Near-threshold electron-impact excitation of sulfur dioxide. Abuain, Taher; Walker, Isobel C.; Dance, Donald F. (Dep. Phys., Univ. Stirling, Stirling, UK FK9 4LA). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1985, 81(7), 1061-6 (Eng). The near-threshold excitation of SO₂ was studied using a trapped-electron spectrometer. Excitation energies for the 3 low-lying triplet electronic energy states, ³B₁, ³B₂, and ³A₂, all lie within the range 3.1-3.9 eV and 2 other triplet states are excited at ~7.75 and 8.4 eV electron energy loss.

миср. пачина
започнати
научна работа
сочинение

C.A. 1985, 103, N 20

SD₂

[DM. 21731]

1985

Benjamin J., Levine R. D.

Chem. Phys. Lett.,

1985, 117, N 4, 314-

-320.

поверхн.
потенц.
энергии,
теорет.
расчёты.

SO₂

1985

2 ДЗ19. Определение сродства к электрону по равновесию в процессе перезарядки: $A^- + B = A + B^-$. Electron affinities from electron-transfer equilibria: $A^- + B = A + B^-$. Grimsrud Eric P., Caldwell Gary, Chowdhury Swapan, Kebarle Paul. «J. Amer. Chem. Soc.», 1985, 107, № 16, 4627—4634 (англ.)

С помощью измерения констант равновесия процессов перезарядки в импульсном масс-спектрометрическом ионном источнике повышенного давления с электронным ударом определены величины сродства к электрону (СЭ) 34 молекул в диапазоне от 0,5 до 3 эВ. Исследованные молекулы относятся к классам замещенных нитробензолов, замещенных хинонов, сопряженных молекул, содержащих атомы кислорода. Определены также величины СЭ для малых молекул SO₂, NO₂, CS₂ и CH₃NO₂. Измерены также величины констант скорости экзотермич. перезарядки. Большинство из этих констант имеют величины, близкую к констан-

Ac;

43

ср. 1986, 18, 42

те скорости упругого нон-молекулярного столкновения. Исключение составляют перфторированные молекулы, такие, как перфторметилциклогексан, перфторциклогексан, SF_6 . Хотя эти молекулы имеют большие сечения захвата медленного электрона, они не захватывают электрон от A^- , хотя A имеет меньшее сродство к электрону. С другой стороны, перфторированные анионы передают электрон молекуле A с большим сродством к электрону, причем константа скорости перезарядки увеличивается с увеличением $СЭ(A) - СЭ$ (перфтор-молекула).

Г. К

1985

34 соединения

SO₂

(Ae)

1874

103: 59622c Electron affinities from electron-transfer equilibria: $A^- + B = A + B^-$. Grimsrud, Eric P.; Caldwell, Gary; Chowdhury, Swapan; Kebarle, Paul (Chem. Dep., Univ. Alberta, Edmonton, AB Can. T6G 2G2). *J. Am. Chem. Soc.* 1985, 107(16), 4627-34 (Eng). Detn. of the equil. consts. K_1 for gas-phase electron-transfer equil. $[A^- + B = A + B^-]$ with a pulsed-electron-beam high-ion-source-pressure mass spectrometer lead to the electron affinities of 34 compds. with EA's of 0.5-3 eV. The compds. studied were nitrobenzenes, quinones, and conjugated mols. contg. O. The EA of smaller mols. such as SO₂, NO₂, CS₂, and MeNO₂ also were detd. A comparison with EA's detd. with other gas-phase methods and EA's evaluated from polarog. half-wave redn. potentials and charge-transfer spectra in soln. is made. The rate consts. for a no. of exothermic electron-transfer reactions were detd. Most of these proceed at near collision rates. Electron-transfer reactions involving perfluorinated compds. such as perfluoromethylcyclohexane, perfluorocyclohexane, and SF₆ do not follow this behavior. While the perfluoro compds. have high thermal electron capture cross sections, they do not accept electrons from A⁻ of compds. A with lower electron affinity. The perfluoro anions do transfer electrons to compds. A with higher electron affinity, and the rate consts. increase with EA(A) - EA(perfluoro compd.).

C. A. 1985, 103, N 8.

(см. оригинал)

NO_2 , CS_2 , CH_3NO_2 , нитрофенол

SO₂

1985

102: 211818k Molecular dynamics using internal coordinates.
1. Infrared spectra of sulfur dioxide. Hayashi, Soichi; Oobatake, Motohisa; Ooi, Tatsuo; Machida, Katsunosuke (Inst. Chem. Res., Kyoto Univ., Uji, Japan 611). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1985, 58(4), 1105-8 (Eng). A simulation method of mol. dynamics using internal coordinates for polyat. mol. is described. The method permits intramol. interaction to be expressed in terms of the internal coordinate, and produces translation, rotation, and vibration of mol. As the 1st application, IR spectra of SO₂ both in gas and liq. phases are simulated by the method. The spectrum in the gas phase exhibits the pure rotational band and the vibrational-rotational bands for fundamental modes. The ν_1 and ν_2 vibrations show B-type band shape, and the ν_3 mode shows A-type band shape, in accord with the exptl. result and the selection rule for a prolate sym. top which may practically represent the mol. In the liq. phase, multiple peaks due to rotational structure disappeared, and single-peaked bands are simulated as expected. The method can be extended so as to describe more realistic intermol. interactions than pairwise atom-atom potentials.

(UK)

C. A. 1985, 102, N 24.

SO_2 (2,2)

1985

10 Л159. Молекулярная динамика с использованием внутренних координат. Ч. I. ИК-спектры двуокиси серы. Molecular dynamics using internal coordinates. I. Infrared spectra of sulfur dioxide. Hayashi Soichi, Oobatake Motohisa, Ooi Tatsuo, Machida Katsunosuke. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1985, 58, № 4, 1105—1108 (англ.)

Разработан метод молекулярной динамики, в котором взаимодействия в молекулах описываются во внутренних координатах и моделируется трансляционное, вращательное и колебательное движение. В качестве примера рассчитан ИК-спектр двуокиси серы в газообразном и жидком состояниях. В спектре газа, как и следовало ожидать, получены чисто вращательная и колебательно-вращательные полосы. В жидкости линейчатый спектр в полосах размывается с образованием единого контура. Развитый метод позволяет использовать более реалистичные межмолекулярные потенциалы, чем использованный в расчетах атом—атомный потенциал.

Е. П. Смирнов

ИК-спектр,
расчет

ср. 1985, 18, №10

SO₂

ОМ 23560

1985

№9 Л1176. Вращательные спектры молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2(\nu_2)$ и $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в субмиллиметровом диапазоне. The submillimeter wave spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2(\nu_2)$, and $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Helminger Paul A., De Lucia Frank C. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 1, 66—72 (англ.)

В диапазоне 400—1000 ГГц исследованы МВ-спектры молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в основном и первом возбужденном состояниях колебания ν_2 и молекулы $^{34}\text{SO}_2$ в основном колебательном состоянии. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \leq 60$. Анализ спектров выполнен по полученным данным совместно с литературными данными для области частот ниже 400 ГГц. Определены значения вращательных постоянных и постоянных квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения.

М. Р. Алиев

(М.П.)

ср. 1986, 18, 49

SO₂

Am 23560 1985

№17 Б1292. Вращательные субмиллиметровые спектры молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ ($v_2=1$) и $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. The submillimeter wave spectrum of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2(v_2)$, and $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Helming P. A., De Lucia F. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 111, № 1, 66—72 (англ.)

Исследованы вращат. спектры $^{32}\text{SO}_2$ и $^{34}\text{SO}_2$ от 400 до 1000 ГГц. Идентифицированы линии вращат. переходов с $j \leq 60$ молекулы $^{32}\text{SO}_2$ в состояниях (0,0,0) и (0,1,0) и молекулы $^{34}\text{SO}_2$ в основном состоянии (0,0,0). Анализ спектров выполнен с привлечением лит. данных

(М.П.)



X.1986, 19, N 17

по частотам переходов ниже 400 ГГц с учетом поправок квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения. Определены значения вращат. и центробежных постоянных. Для основного состояния молекулы $^{32}\text{SO}_2$ получено: A 60778,5522, B 10318,0722, C 8799,7023 МГц; $\Delta_J = 6,6100$, $\Delta_{JK} = -116,9588$, $\Delta_K = -2590,43$, $d_J = 1,7010$, $d_K = 25,3531$ КГц; $H_J = -1,0645 \cdot 10^{-2}$, $H_{JK} = 2,522 \cdot 10^{-2}$, $H_{KJ} = -19,3691$, $H_K = 371,799$, $h_J = 5,4326 \cdot 10^{-3}$, $h_{JK} = -1,09 \cdot 10^{-2}$, $h_K = 16,673$ Гц; $L_{KJ} = 4,1512 \cdot 10^{-3}$, $L_K = -8,1384 \cdot 10^{-2}$ Гц.

Е. В. Алиева

SD₂

OM. 23560

1985

102: 211824j The submillimeter-wave spectrum of ($^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2(\nu_2)$, and $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$). Helminger, Paul A.; De Lucia, Frank C. (Dep. Phys., Univ. South Alabama, Mobile, AL 36688 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 111(1), 66-72 (Eng). Extensive new measurements at 400-1000 GHz were made on $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2(\nu_2)$, and $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. These measurements represent almost a 3-fold extension in the frequency region for which high-resoln. microwave data are available. These data were combined with the previously available microwave data for this anal. The results, when extrapolated into the far-IR, compare favorably with recent results obtained from high-resoln. far-IR spectroscopy.

Субмм. спектр

C. A. 1985, 102, N 24.

SO₂

1985

7 Б1044. Расчеты сродства к электрону SO₂ методом приведенных по симметрии кластеров с конфигурационным взаимодействием (ПСК-КВ). SAC-Cl calculations of the electron affinity of SO₂. Hirao K. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 3, 1433—1434 (англ.)
Место хранения ГПНТБ СССР

С использованием базисов [6s5p1d] для серы и [4s3p1d] для кислорода рассчитаны энергии молекулы SO₂ и аниона SO₂⁻. Равновесные геометрич. параметры найдены методом конфигурац. взаимодействия (КВ) с учетом одно- и двукратных возбуждений. Затем энергии систем определены в приближении приведенных по симметрии кластеров (ПСК) с учетом возбуждений вплоть до 4-го порядка. Найдено, что низшее состояние аниона имеет симметрию ²B₁. Рассчитанное в наилучшем варианте сродство к электрону составляет 0,62 эВ (вертикальное) и 1,03 эВ (адиабатич.). Сделано заключение, что недавнее определение сродства к электрону методом ионного циклотронного резонанса (2,2±0,1 эВ), по-видимому, неверно.

47

М.Н.
X. 1987, 19, № 7

А. В. Немухин

SD₂

1985

[103: 110267v SAC-CI calculations of the electron affinity of sulfur dioxide. Hirao, K. (Coll. Gen. Educ., Nagoya Univ., Nagoya, Japan). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(3), 1433-4 (Eng). For the SO₂ mol., the vertical and adiabatic electron affinities (0.62 and 1.03 eV, resp.) were calcd. by using the previously described (H., 1983) symmetry-adapted-cluster(SAC)-CI method, in agreement with existing exptl. values.

(Ae; meep-
paciem)

C.A. 1985, 103, N14.

SO_2

1985

Huber D.

Int. J. Quantum

Chem., 1985, 28, N2,
245-267.

расчёт
колебаний:
вращения.
Соед.

●
(соед. H_2O ; III)

SO₂

[DM. 21175]

1985

Jones R. O.

Энергетич.
поверхности
миллсекундных
колебаний

J. Chem. Phys.,
1985, 82, N 1,
● 325 - 332.

1985

SO₂ - комплексы

16 Б1200 Деп.

Расчет β -факторов донорно-акцепторных соединений оксида серы (4+) с органическими и неорганическими веществами. Князев Д. А., Белопухов С. Л., Кончиц В. А.; Моск. с.-х. акад. М., 1985, 9 с. Библиогр. 9 назв. (Рукопись деп. в ОНИИТЭхим. г. Черкассы 15 апр., 1985 г., № 356хп—85 Деп.)

Исследовано 10 донорно-акцепторных соединений оксида серы (4+) с орг. и неорг. молекулами методом ИК-спектроскопии в обл. 400—4000 см⁻¹. Измерены частоты колебаний SO₂ в комплексах. Для 15 координац. соединений SO₂ в приближении силового поля Юри—Бредли—Симаноути рассчитаны частоты колебаний изотопнозамещ. формы — ³⁴SO₂ и отношение сумм по состояниям изотопных форм (β -факторов). Показано, что β -факторы комплексов близки между собой и не более, чем на 0,3% отличаются от $\beta_{\text{SO}_2} = 1,0515$. Автореферат

V_i;

X. 1985, 19, N 16

SO₂

DM-20575 1985

10 Б1257. Вибронное взаимодействие в SO₂ и его влияние на вращательную структуру полос в области 300—330 нм. Vibronic coupling in SO₂ and its influence on the rotational structure of the bands in the 300—330 nm region. Kullmer R., Demtröder W. «Chem. Phys.», 1985, 92, № 2—3, 423—433 (англ.)

С использованием лазера на красителе исследован субдоплеровский спектр возбуждения молекулы SO₂ в сверхзвуковой молек. струе в области 30 300—33 000 см⁻¹. Идентифицированы полосы 43 вибронных переходов ¹A₁—¹A₂. Выполнен анализ вращательной структуры 6 полос с учетом вибронного взаимодействия между возбужденными электронными состояниями ¹A₂ и ¹B₁. Определены значения вращат. постоянных для возбужденных вибронных состояний. При значениях параметра вибронного взаимодействия 30—40 см⁻¹ получено удовлетворительное согласие между вычисленными и наблюдаемыми величинами относит. интенсивности полос и вращат. постоянной A. Е. А. Алиева

ll-A.

X. 1985, 19, N 10

SO₂

OM-20575

1985

7 Л126. Вибронное взаимодействие в SO₂ и его влияние на вращательную структуру полос в области 300—330 нм. Vibronic coupling in SO₂ and its influence on the rotational structure of the bands in the 300—330 nm region. Kullmer R., Demtröder W. «Chem. Phys.», 1985, 92, № 2—3, 423—433 (англ.)

Исследована вибронная структура в спектрах возбуждения молекул SO₂, полученных при лазерном зондировании потока смеси газов Ar с 3% SO₂, вытекающей из сопла со сверхзвуковой скоростью, а также вращательная структура отдельных полос субдоплеровского спектра возбуждения в спектральном интервале 30 300—33 000 см⁻¹. Положение полос, начальные линии, интенсивности, значения вращательных постоянных A, B, C, параметры асимметрии, отнесения вращательных линий приведены в 9 таблицах. Вращательный анализ спектров позволил обнаружить

М.П., спектр

ср. 1985, 18, № 7

локальные возмущения отдельных уровней, принадлежащих практически невозмущенной полосе 322,6 нм (1A_2), лежащей значительно ниже самого низкого уровня состояния 1B_1 . Новые значения вращательных постоянных существенно расходятся с прежними оценками. Предложена упрощенная модель вибронных взаимодействий. В рамках этой модели удалось объяснить наблюдаемое отношение интенсивностей полос и близость значений вращательных постоянных A, B, C , к значениям вращательных постоянных состояния 1A_2 .

А. М. М.



SO₂

1985

Д 12 Д82. Распределения сил дипольных осцилляторов и свойства молекул SO₂, CS₂ и OCS. Dipole oscillator strength distributions and properties for SO₂, CS₂, and OCS. Kumar Ashok, Meath William J. «Can. J. Phys.», 1985, 63, № 3, 417—427 (англ.; рез. фр.)

С использованием распределений сил дипольных осцилляторов в молекулах SO₂, CS₂ и OCS, вычислены интегр. силы осцилляторов и другие характеристики диполей этих молекул в основных состояниях. Каждое распределение образовывалось на основе экспериментальных и теоретич. значений для сечений фотопоглощения и данных по молекулярной рефракции соответствующих газов. Результаты представлены в таблицах. Графически проиллюстрирована связь между наиболее важными свойствами диполей и зависимостью распределений сил дипольных осцилляторов по частотам. В. А. Морозов

Силы
осцилляторов

(+2) ☒

фр. 1985, 18, № 12

SO_2

(М.П.)

ф. 1986, 18, N 10

1985

7 10 Л168. Исследование полосы ν_1 $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ методами диодно-лазерной спектроскопии и ИК-микроволнового двойного резонанса. Diode laser and IR—MW double resonance spectroscopy of the ν_1 band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Lindenmayer Josef, Jones Harold, Typke Volker. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 357—363 (англ.)

При комнатной т-ре и давл. 0,1—0,5 мм рт. ст. методом перестраиваемой диодно-лазерной спектроскопии исследован ИК-спектр поглощения $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. С точностью $\sim 10^{-3}$ см^{-1} измерены частоты ~ 240 линий вращательной структуры основной колебательно-вращательной полосы ν_1 . С привлечением данных о чисто-вращательном спектре $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, полученных ранее методом двойного ИК-микроволн. резонанса, выполнен анализ наблюдаемой вращательной структуры. В приближении гамильтониана Уотсона рассчитано положение начала полосы и найдены значения молекулярных постоянных $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ в возбужденном колебательном состоянии. Отмечено отсутствие резонансных взаимодействий колебательного состояния $\nu_1=1$ с другими колебательными состояниями.

В. К.

SO₂

DM. 23538

1985

(ν_1)

102: 175260m Diode laser and IR-MW double resonance spectroscopy of the ν_1 band of sulfur dioxide ($^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$). Lindenmayer, Josef; Jones, Harold; Typke, Volker (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 110(2), 357-63 (Eng). The detn. was recently reported of the consts. of the ν_1 band of both $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ and $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_2$ from IR-microwave double resonance. This work has now been extended by carrying out diode laser measurements on the ν_1 band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. By using the improved consts., it is possible to predict and observe a further 7 double-resonance systems.

C.A. 1985, 102, N20

SO₂

On 22315

1985

6 Б1380. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XXII. Диоксид серы (SO₂). Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXII. Sulfur dioxide (SO₂). Lovas F. J. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1985, 14, № 2, 395—397 (англ.)

Обзор Приведены экспериментально измеренные и расчетные частоты вращат. переходов для 3 изотопич. образцов и ³²SO₂ в основном колебат. состоянии до $\nu_{\text{макс}}=60$ и $\nu_{\text{макс}}=650$ ГГц, для ³²SO₂ в возбужденном колебат. состоянии $\nu_2=1$ вплоть до $J_{\text{макс}}=60$ и $\nu_{\text{макс}}=600$ ГГц, для ³³SO₂ вплоть до $J_{\text{макс}}=40$ и $\nu_{\text{макс}}=300$ ГГц и для ³⁴SO₂ вплоть до $J_{\text{макс}}=50$ и $\nu_{\text{макс}}=350$ ГГц. При использовании гамильтониана Уотсона для всех образцов вычислены вращат. постоянные, постоянные центробежного искажения и силы линий. Для образца ³³SO₂ определена ³³S-ядерная квадрупольная структура вращат. переходов. Приведенные данные могут быть использованы при астрофиз. исследованиях.

С. Н. Мурзин

Vi, M. A.
(обзор)

X. 1986, 19, № 6.

SO₂

Om. 22315

1985

103: 45435g Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXII. Sulfur dioxide (SO₂). Lovas, F. J. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). J. Phys. Chem. Ref. Data 1985, 14(2), 395-488 (Eng). The microwave spectrum of SO₂ is critically reviewed and supplemented with spectral frequency calens. derived from rotational and centrifugal distortion terms in the mol. Hamiltonian. The primary objective of this review is to provide the microwave transition frequencies applicable to mol. radio astronomy for the ground vibrational state of the most abundant isotopic forms, i.e., the singly substituted atoms ³³S and ³⁴S. Also included is an anal. of the lowest lying vibrationally excited state ($\nu_2 = 1$) of ³²S¹⁶O₂. The frequency limits and max. rotational quantum value (J) vary for each isotopic form but for ³²S¹⁶O₂ the frequency range 100 MHz to 650 GHz is presented for $J_{\max} = 60$.

(yb crenmp)

C.A. 1985, 103, N6

SO₂

9T 22315

1985

2 J160. Микроволновые спектры молекул, представляющих астрофизический интерес. XXII. Двуокись серы (SO₂). Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXII: Sulfur dioxide (SO₂). Lovas F. J. «J. Phys. and Chem. Ref. Data», 1985, 14, № 2, 395—397 (англ.)

Собраны все эксперим. данные по частотам вращательных переходов и молекулярным константам для ³²SO₂ ($v_2=0$ и 1), ³³SO₂ и ³⁴SO₂ ($v_2=0$), полученные методом МВ-спектроскопии. Проведен теоретич. анализ частот переходов с использованием приведенного вращательного гамильтониана Уотсона, учитывающего кватертичное и секстетичное центробежное искажение: при этом использованы частоты 243 переходов с $J \leq 60$ и $v_2=0$; 90 переходов с $J \leq 60$ и $v_2=1$ ³²SO₂, 40 переходов с $J \leq 40$ (и их CTC) ³³SO₂ и 61 перехода с $J \leq 49$ ³⁴SO₂. Уточнены значения вращательных и центробежных по-

М.П.

ср. 1986, 18, № 2

стоянных. Вычислены частоты и интенсивности всех вращательных переходов (в том числе ненаблюдаемых) с $J \leq 60$ и $v_2 = 0$ и 1 $^{32}\text{SO}_2$ ($\nu \leq 650$ ГГц), с $J \leq 40$ $^{33}\text{SO}_2$ ($\nu \leq 300$ ГГц) и с $J \leq 50$ $^{34}\text{SO}_2$ ($\nu \leq 350$ ГГц).

М. Р. Алиев



SO₂

1985

Mehrotra S.C., Dreizler
H., et al.

encomp. Z. Naturforsch., 1985,
A40, N 7, 683-685.

●
(see. CH₃OH; III)

SO₂

1985

У 6 Д52. Поверхности потенциальной энергии основного состояния SO₂ и S₂O. Potential energy functions for the ground state surfaces of SO₂ and S₂O. Murrell J. N., Craven W., Vincent M. Zhu Z. H. «Mol. Phys.», 1985, 56, № 4, 839—851 (англ.)

С использованием данных по изучению ИК- и микро- волн. спектров стабильных изомеров молекул SO₂ и S₂O в основном электронном состоянии, а также данных немпирич. расчетов силовых констант метастабильных изомеров этих молекул сконструированы поверхности потенц. энергии основного состояния SO₂ и S₂O. Эти поверхности представлены аналитически тремя способами, отличающимися сложностью описания и количеством используемых для описания констант. Полученные поверхности могут быть использованы в различных задачах, в том числе для изучения динамики таких практически важных реакций, как $S + O_2 \rightarrow SO + O$, $S_2 + O \rightarrow SO + S$.
Б. Ф. Гордиец

М.П.

К(А)

ср. 1986, 18, № 6

SO₂

1985

104: 75422p Potential energy functions for the ground state surfaces of sulfur oxides (SO₂ and S₂O). Murrell, J. N.; Craven, W.; Vincent, M.; Zhu, Z. H. (Sch. Chem. Mol. Sci., Univ. Sussex, Brighton, UK BN1 9QJ). *Mol. Phys.* 1985, 56(4), 839-51 (Eng). Potential energy functions were derived as many-body expansions for the ground state surfaces of SO₂ and S₂O, which reproduce spectroscopic data for the most stable isomers and the results of ab initio calcs. on the metastable isomers. Functions are given at 3 levels of complexity which are related to different amts. of data that are reproduced.

of the potential
functions by
crackup-garrett

Ⓢ(H) S₂O

C.A. 1986, 104, N10

$(\text{SO}_2)_2$

1985

9 Б1272. Микроволновый и радиочастотный вращательно-инверсионный спектр $(\text{SO}_2)_2$. The microwave and radio frequency rotation-inversion spectrum of $(\text{SO}_2)_2$. Nelson D. D., Fraser G. G., Klempner W. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 3, 945—949 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом эл. резонанса в молек. пучке в обл. РЧ- и МВ-частот 0,2—13 000 МГц измерен вращательно-инверсионный спектр димера $(\text{SO}_2)_2$ в основном колебат. состоянии. Анализ РЧ- и МВ-спектров выполнен с учетом кватерного центробежного искажения и инверсионного туннелирования. В приближении модели асимм. волчка определены комбинации вращат. постоянных $(B+C)/2=926, 160$ (2) МГц, $(B-C)/2=22,3207$ (1) МГц, инверсионный сдвиг энергетич. уровней $\delta_{\text{инв}}=0,070$ (1) МГц и дипольный момент $\mu_a=1,4052$ (13) Д. Из суммы вращат. постоянных $(B+C)$ определено расстояние между центрами масс SO_2 в димере $R_{\text{ц.м.}}=3,825$ (10) А. Из величины центробежной постоянной вычислена силовая постоянная вандерваальсовой связи димера 0,0264 мдн/А.

С. Н. Мурзин

М.П.

X. 1987, 19, 29

SO₂

1985

10 Л401. Спектры флуоресценции с отдельных ротационных уровней молекулы SO₂ в условиях сверхзвуковой струи: с-осевое кориолисово взаимодействие. SRVL fluorescence spectra of SO₂ in a supersonic free jet. C-axis Coriolis interaction. Suzuki Toshinori, Ebata Takayuki, Ito Mitsuo, Mikami Naohiko. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 116, № 4, 268—272 (англ.)

В области 26 000—32 800 см⁻¹ получен спектр флуоресценции молекул SO₂, возбуждавшихся в отдельные электронно-колебательно-вращательные состояния в полосе Клемента E (32 872 см⁻¹). Возбуждение осуществлялось перестраиваемым лазером на красителе. Установлено, что появление в спектре запрещенных переходов на уровень (0, 0, 1) связано с с-осевым кориолисовым взаимодействием.

М. Т.

спектр,

М. П.

ср. 1985, 18, N 10

SP2

[Dm. 21334]

1985

10 Л402. Исследование методом возбуждаемой лазером флуоресценции полосы E в системе переходов $\tilde{A}-\tilde{X}$ молекул SO_2 , вращательно охлажденных в сверхзвуковой струе. Laser-induced fluorescence spectroscopy of the E band of the $\tilde{A}-\tilde{X}$ transition of SO_2 cooled rotationally in a supersonic jet. Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji, Koda Seiichiro. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 136—140 (англ.)

В области $32867-32878 \text{ см}^{-1}$ получен спектр возбуждаемой лазером флуоресценции молекул SO_2 , охлажденных в сверхзвуковой струе до T -ры 5К. Для возбуждения использовалась вторая гармоника лазера на красителе. В спектре идентифицирована структура, относящаяся к системе переходов $A^1A_2-X^1A_1$. Низкая вращательная T -ра молекул, а также существенное сужение доплеровского профиля линий позволили определить положение компонентов вибронных полос с точностью не хуже 0.2 см^{-1} . М. Т.

спектр,

М.П.

ср. 1985, 18, N10

SO₂

Ом. 21-334

1985

18 Б4430. Спектроскопия лазерно-индуцированной флуоресценции в E -полосе перехода $\bar{A}-\bar{X}$ молекулы SO₂, вращательно охлажденной в сверхзвуковой струе. Laser-induced fluorescence spectroscopy of the E band of the $\bar{A}-\bar{X}$ transition of SO₂ cooled rotationally in a supersonic jet. Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji, Koda Seiichiro. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 1, 136—140 (англ.)

С использованием перестраиваемого лазера на красителе с удвоением частоты со спектральной шириной $\sim 0,02 \text{ см}^{-1}$ в области $32\,867\text{—}32\,878 \text{ см}^{-1}$ зарегистрирован спектр возбуждения флуоресценции SO₂, охлажденного в сверхзвуковой струе в смеси с Ar до вращат. т-ры $\sim 5 \text{ K}$. Эта область соответствует E -полосе перехода SO₂ ($\bar{A}^1A_2-\bar{X}^1A_1$). Вращат. охлаждение SO₂ приводит к сильному упрощению спектра, что дает возможность однозначно идентифицировать ряд оставшихся вращат. переходов на основе комбинац. разностей основного состояния и относит. интенсивностей линий.

Спектр

X. 1985, 19, N 18.

в зависимости от вращат. т-ры. Дано отождествление
10 из 23 вращат. линий E -полосы, приведены величины
шести вращат. термов верхнего вибронного состояния
 E -полосы. Для начала вибронной полосы перехода
 $SQ_2(\bar{A}-\bar{X})$ получены след. значения (см^{-1}): D 32630,69;
 E 32872,51; L 34025,22; N 34396,21. В. Е. Скурат

верс
ть

SO₂

1986

Carter S.

обзор

Comput. Phys. Rept,
1986, 3, N4, pp. 210-271,
ill. 210-271.

(cur. H₂O; II)

SO₂

(DM-23489) "A" 1986

Carter S., Mandy N.C.,

Расчет
Уровней
колебат.
Энергии

Mol. Phys., 1986, 57,
N1, 175-185.

SO₂

1986

Carter S., Handy N.C.

Mol. Phys., 1986,

57, N1, 175-185.

meopem.
pacrim.

(cer. CO₂ ; III)

DSO
SDO

сев. 24 195

1986

расчѣт
Евзон. 4
барьер
изолер.

Чаркис О. П.,
Зюбикова Т. С.

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



SO_2

Gentroeder W.,
Diemer U., et al.

1986

пример
высокого
разреже-
ния

Fresenius. Z. Anal.

Chem. 1986, 324 (5),
479-85.

(see NO_2 ; III)

SO₂

1986

24 Б4473. Процессы тушения электронновозбужденных молекул SO₂, генерируемых в химической реакции. Quenching processes in electronically excited SO₂ generated by chemical reaction. Glinski Robert J., Dixon David A. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 15, 3346—3353 (англ.).

Изучена Хл SO₂ в области 268—550 нм, возникающая при введении эффузионного пучка O₃ (давл. 1—100 мТорр) в реакц. камеру объемом 60 л, заполненную метилмеркаптаном или диметилдисульфидом при давл. 3—90 мТорр. Основная доля электронновозбужденных молекул SO₂* возникает в элементарной р-ции SO+O₃. Для анализа тушения SO₂* добавками He и Ne использован метод хим. регулирования времени р-ции. Показано, что эти добавки тушат Фл SO₂* при 385 нм и не влияют или усиливают фосфоресценцию (ФС) SO₂* при 396,407 и 414 нм. Тушение Фл поз-

(&i)

Х. 1986, 19, N 24

воляет разделить спектроскопически неразличимые коротко- и долгоживущие флуоресцентные состояния SO_2^* . Состояние $\text{SO}_2^* (^3B_1)$, ответственное на ФС, не образуется в хим. р-ции $\text{SO} + \text{O}_3$. Оно не возникает также в индуцированной столкновениями интеркомбинац. конверсии из одного из возбужденных синглетных состояний. Возможными предшественниками $\text{SO}_2^* (^3B_1)$ являются: низшие триплетные состояния 3A_2 или 3B_2 , основное электронное состояние с высоким колебат. возбуждением, изомерные формы SO_2 с энергией ~ 4 эВ.

В. Е. Скурат

SO_2^+

1986

17 Б1166. Резонансный обмен зарядом как способ селективного возбуждения состояний в спектроскопии фотодиссоциации SO_2^+ . Resonant charge exchange as a means of selective state excitation in the photodissociation spectroscopy of SO_2^+ . Goss S. P., Morrison J. D. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 4, 2423—2424 (англ.)

Продemonстрирована возможность применения резонансного обмена зарядом между $\text{Xe}^+(^2P_{1/2})$ и SO_2 для селективного возбуждения уровня (030) состояния $\tilde{B}$ SO_2^+ (см. «Int. J. Mass Spectrom. Ion. Phys.», 1985, 64, 213). В спектре фотодиссоциации (Фд) ионов SO_2^+ , полученном для смеси SO_2/Xe , наблюдались доп. (по сравнению со спектром Фд чистого SO_2) полосы, связанные с переходами из состояния $\tilde{B}(030)$ на уровне $\tilde{C}(v_1, v_2, 0)$. Предполагается, что одновременно могут возбуждаться и другие, близлежащие к (030) уровни, напр., $\tilde{B}(110)$, а также высоколежащие колебат. уровни состояния $\tilde{A}$.

В. М. Ковба

(дл.п.)

Х. 1986, 19, № 7

1986

SO₂

№ 13 Б1246. SO₂. Причины неэквивалентности длин связей в электронном состоянии C^1B_2 . SO₂. Origins of unequal bond lengths in the C^1B_2 electronic state. I n - p e s K. K. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 120, № 1, 1—4 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Обсуждена природа экспериментально установленно- го наличия двойного минимума (и промежут. максиму- ма) Пт состояния C^1B_2 по координате антисимм. вал. кол. молекулы SO₂. Рассмотрены два варианта: двойной минимум — результат промотирования электро- на на несвязанную орбиталь и двойной минимум обус- ловлен вибронным взаимодействием между состояни- ми C^1B_2 и более высоколежащим 1A_1 . Выполнены рас- четы положения 5 наблюдаемых уровней состояния C^1B_2 при различных значениях энергетич. зоны $\Delta E(^1B_2 - ^1A_1)$, параметра взаимодействия α , гармонич. частот колебаний ν_3 в состояниях 1B_2 и 1A_1 . Наилучшее согла- сие получено для набора параметров (в см⁻¹): $\Delta E = 6500$, $\alpha = 2275$, $\nu_3(^1B_2) = 1454$, $\nu_3(^1A_1) = 385$.

В. М. Ковба

М.П.

X. 1987, 19, N 13

SO₂

1986

6 Д97. Расчеты методом эффективного остоного потенциала диоксидов и дигидридов серы, селена и теллура. Effective-core-potential calculations of sulphur, selenium and tellurium dioxides and dihydrides. Janszky J., Bartram R. H., Rossi A. R., Corradi G. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 124, № 1, 26—30 (англ.)

Методом эффективного остоного потенциала изучены основные электронные состояния SO_2 , SeO_2 , TeO_2 , SH_2 , SeH_2 и TeH_2 . Показано, что в случае SeO_2 и TeO_2 расчеты указывают на наличие устойчивых состояний этих молекул только при учете d -ф-ций Se и Te, причем совпадение с экспериментом значительно улучшается при использовании базиса с двумя d -орбиталями. Для SO_2 неучет d -ф-ций S хотя и не влияет на заключение о существовании устойчивой конфигурации, но заметно увеличивает расхождение расчета с эксперим. данными о структуре молекулы. Для дигидридов учет d -орбита-

М.Н

(H)
X

ф. 1986, 18, № 6

лей лишь несколько улучшает совпадение расчетной величины валентного угла с экспериментальной, практически не влияя на результаты расчетов длин связей. Делается вывод о повышении роли *pd*-гибридизации для соединений Se и Te. Показано, что учет электронных корреляций не позволяет получить правильные данные по энергиям диссоциации для SeO_2 и FeO_2 .

В. А. Куликов

SO₂

DM 23155

1986

11 B1024. Расчеты диоксидов и дигидридов серы, селена и теллура в приближении эффективного остоного потенциала. Effective-core-potential calculations of sulphur, selenium and tellurium dioxides and dihydrides. Jánosky J., Bartram R. H., Rossi A. R., Corradi G. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 124, № 1, 26—30 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в приближении эффективного остоного потенциала рассчитаны молекулы SO₂, SeO₂, TeO₂, SH₂, SeH₂ и TeH₂ в основном состоянии. Используются валентные двухэкспонентные базисы гауссовых ф-ций (ГФ) с учетом и без учета поляризац. d-ГФ на атомах S, Se и Te. Для каждой из молекул проведена оптимизация равновесных структурных параметров. Установлено, что хорошее согласие между теор. и эксперим. равновесными параметрами для диоксидов м. б. достигнуто только при включении в базис d-ГФ на атомах S, Se и Te. В то же время учет d-ГФ в случае дигидридов не является столь необходимым. Отмечена необходимость учета электронной корреляции для оценок энергии диссоциации исследованных молекул.

И. А. Тополь

ракетном,
стр., до, м.п.

2175

х. 1986, 19, № 11

SO₂

1986

Kryazev D. A.,
Myasoedov N. F., et al.

В-проб.
етнам.
сущия

Dokl. Akad. Nauk SSSR
1986, 287(6), 1415-18.

(сер. H₂O; III)

SO₂

1986

Kohl D. A., Hilder-
brandt R. L.

Электролиз.
газовые

THEOCHEM 1986,
30 (3-4), 381-5.

(сир. CO₂; III)

SO₂

[От. 24212] 1986

№ 1 Л327. Фотоэлектронная спектроскопия ионов SO_2^- , S_3^- и S_2O^- . Photoelectron spectroscopy of SO_2^- , S_3^- , and S_2O^- . Nimlos Mark R., Ellison G. Barney. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 12, 2524—2580 (англ.)

Получены фотоэлектронные спектры анионов SO_2^- (I), S_3^- (II) и S_2O^- (III). Образование ионов происходило в тлеющем разряде, а отбор осуществлялся с помощью масс-спектрометра. В качестве ионизирующего использовалось излучение Ag^+ -лазера (2,54 и 2,70 эВ). Анализ спектров позволил авторам получить величины электронного сродства SO_2 , S_3 и S_2O : 1,107, 2,093 и 1,877 соответственно. Определены также теплоты образования и геометрич. параметры I—III. Библ. 40. М. Т.

М.П.

S_3^- , S_2O^-



стр.

2574-2580

ср. 1987, 18, № 1

(72)



SO₂

(DM-25729)

1986

вольт.,
суперкрит.,
теорет.
расчет.

Strömberg A.,
Strömberg D.,
Wahlgren U., et al.
Acta chem. scand.,
1986, A40, N 9,
601-606.

SD₂

Парасов Ю. И.,

1986

Автореферат диссертации
на соискание ученой сте-
пени К. Физ.-мат. наук,
Москва, 1986.

струк-
тура,
потенц.
сп-49

Расстояние быстрых
электронов неравновесия
амальгамы ● или амальгамы.

SD₂

1985

19 Б1344. Диодная лазерная спектроскопия и спектроскопия двойного ИК — МВ-резонанса полосы ν_1 $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Diode laser and IR — MW double resonance spectroscopy of the ν_1 band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Lindenmayer Josef, Jones Harold. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 357—363 (англ.)

С использованием диодного лазерного спектрометра с высоким разрешением измерены колебат.-вращат. спектры поглощения молекул $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ в области полосы ν_1 . Приведены волновые числа и отнесение 241 линии. Отнесение проводили на основании расчета положений линий, полученного из анализа спектров двойного ИК — МВ-резонанса. Частоты переходов обработаны совместно с имеющимися в лит. частотами чисто вращат. переходов в состояниях $\nu_1=0$ и $\nu_1=1$ и рассчитаны спектро-

(ν_1 , М.П.)

X. 1986, 19, N 19

скопич. постоянные $A, B, C, \Delta_I \cdot 10^6, \Delta_{IK} \cdot 10^5, \Delta_K \cdot 10^3, \delta_I \cdot 10^6, \delta_K \cdot 10^5$ (ГГц): состояние $v_1=1$ —57,447565(42); 9,1274947(61), 7,8524889(57), 5,259(31), —9,894(60), 2,3483(37), 1,2982(34), 2,207(27), состояние $v_1=$
 $=0$ —57,384983(22), 9,1705092(41), 7,8895764(35), 5,281(32), —10,174(56), 2,3077(21), 1,3055(32), 2,094. Опре-
 делены также 7 постоянных типа H и h , к-рые пола-
 гаются равными в двух состояниях. С. Б. Осин

SO₂

OM 23864 1985

11 Б1180. Эффекты Зеемана в возбужденных состояниях SO₂, исследованные с суб-доплеровским разрешением. Zeeman effects in excited states of SO₂ investigated with sub-dopples resolution. Kullmer R., Demtröder W. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 6, 2712—2722 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Исследованы зеемановские расщепления в спектре возбуждения флуоресценции SO₂ при разных напряженностях магн. поля (520—1590 Гс) в сверхзвуковом коллимированном пучке со спектральным разрешением в 10 МГц. Исследовалась менее возмущенная слабая полоса 322,6 нм. Без магн. поля только 9 из 67 изученных линий в P-, Q- и R-ветвях проявили сдвиги за счет возмущений. Анализ эффекта Зеемана подтвердил, что магн. момент колебательно связанных состояний $\bar{B}^1B_1$ и $\bar{A}^1A_2$ обусловлен главным образом спин-орбитальным взаимодействием с триплетом $\bar{a}^3B_1$. Коррелирующее взаимодействие с основным состоянием не дало значит. вклада в эффект Зеемана. Б. Ф. Минаев

Me-A.

X. 1987, 19, N 11

SD₂

1986

7 ДЗ4 ДЕП. Определение равновесных геометрических параметров молекулы SO_2 на основании электронографических и спектральных данных. Тарасов Ю. И., Ищенко А. А., Спиридонов В. П.; Ред. ж. «Вестн. МГУ. Химия». М., 1986. 11 с. Библиогр. 20 назв. Рус. (Рукопись деп. в ВИНТИ 17.03.86, № 1815-В)

На основе кумулянтного представления теоретической кривой $SM(S)$ предложена процедура вычисления молекулярной составляющей интенсивности рассеяния быстрых электронов на ансамблях молекул, совершающих ангармонич. колебания. С привлечением результатов спектроскопич. исследований обработаны эксперим. данные, полученные методом счета электронов, и определена равновесная структура молекулы SO_2 .

Автореферат

(М.П.)

ср 1986, 18, № 7

SO₂

1986

105: 32095n Rotation spectrum of sulfur dioxide (³²S¹⁶O₂) in the (030) and (110) states. Van Riet, R.; Steenbeckeliers, G.; Stouffs, P.; Fayt, A. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Cathol. Louvain, 1348 Louvain-La-Neuve, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1984 (Pub. 1986). 93(4), 187-94 (Fr). The rotational transitions of ³²S¹⁶O₂ in the (030) ($J \leq 39$) and (110) ($J \leq 37$) states were obsd. at 500 °K by microwave spectrometry and treated by a calcn. including certain 2nd-order consts.

Racusan-
Cherny

C.A. 1986, 105, N4

SO₂

[от. 28370]

1987

Алматы А.Б., Венгаскерова Т. И. и др.

струк-
тура
колебл.
частоты

Таблицы рекомендуемых
справочных данных.

Депонирован. в ВНИИКИ

Госстандарта СССР 17.02.87г.

№ 295.

SO₂

OM 27211

1987

1 Л145. Спектры высокого разрешения полос ν_2 и $2\nu_2-\nu_2$ в SO₂. High-resolution measurements of the ν_2 and $2\nu_2-\nu_2$ bands of SO₂. Couderc L., Maki A. G., Olson Wm B. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 124, № 2, 437—442 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра (разрешение $5 \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$) исследованы спектры ИК-поглощения в области $450-602 \text{ см}^{-1}$ молекул SO₂ в газовой фазе. Наблюдаемая структура колебательно-вращательных спектров отнесена к переходм 010—000 и 020—010 молекул ³²S¹⁶O₂. Анализ частотного положения более чем 3000 линий позволил вычислить значения колебательно-вращательных молекулярных постоянных, обеспечивающих хорошее описание эксперимента. Полученные значения находятся также в согласии с литер. данными по спектрам чисто вращательных переходов.

К. Э. М.

М.Н.

ср. 1988, 18, N1

SO₂

Am. 27211

1987

107: 123562v. High-resolution measurements of the ν_2 and $2\nu_2$ bands of sulfur dioxide. Coudert, L.; Maki, A. G.; Olson, W. B. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 124(2), 437-42 (Eng). IR measurements were made on SO₂ at 450-602 cm⁻¹ with a resolu. of 0.005 cm⁻¹. The B-type bands due to the bending mode transitions 010-000 and 020-010 were assigned and analyzed for the ³²S¹⁶O₂ mol. A total of 3007 transitions were measured and fit for ³²S¹⁶O₂ with a std. deviation of 0.0004 cm⁻¹. Rovibrational consts. are given that fit the current measurements and the pure rotational transitions reported in the literature.

(V₂)

C. A. 1987, 107, N 14

SO₂

(OM 27962)

1987

107: 207782e Analysis of the sulfur dioxide absorption Fourier spectrum in regions 1055 to 2000 and 2200 to 2550 cm⁻¹. Guelachvili, G.; Naumenko, O. V.; Ulenikov, O. N. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 125(1), 128-39. (Eng). High-resoln. spectra of SO₂ were recorded at 1055-2550 cm⁻¹ using IR Fourier transform spectroscopy. More than 18,000 recorded lines were assigned to 9 cold and 4 hot vibration-rotation bands of SO₂. Precise values of the band centers, rotational and centrifugal parameters, and anharmonic consts. were detd. that allow reprodn. and prediction of the energy spectrum of SO₂ and its isotopic species with high accuracy.

спектр
получен.

C.A. 1987, 107, N 22

SO₂

DM-27962

1987

4 Л222. Анализ спектра ИК-поглощения SO₂ в области 1055—2000 и 2200—2550 см⁻¹. Analysis of the SO₂ absorption Fourier spectrum in regions 1055 to 2000 and 2200 to 2550 cm⁻¹. Guelachvili G., Naumenko O. V., Ulenikov O. N. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 125, № 1, 128—139 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра исследованы спектры ИК-поглощения SO₂ в области 1055—2550 см⁻¹. Измерено положение 18 000 линий, принадлежащих к девяти «холодным» и четырем «горячим» колебательно-вращательным полосам молекул SO₂. Определены точные значения положения центров полос, а также вращательные, центробежные и ангармонич. постоянные. Полученные значения молекулярных постоянных хорошо воспроизводят эксперим. положения линий в спектрах SO₂ и его изотопич. производных. Библ. 24. К. Э. М.

М.П.

ср. 1988, 18, № 4

SO₂

1987

106: 128346s Molecular emission in the electron-impact excitation of sulfur dioxide. Johnson, Christopher A. F.; Kelly, Stephen D.; Parker, John E. (Dep. Chem., Heriot-Watt Univ., Riccarton/Edinburgh, UK EH14 4AS). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1987, 83(2), 411-16 (Eng). Electron-impact excitation of SO₂ at energies greater than the threshold energy (3.85 ± 0.4 eV) results in optical emission mainly from the B¹B₁ state. Optical emission excitation functions were detd. at several wavelengths and demonstrate that the primary excitation process is dominated by prodn. of optically forbidden triplet states. The obsd. emission arises from intersystem crossing from these triplet states into the fluorescing B¹B₁ state.

(ср. испуск.
при возб.
электрох.
ударом)

с. А. 1987, 106, N 16.

SO₂

(Um. 27604)

1987

мис-
селю-
спектр
($\tilde{B}-\tilde{X}$)

Johnson C.A.F.,
Kelly S.D., et al., -
J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1987, Pt. 2,
83, N 6, 985-990.

SO₂ (2)

(Om. 27049)

1987

~~Om.~~ Kebabte P., Chowd-
hury S.,

Ae;

Chem. Rev., 1987, 87,

N3, 513 - 534.

SO₂

011 28 246

1987

4 Л1609. Лазерная спектроскопия диоксида серы: ν_1 полоса $^{32}\text{S}^{26}\text{O}^{18}\text{O}$ и ν_3 полоса $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Laser spectroscopy of sulfur dioxide: the ν_1 band of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and the ν_3 band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Lindenmayer Josef, Jones Harold. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 58—62 (англ.)

Исследованы спектры поглощения изотопных модификаций молекулы SO₂ методом спектроскопии ИК-микроволнового двойного резонанса с использованием перестраиваемого по частоте диодного лазера. Определено начало полосы ν_1 молекулы $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и полный набор ее колебательно-вращательных состояний. Измерены частоты 112 переходов ν_3 -полосы S^{18}O_2 с точностью $\pm 0,001 \text{ см}^{-1}$ и определены некоторые молекулярные постоянные. Определена равновесная структура молекулы S^{18}O_2 и моменты инерции. Показано, что равновесные структуры молекул S^{16}O_2 , $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и S^{18}O_2 практически совпадают.

М. Ю. Н.

М. Н.

ф. 1988, 18, 4

SV₂

DM 28246

1987

8 Б1303. Лазерная спектроскопия диоксида серы: полоса ν_1 молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и полоса ν_3 молекулы $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Laser spectroscopy of sulfur dioxide: the ν_1 band of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and the ν_3 band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Lindenmayer J., Jones H. «J. Mol. Spectrosc.», 1987, 126, № 1, 58—62 (англ.)

Методами двойного ИК—МВ-резонанса и диодной лазерной спектроскопии исследована вращат. структура ИК-полосы ν_1 $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и полосы ν_3 S^{18}O_2 . С привлечением МВ-данных для основного колебат. состояния определены значения вращат. постоянных и постоянных квартичного центробежного искажения для возбужденных состояний. Из полученных вращат. постоянных вместе с лит. данными по вращат. постоянным основного и первых возбужденных состояний молекул S^{16}O_2 , $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ и S^{18}O_2 вычислены равновесные структурные параметры молекулы SO_2 : длина связи $\text{SO} = 1,43081 \text{ \AA}$; угол $\text{OSO} = 119,322^\circ$.
Е. В. Алиева

М.А.

X. 1988, 19, № 8

500

(Am. 28246)

1987

107: 245400m Laser spectroscopy of sulfur dioxide: the ν_1 band of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ and the ν_3 band of $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$. Lindenmayer, Josef; Jones, Harold (Abt. Phys. Chem., Univ. Ulm, D-7900 Ulm, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1987, 126(1), 58-62 (Eng).

The combination of data obtained from IR-microwave ODR with those from pure rotational spectroscopy allowed a full set of consts. for the ν_1 band of $\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ to be detd. Tunable diode laser spectroscopy was carried out on the ν_3 band of S^{18}O_2 , and 112 transitions were measured with a nominal accuracy of $\pm 0.001 \text{ cm}^{-1}$. Band consts. were detd.

(21, 23)

C.A. 1987, 107, N 26

SO₂

1987

14 Б1028. Параметризация метода ППДП/2 и роль d -орбиталей в образовании связей в диоксиде серы и оксиде, диоксиде и дигидриде теллура. CNDO/2 parameterization and the role of d orbitals in the bonding of sulfur dioxide and tellurium monoxide, dioxide, and dihydride. Madacsi David P., Raksányi Kund, Bartram R. H. «J. Mol. Struct. Theochem», 1987, 150, № 1—2, 151—156 (англ.)

Полуэмпирическим методом ППДП/2 проведены расчеты геометрии и дипольного момента SO_2 в базисе, включающем $3d$ -орбитали серы, и не содержащем эти АО. Сопоставление с экспериментом и с неэмпирич. расчетами показывает, что исключение $3d$ -АО значительно завышает длину связи $\text{S}=\text{O}$ и занижает валентный угол. Предложена параметризация для $5s$ -, $5p$ - и $5d$ -орбиталей Te . В рамках этой параметризации проведены расчеты TeH_2 , TeO и TeO_2 . На основе сопоставления с экспериментом показано, что $5d$ -орбитали играют важную роль в образовании связей в оксидах и малосущественны в гидриде теллура. Э. Д. Герман

М.А.

+3

X

X. 1987, 19, N 14

SO₂

1987

check NO-
MURKIN

⊗ (H) SO

C.A. 1987, 107,
N 14

1071 123704: Ultraviolet and visible fluorescence produced by controlled electron impact on sulfur dioxide. Miller, K. Jr.; Becker, K. (Dep. Phys., Lehigh Univ., Bethlehem, PA 18015 USA). *Can. J. Phys.* 1987, 65(5), 530-4 (Eng). The emission spectrum in the UV and visible region of the optical spectrum (2000-8000 Å) produced by electron impact on SO₂ was studied under single-collision conditions. Two major features were obsd.: the $Al^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma^-$ system of the SO fragment (2400-2650 Å) and a broad, unstructured emission at 2500-4600 Å, which was identified as arising from the excitation-deexcitation of SO₂. Abs. emission cross sections for the SO system were measured for incident electron energies from threshold to 500 eV, and a value of 5.2×10^{-18} cm² was found at 100 eV with an uncertainty of $\pm \sim 18\%$. The max. in the emission cross section is at 30 eV (6.5×10^{-18} cm²). The measured threshold of 11.5 eV is ~ 1 eV above the min. energy required for partial fragmentation of SO₂ into SO ($A^3\Pi$) and a ground-state O atom, indicating that little translational kinetic energy is carried away by the dissociation fragments in the near-threshold region. A complex excitation-deexcitation scheme involving 3 different excited states of the SO₂ mol., e.g., the $5a_1 \rightarrow 3b_1$ 3B_1 states and the $5b_2 \rightarrow 3b_1$ 1A_2 state, produces the broad 2500-4600 Å emission feature. At 100 eV, an emission cross section of 12.2×10^{-18} cm² was measured for SO₂. Several O I and S I emission lines were identified, yet they are weak with estd. emission cross sections $< 10^{-21}$ cm² at 100 eV impact energy.

SO₂

1987

Tossell J.A., Lazzeretti
Paolo, et al.

no. 11. J. Magn. Reson., 1987, 73,
N2, 334-337.

( cer. HS⁻ ; III)

SO₂

1987

109: 13794f Rotational spectra of sulfur dioxide (³²S¹⁶O₂) in (000), (010) and (020) states. Van Riet, R.; Steenbeckeliens, G.; Stouffs, P.; Fayt, A. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Cathol. Louvain, 1348 Louvain-la-Neuve, Belg.). *Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. 1* 1986 (Pub. 1987). 100(2), 87-101 (Fr). New microwave measurements of ³²S¹⁶O₂ are given at 8-300 GHz. For the fundamental state, observations were of $J \leq 64$ and $K_a \leq 13$; for the (010) state, $J \leq 52$ and $K_a \leq 10$; for the (020) state, various identifications are proposed. The rotational and distortion consts. of the fundamental state are in accord with recent values which resulted from obsd. microwave transitions at 400-1000 GHz.

MB check,
M.N.

C.A. 1988, 109, N2.

SD₂

1987

4 Л197. Вращательный спектр диоксида серы $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в состояниях (0,0,0), (0,1,0) и (0,2,0). Spectre de rotation du dioxyde de soufre $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ dans les états (000), (010) et (020). Van Riet R., Steenbeckeliers G., Stouffs P., Fayt A. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1987, Ser. 1, 100, № 2, 87—101 (фр.)

Изучены микроволн. спектры молекулы $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в диапазоне 8—300 ГГц. Для основного колебательного состояния зарегистрированы вращательные переходы, отвечающие $J \leq 64$, $K_a \leq 13$; для состояния (0,1,0) $J \leq 52$, $K_a \leq 10$; для (0,2,0) $J \leq 48$, $K_a \leq 6$. Определены вращательные постоянные и постоянные центробежного искажения для состояний (0,0,0) и (0,1,0), а также оценены вращательные постоянные для состояния (0,2,0).
Е. А. Ж.

М.Н.

фр. 1988, 18, № 4

SD₂

1987

9 Б1221. Вращательные спектры диоксида серы $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в состояниях (000), (010) и (020). Spectre de rotation du dioxyde de soufre $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ dans les états (000), (010) et (020). Van Riet R., Steenbeckelirs G., Stouffs P., Fayt A. «Ann. Soc. sci. Bruxelles», 1987, Ser. 1, 100, № 2, 87—101 (фр.)

В диапазоне 8—300 гГц измерены микроволновые спектры поглощения молекулы $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$ в состояниях (000) ($J \leq 64$, $K_a \leq 13$), (010) ($J \leq 52$, $K_a \leq 10$) и (020) ($J \leq 40$). Приведены: положение и отнесение наблюдаемых линий; значения вращат. постоянных A , B , C и параметров центробежного искажения Δ_J , Δ_{JK} , Δ_K , d_J , d_K , H_J , H_{JK} , H_{KJ} , H_K , h_J , h_{JK} , h_K , G_{KJ} , G_K молекулы в указанных колебат. состояниях. В. М. Ковба

М.П.

X. 1988, 19, N 9

502

(DM-27553)

1987

Зюбина Т. С., Чаркин О. П.,
Зюбин А. С.,

струк-
тура
и
стабильн.

ЖС. МОРГАМ. ХЕМИИ,
1987, 32, N 11, 2616-
-2624.



SO₂

1987

УЗ Д62. Определение колебательных уровней энергии трехатомных молекул по методу гипервириального самосогласованного поля. Hypervirial SCF treatment for vibrational energy levels of triatomic molecules. Zúñiga J., Hidalgo A., Bernabé F., Fuster A., Requena A. «Int. J. Quantum Chem.», 1987, 32, № 4, 511—516 (англ.)

Колебательный гамильтониан трехатомной молекулы

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 L_i(q_i) + V_a(q_1, q_2, q_3),$$

где $L_i(q_i) = (p_i^2 + q_i^2) \omega_i^2 / 2$, $i = 1, 2, 3$; p, q — импульсы и безразмерные норм. координаты. Оператор V_a имеет вид разложения по степеням и произведениям q_1, q_2, q_3 и содержит 12 силовых постоянных 3-го и 4-го порядков. Полная волн. ф-ция представлена в виде произведения ортонормированных ф-ций $\varphi_{n_i}(q_i)$,

для которых получена система интегродиффер. ур-ний $\hat{H}\varphi_n = \varepsilon_n\varphi_n$, где $\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda\hat{H}(p)$; $\hat{H}^0 = (\omega p^2 + F q^2)/2$, $\lambda = 0$ или 1.

теорет.
расчет

④

Ф. 1988, 18, №3

03

$$\hat{H}(p) = \sum_{i=0, i \neq 2}^4 a_i q^i, \quad F = \omega + 2a_2.$$

Коэф. a_i являются ф-циями недиагональных матричных элементов координат q^i . По теореме Гельмана-Фейнмана.

$$\partial \varepsilon_n / \partial \lambda = \sum_{i=1, i \neq 2}^4 a_i Q^i,$$

$$\varepsilon_n^{j+1} = \sum_{i=1, i \neq 2}^4 a_i Q_j^i / (j+1),$$

где Q^i — диагональные матричные элементы q^i , порядок поправки $j \geq 0$. С помощью гипервириальной теоремы получена система рекуррентных соотношений для величин Q^i различных порядков. Для 19 и 13 наборов квантовых чисел n_1, n_2, n_3 получены численные значения гармонических и ангармонических колебат. энергий молекул SO_2 и O_3 .

М. А. Ковнер

SO₂

OM 31030

1988

109: 237486v Ab initio quantum chemical study of the molecular and spectroscopic (infrared and Raman) properties of sulfur dioxide: comparison with ozone. Bacskay, George B.; Rendell, Alistair P. L.; Hush, Noel S. (Dep. Theor. Chem., Univ. Sydney, 2006 Australia). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(9), 5721-30. (Eng). By using ab initio SCF, singles and doubles CI (CI-SD), and coupled-pair-functional (CPF) techniques with basis sets of triple zeta plus 2 polarization functions quality, the following properties were computed for SO₂ at its equil. geometry: dipole and quadrupole moments, elec. field gradients at the nuclei, static and frequency-dependent dipole polarizabilities (at $\lambda = 5154 \text{ \AA}$ and $\lambda = 6328 \text{ \AA}$), dipole and polarizability derivs., IR absorption intensities, and Raman scattering activities. The properties, when calcd. at the correlated level of theory were evaluated by the energy deriv. (ED) as well as the expectation value (EV) formalism. The results of the CPF(ED) calcs. are in good agreement with the available exptl. data and on the basis of addnl. 2-configurational MC-SCF studies the use of single ref. CI-SD and CPF wave functions is judged to be justified. The analogous calcs. on O₃ serve to highlight the considerable differences between the 2 mols., inasmuch as due to the considerably larger degree of near-degeneracy in O₃, properties that involve mixing of the lowest ¹B₂ excited state with the ¹A₁ ground state are predicted poorly at the SCF level as well as at the single ref. CI-SD and CPF levels of theory.

(neop. facrum)

C.A. 1988, 109, ~26

SO₂

OM. 28626

1988

1354312. [Роль колебательных и вращательных состояний] в преддиссоциации состояния $\tilde{C}^1B_2$ молекулы SO₂. Rovibrational dependences of the predissociation in the $\tilde{C}^1B_2$ state of SO₂. Ebata T., Nakazawa O., Ito M. «Chem. Phys. Lett.», 1988, 143, № 1, 31—37 (англ.)

С помощью перестраиваемого лазера на красителе возбуждали Фл из состояния $\tilde{C}^1B_2$ молекулы SO₂ в бесстолкновит. условиях (в сверхзвуковой струе) при комн. т-ре. Разрешение спектра испускания Фл составляло 40 см⁻¹, спектра возбуждения Фл — 0,2 см⁻¹. Обнаружено сокращение времени жизни Фл в обл. 45 400 см⁻¹, вызванное преддиссоциацией. Спектр Фл в сверхзвуковой струе сильно отличается от получаемого в обычных условиях при комн. т-ре. Анализ показывает, что преддиссоциация происходит при пересечении $\tilde{C}^1B_2$ с диссоциативным триплетным состоянием $^3A'$ и определяется не только вращат., но и колебат. энергией.

Р. Ф. Васильев

$\tilde{C}^1B_2$

X. 1988, 19, N 13

SO₂

1988

3 Б4475. Фотодиссоциация диоксида серы при 193 нм. Photodissociation of sulfur dioxide at 193 nm / Felder P., Effenhauser C. S., Haas B. M., Huber J. R. // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 148, № 5.— С. 417—422.— Англ.)

С использованием квадрупольного масс-спектрометра времяпролетным методом высокого разрешения на установке с импульсным сверхзвуковым молек. пучком SO₂ (наиболее вероятная скорость пучка, измеренная методом лазера-индуцированного выжигания провала в спектральном контуре SO₂, равна 770 м/с) измерены поступат. энергии фотофрагментов SO, возникающих при фотодиссоциации SO₂ светом 193 нм эксимерного лазера на ArF: $\text{SO}_2 + h\nu \rightarrow \text{SO}_2(C\bar{B}_2) \rightarrow \text{SO}(X^3\Sigma^-) + \text{O}(BP)$. ~~Времяпролетные распределения SO при различных углах по отношению к оси молек. пучка обнаруживают колебат. структуру, связанную с образованием SO в колебат. состояниях $v=0, 1, 2, 3$ с относит. заселенностями 5:23:67:5. Высокоэнергетич. порог распределения SO по поступат. энергиям согласуется с энергией диссоциации $D_0^0(\text{SO}_2) = 45\,400 \text{ см}^{-1}$.~~ В. Е. Скурат

(D₀)

SO₂

1988

8 Б1203. Лазерная спектроскопия молекул и кластеров. Laser spectroscopy of molecules and clusters / Demtröder W., Duchowicz R., Gress J., Foth H.-J., Kullmer R., Persch G., Schwarz M. // Phys. scr.— 1988.— T23.— С. 176—183.— Англ.

Краткий обзор посвященный достижениям (за последние 10 лет) в обл. субдоплеровской лазерной спектроскопии молекул и небольших кластеров в сверхзвуковых пучках. Рассмотрены эксперим. методы возбуждения и детектирования. Обсуждены: новая информация о структуре, взаимодействиях и динамике возбужденных электронных состояний молекул SO₂, NO₂, Li₂; результаты измерений времен жизни молекул; ступенчатое двухфотонное резонансное возбуждение высоколежащих ридберговских состояний молекулы Na₂.
Библ. 33.

В. М. Ковба

(обзор)

42

X. 1989, N 8

SO₂

1988

Ефремов Ю.С.

Оптика и спектроско-
пия, 1988, 64, N 5, 1021-
-1025.

и.п.

●
(сш. H₂S; III)

SO₂

OM 30599

1988

4 Л206. Об исследовании некоторых сверхслабых полос поглощения SO₂ в спектральной области 1055—2000 и 2200—2550 см⁻¹. On the analysis of some hyper-weak absorption bands of SO₂ in the regions 1055—2000 and 2200—2550 cm⁻¹ / Guelachvili G., Naumenko O. V., Ulenikov O. N. // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 131, № 2.— С. 400—402.— Англ.

С помощью фурье-спектрометра получен ИК-спектр поглощения газа SO₂ в спектральных интервалах 1055—2000 и 2200—2550 см⁻¹. Измерения велись при т-ре 298 К; давл. газа и длина оптич. пути составляли 1,004 мм рт. ст. и 32,17 м при регистрации спектра на первом интервале и 2,477 мм рт. ст. и 20,17 м при регистрации на втором интервале. Наряду с полосами большой и средней интенсивности обнаружены три сверхслабые полосы, отнесенные к колебательным переходам $2\nu_2 + \nu_3 - 2\nu_2$ и $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ молекулы ³²SO₂ и $2\nu_1$ молекулы ³⁴SO₂; значения частот линий указанных полос представлены в таблицах. Определены спектроскопич. параметры молекулы ³²SO₂ в состоянии (021) и молекулы ³⁴SO₂ в состоянии (200).

М.П.

ср. 1989, №4

SD₂

[om. 29393]

1988

Ischenko A.A., Spiri-
donov V.P., et al.;
Турк,
Григор
Корган.
г. Мол. Стрел., 1988,
172, ● 255-273.

SO₂

Am. 30599 1988

110: 15345e On the analysis of some hyperweak absorption bands of sulfur dioxide in the regions 1055-2000 and 2200-2550 cm⁻¹. Guelachvili, G.; Naumenko, O. V.; Ulenikov, O. N. (Lab. Infrarouge, Univ. Paris-Sid, 91405 Orsay, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 127(2), 400-2 (En);. Some hyperweak absorption bands (10 lines in each band) in the spectra of SO₂ were investigated: to $\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, $2\nu_2 + \nu_3 - 2\nu_2$ of the ³²SO₂ and $2\nu_1$ of the ³⁴SO₂ mol. 80-6 ($J \leq 31$, $K_a \leq 17$) And 20 ($J \leq 28$, $K_a \leq 7$) lines were assigned to the $2\nu_2 + \nu_3 - 2\nu_2$ and to $\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ bands of ³²SO₂, resp. Sixteen lines ($J \leq 33$, $K_a = 0, 1$) were assigned to the $2\nu_1$ band of ³⁴SO₂. The exptl. data were used to obtain the spectroscopic parameters of the vibrational states (021) of ³²SO₂ and (200) of ³⁴SO₂.

KONJUREALS.
NONOCTE

c.A. 1989, 110, N2

502

130353

1988

Краснов К.С.,
Филиппенко М.В.,

ОНИИТЭХИМ.

Л.М.
(обзор)

Деп. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.



SD₂

1988

108: 64769p Structural determinations using scaled moments of inertia: further tests with heavy-atom systems. Harmony, Marlin D.; Berry, Rajiv J.; Taylor, William H. (Dep. Chem., Univ. Kansas, Lawrence, KS 66045 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 127(2), 324-36 (Eng). The scaled moment of inertia theory described previously was used to compute exptl. near-equil. structures (r_{in}^0) for several heavy-atom triat. mols. including SO₂, S₂O, and ClNO. The results in all cases are in generally better agreement with the known r_e structures than are the conventional r_e structures. Computations of the vibration-rotation parameters involved in the theory, using anharmonic model force fields, aided understanding of the success of the method. Reliable structures can be expected when the parent mol. is either an all heavy-isotope isotopomer or an all light-isotope isotopomer. In conjunction with earlier work, r_{in}^0 structures should provide reliable alternatives or substitutes for r_e structures with no increase in data requirements.

структура,
мониторинг
устройства

(+2) ~~SD~~ S₂O,

ClNO

C.A. 1988, 108, n 8

SO₂

DM 30487

1988

3 Б1030. Критический обзор определения молекулярной структуры SO₂ по спектроскопическим данным. Critical survey of the molecular structure determination by the use of spectroscopic data for SO₂ / Morino Y., Tanimoto M., Saito S. // Acta chem. scand. A.— 1988.— 42, № 6—7.— С. 346—351.— Англ.

На основании всей совокупности имеющихся колебательно-вращат. спектроскопич. данных для молекулы SO₂ определены параметры равновесной геометрич. конфигурации. В рамках проведенного анализа учтено существование резонансов Ферми и Дарлинг-Деннисона, а также наличие корреляции между вращат. постоянными. Для равновесной конфигурации $r_e = 1,43080(1)$ Å и $\Theta_e = 119,329(2)^\circ$. Эти значения являются наиболее точными на сегодняшний день равновесными геометрич. параметрами для трехатомных молекул.

Б. И. Жилинский

М.П.

X. 1989, N 3

SO₂

(OM. 30487)

1988

/ 109: 216449v Critical survey of the molecular structure determination by the use of spectroscopic data for sulfur dioxide. Morino, Yonezo; Tanimoto, Mitsutoshi; Saito, Shuji (Sagamihara Chem. Res. Cent., Sagamihara, Japan 229). *Acta Chem. Scand.*, Ser. A 1988, A42(6-7), 346-51 (Eng). The equil. structure of the SO₂ mol. was calcd. on the basis of the second-order approxn., using recent accurate spectroscopic data. The effects of Fermi and Darling-Dennison resonance were eliminated from the rotational consts. of the excited vibrational states by the use of constrained least-squares. This resulted in $r_e = 1.43080(1)$ Å and $\theta_e = 119.329(2)^\circ$, which are the most accurate values of bond distances and bond angles reported for triat. mols. The inertia defect, Δ , = $-0.00027(143)$ amu Å², was reduced perfectly to zero within its std. deviation, as required by the theory.

У.А., СМУК
МУК. НАРА
МУК

C.A. 1988, 109, N24

SO₂

(DM. 29980)

1988

Yadav A., Surjan P.R. et al.,

meopem.
pacerem

J. Mol. Struct. Theochem.,
1988, 165, N 3-4, 297-307.

SO₂

1989

Bloor John E.

Int. J. Quantum Chem.

pacrim
resump.,

Quantum Chem Symp.

Vi;

1989, 23, 187-97.

(see. H₂S; III)

SO₂

1989

Demtröder W.

12 th Int. Symp. on Mol.

Beams, Perugia, May 29-

cl. n. June 2, 1989: Abstr. pap.

Perugia, [1989]: C. 2-5.

(cell. Li₂; III)

SO₂

1989

Engel I. M., Levine
R. D.

колебание.
взаимо-
действие.

Chem. Phys. Lett.
1989, 164(2-3),
270-8.

(сер. HCN; III)

SO₂

1989

Yamanouchi Kazuo,
Takeuchi Shingo et al.

Vi; Prog. Theor. Phys. Suppl.
1989,98, 420-9.

(cell.  NO₂; iii)

SO₂

DM. 35515

1990

Anderson A., Paldus B.A.,
et al.,

Spectrosc. Lett. 1990,
23, N 9, 1169-1182.

Cartesian Dynamics of
Simple  molecules

ИК-спектр,
рассеян.
спектр,
сум. поем.
расчеты.

III Non-Linear Triatomics
(C_{2v} symmetry).

$O=S=S$

(OM-3374)

1990

Binnewies M.,
Schnöckel M.,

г. термод.
гаммы

Chem. Rev. 1990, 90,
N1, 321-330.



$$O=S=O$$

[om. 33714]

1990

Δ

Binnewies M.,
Schnöckel M.,

У, термод.
данные

Chem. Rev. 1990, 90,
N1, 321-330.

SO₂

Ermarov K. V.,
Sutayev B. S. et al. 1990

и н.

J. Mol. Struct. 1990.
240. C. 295-303.

(ср. ● H₂O; III)

SO₂

[Am. 34298]

1990

Gentle I.R., Laver D.R.,
et al.,

nonperoxy-
enone

J. Phys. Chem. 1990,
94, N9, 3434-3437

Temperature

and Pressure

Dependence of the Electro-
optical Kerr Effect of
Sulfur Dioxide.

SD_2^{16}

[DM 34501a"] [1990]

Iachello F., Oss S.,

J. Mol. Spectrosc. 1990,

meop.
paerem

142, N 1, 85-107.

Overtone Frequencies and
Intensities of Bent XY_2

Molecules in the Vibron
Model.

SO₂

1990

Qm 35 162

/ 113: 240435r High-resolution measurements of the ν_2 and $2\nu_2-\nu_2$ bands of sulfur-34-labeled sulfur dioxide. Maki, A. G.; Kuritsyn, Yu. A. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1990, 144(1), 242-3 (Eng). The IR and microwave spectra were studied with a Fourier transform spectrometer of ³⁴SO₂ and rovibrational consts. are presented.

UK chempr

M.N.

C.A. 1990, 113, N26

SO₂

OM 33974
OM 35813

1990

' 112: 44715x Use of a heated nozzle to locate the hot bands in the 340-260-nm absorption of sulfur dioxide. Metha, G. F.; McGilvery, D. C.; Morrison, R. J. S.; O'Dwyer, M. F. (Dep. Chem., Monash Univ., Clayton, 3168 Australia). *J. Phys. Chem.* 1990, 94(1), 67-71 (Eng). Excitation spectra of SO₂ were measured in both a room-temp. and a heated (325°) glass nozzle, in the region 30 200-31 740 cm⁻¹. Twenty-two bands (some not previously recorded in the room-temp. spectrum) were identified as arising from hot absorption from ν_1 (15 bands), ν_2 (6 bands), and $2\nu_2$ (1 band) in the ground state. There are also regions of increased activity in the hot spectra, which cannot be recognized as discrete bands. Dispersed emission spectra are reported from a pair of bands (31 203.7 and 31 721.3 cm⁻¹) with the same upper state level, one arising from hot and one from cold absorption. In another case (31 332.0 cm⁻¹), hot and cold spectra indicate the presence of a weak cold band close to a strong hot one.

check

C.A. 1990, 112, N6

SO₂

От 34740

1990

3 Д65. Молекулярные структуры и гармонические силовые поля SO₂, S₂O и S₂O₂ по результатам совместного применения ССП-расчетов и анализа спектроскопических данных. The molecular structures and harmonic force fields of SO₂, S₂O, and S₂O₂ from combined spectroscopic and SCF results / Paulse Chris D., Poirier Raymond A., Wellington Davis R. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 172, № 1.— С. 43—48.— Англ.

Проведено систематич. изучение структуры и силового поля молекул SO₂, S₂O и S₂O₂ путем анализа данных микроволн. и ИК-спектроскопии, а также квантово-химич. ССП-расчетов. Впервые для каждой из молекул получены структурные параметры, соответствующие их оптимизированной геометрии. Отмечается, что найденное гармонич. силовое поле для молекулы S₂O₂ объясняет ее наблюдавшийся микроволн. спектр и предсказывает наличие 5 линий основных тонов в ИК-спектре цисизомера этой молекулы.

В. А. Морозов

М.А.

(72) 18

ср. 1991, №3

SO₂

от 34740

1990

4 Б1132. Молекулярные структуры и гармонические силовые поля для SO₂, S₂O, S₂O₂ на основании совместных спектроскопических и вычислительных методом ССП результатов. The molecular structures and harmonic force fields of SO₂, S₂O and S₂O₂ from combined spectroscopic and SCF results / Paulse Chris D., Poirier Raymond A., Davis Wellington R. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 172, № 1.— С. 43—48.— Англ.

Анализ силовых полей и равновесной геометрич. структуры молекул SO₂, S₂O и S₂O₂ выполнен при совместном использовании результатов спектроскопич. исследований в МВ- и ИК-диапазонах и результатов неэмпирич. расчетов. Расчет выполнен методом ССП в базисе из сгруппированных гауссовых функций с включением поляризац. функций. Гармонич. силовое поле получено аналитич. расчетом вторых пр-ных. Эмпирич. уточнение силового поля выполнено МНК с использованием ИК-данных для различных изотопич. модификаций и микроволновых данных для основного и ряда фундаментальных колебат. состояний. На основании найденного силового поля для молекулы S₂O₂ предсказан колебат. спектр цис-изомера. Б. И. Жилинский

М.П.

42

X. 1991, N 4

SO₂

Om 34 740

1990

См. пр. кн. 1990,
с. 113, N 2.2

113: 198449w The molecular structures and harmonic force fields of sulfur oxides (SO₂, S₂O, and S₂O₂) from combined spectroscopic and SCF results. Paulse, Chris D.; Poirier, Raymond A.; Davis, R. Wellington (Dep. Chem., Mem. Univ. Newfoundland, St. John's, NF Can. A1B 3X7). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 172(1), 43-8 (Eng). A systematic study of the structure and force fields of the mols. SO₂, S₂O and S₂O₂ was made using a combination of results from SCF calcs. and microwave and IR spectroscopy. It has been possible to arrive at equil. structures for these three mols. through zero-point av. geometries. A general harmonic force field for S₂O₂ is reported which accounts for the obsd. microwave spectroscopic data, and predicts the cis isomer of the mol. to have five observable IR fundamentals.

(72) 1X

c.A. 1990, 113, N 2.2

SO₂

1990

Sabapathy K.,
Ramswamy R.,

сильн. поств.-
среднеквадр.
амплитуды
колебаний

Acta Cenc. Indica,
Phys. 1990, 16 P (2),
83-90

● (see SO₂; III)

SO₂

от 34630 1990

6 Б1276. Гетеродинные частотные измерения SO₂ вблизи 41 ТГц (1370 см⁻¹). Heterodyne frequency measurements on SO₂ near 41 THz (1370 cm⁻¹) / Vanek M. D., Wells J. S., Maki A. G., Burkholder J. B. // J. Mol. Spectrosc.— 1990.— 141, № 2.— С. 346—347.— Англ.

Методом гетеродинных измерений с использованием опорных частот СО-лазера измерены в области частот 1349—1395 см⁻¹ колебательно-вращат. переходы полосы ν_3 двуокиси серы, SO₂. Центр полосы несколько смещен относительно ранее выполненных измерений и равен $\nu_0 = 1362,06022(5)$ см⁻¹. Выполненные измерения предназначены в кач-ве калибровочных частот и перекрывают промежуток между калибровочными частотами 1257—1340 см⁻¹ N₂O и 1460—1550 см⁻¹ CS₂.

С. Н. Мурзин

Х. 1991, № 6

SO₂

[Om. 34748]

1990

Von Moers F, Schmalzi -
gang K., et al.,

J. Chem. Phys. 1990, 92,
N11, 6391-6396.

Excited-state • dipole moments
SO₂

SO₂

OM 34577

1990

112: 207071a Vibrational level structure of highly excited sulfur dioxide in the electronic ground state. II. Vibrational assignment by dispersed fluorescence and stimulated emission pumping spectroscopy. Yamanouchi, Kaoru; Takeuchi, Shingo; Tsuchiya, Soji (Coll. Arts Sci., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 153). *J. Chem. Phys.* 1990, 92(7), 4044-54 (Eng). The dispersed fluorescence (DF) spectra for the fluorescence emitted from 8 single rovibronic levels in the C¹B₂ state are obsd. The vibrational quantum nos. for these levels are (ν_1', ν_2', ν_3') = (0,0,0), (0,1,0), (0,2,0), (0,0,2), (1,0,0), (1,1,0), (1,2,2), and (3,1,0). The 484 vibrational levels distributed between 4300 and 21,600 cm⁻¹ in the electronic ground state X¹A₁ are identified based on the assignment of the 1388 transitions in the DF spectra. The vibrational level energy is expressed by an anharmonic expansion with 19 coeffs. and the vibrational quanta for the three normal modes. The combination anal. of the DF and stimulated emission pumping spectra having the same upper rovibronic level clarifies the vibrational level structure in the vibrationally highly excited region above 17,000 cm⁻¹.

высокие ко-
лебам. уровни
основного

X¹A₁ состоят.

C.A. 1990, 112, N 222

SO₂

1991

Aihara Jun-Ichi.

u.k.

J. Mol. Struct. Theorchem.
1991. 228. C. 277-283.

(c.u. ● C₃H₅⁻; III)

SO₂

Om 35288

1991

114: 111042g Direct evidence for ν_1 -mode excitation in the infrared multiphoton excitation of sulfur dioxide. Lu, Cheng Zai; Goldman, Jay; Deliwala, Shrenik; Che, Kuei Hsien; Mazur, Eric (Dep. Phys., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA) *Chem. Phys. Lett.* 1991, 176(3-4), 355-60 (Eng). The IR multiphoton excitation was studied of SO₂ in bulk samples and in a supersonic jet with the 9R(22), 9R(32), and 9P(32) CO₂-laser lines. Coherent anti-Stokes Raman spectra reveal unambiguously that only the ν_1 -mode at 1151.3 cm⁻¹ is actually pumped: no $2\nu_2$ overtone pumping at 1035.2 cm⁻¹ is obsd. From the spectra one can directly det. the anharmonic consts. $x_{11} = -3.65 \pm 0.05$ cm⁻¹ and $x_{12} = -3.3 \pm 0.3$ cm⁻¹.

Konstantin
no comment

C.A. 1991, 114, N12

SO₂

1991

/ 116: 28395v Rotation-vibration interactions in highly excited states of sulfur dioxide and formaldehyde. McCoy, Anne B.; Burleigh, Darin C.; Sibert, Edwin L., III (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, WI 53706 USA). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(10), 7449-65 (Eng). Canonical Van Vleck perturbation theory (CVPT) is used to investigate rotation-vibration mixing of highly excited vibrational states of SO₂ and H₂CO. For SO₂ we find a nearly complete sepn. of the rotational and vibrational degrees of freedom, even for $J = 12$ and $E_{\text{vib}} = 11\,000\text{ cm}^{-1}$. In contrast, for H₂CO we observe extensive mixing between rotational and vibrational degrees of freedom at similar rotational excitation but with $E_{\text{vib}} = 8000\text{ cm}^{-1}$. Although α -axis Coriolis coupling is pronounced, b - and c -axis Coriolis couplings play an important additional role in mixing states with different K_a quantum nos. The implementation of CVPT, the choice of internal coordinates, and the convergence of the results are discussed in detail.

КОНСТАН. ГРАУС.
ГАННОУ. И ПРЕС.
БОУ. КОСМОЛА.

④ ☆

C. A. 1992, 116, N 4

1991

8 Д65. Вращательно-колебательные взаимодействия в высоковозбужденных состояниях SO_2 и H_2CO . Rotation-vibration interactions in highly excited states of SO_2 and H_2CO / McCoy Anne B., Burleigh Darin C., Sibert Edwin L. (III) // J. Chem. Phys.—1991.—95/ № 10.—С. 7449—7465.—Англ.

Каноническая теория возмущений Ван-Флека использована для исследования вращательно-колебательного смешивания возбужденных колебательных состояний в SO_2 и H_2CO . Для SO_2 найдено почти полное разделение вращательной и колебательной степеней свободы, даже для $J=12$ и $E_{\text{кол}}=11\,000\text{ см}^{-1}$. Напротив, для H_2CO обнаружено существенное смешивание вращательной и колебательной степеней свободы при аналогичном вращательном возбуждении и $E_{\text{кол}}=8000\text{ см}^{-1}$. Хотя преобладает кориолисово взаимо-

М.П.
 (11) 18
 Ф. 1992, № 8

действие вдоль оси a , однако кориолисовы взаимодействия вдоль осей b и c играют важную дополнительную роль в смешивании состояний с различными квантовыми числами K_a .

SO₂

[OM. 36005]

1991

Prajapati I. A., Ahmed S. M.,
et al.,

Pramana: J. Phys. 1991,
36, N2, 191-205.

Fluorescence studies of CS₂

and SO_2 at 121.6,
73.6-74.4 and 58.4 nm.

1992

17 B1107. Колебательная структура состояния 1A_2 молекулы SO_2 в области низких энергий. Vibrational structure in the low energy region of the 1A_2 state of SO_2 /Al-Adel F., Hamdan A., Binbrek O., Baskin J. S. //Chem. Phys. Lett —1992.—189, № 1.—С. 23—27.—Англ.

Получены спектры лазерно-индуцированной ФЛ SO_2 в области 348—334 нм. В эксперименте использовали Nd-YAG-лазер и метод расширения молек. пучка в вакуум. Низкая т-ра и, следовательно, узкий вращат. контур полос позволили точно определить начала колебат. полос. Полученные данные хорошо согласуются с предложенным ранее отнесением колебат. прогрессий 1A_2 — 1A_1 -перехода. Помимо этих полос зарегистрированы прогрессии с др. колебат. интервалами. В области энергий 347 нм колебат. полосы, относящиеся к системе 1A_2 — 1A_1 , перекрыты полосами 2B_2 — 3A_1 -перехода, к-рые примерно в пять раз интенсивнее.

Е. А. Пазюк

колебат.
структура
состоян. 1A_2

X: 1993, N 17

SO₂

1992

117: 260604f Vibrational frequencies of simple sulfur oxides: ab initio SQM and MC-SCF calculations; comparison. Flament, J. P.; Rougeau, N.; Tadjeddine, M. (DCMR, Ec. Polytech., 91128 Palaiseau, Fr.). Chem. Phys. 1992, 167(1-2), 53-60 (Eng). The values of the force const. and the vibrational frequencies of SO₂ and SO₃ were computed through the scaled quantum mech. (SQM) method and the multiconfigurational self consistent field (MCSCF) procedure. In the SQM procedure, the authors tested the good transfer of the scale factors from SO₂ to SO₃ for the normal modes which are equiv. in both mols. (i.e. all the modes, except the A₂ out-of-plane bending, evidently). The results obtained by the 2 methods for the vibrational frequencies are quite close and in good agreement with observation (namely a precision better than 4% for SO₃).

Calc. NCM,
(Pi
neop. pariet

(H) 1/2

C.A. 1992, 117, ix26



SO₃

SO₂

1992

17 Б1175. Дипольные моменты SO₂ в возбужденных состояниях. II. Excited-state dipole moments of SO₂. II /Heitz S., Schmalzigaug S., von Moers F., Hese A. //J. Chem. Phys. —1992.—97, № 10.—С. 7174—7179.—Англ.

С использованием узкополосного УФ-источника излучения на базе одномодового кольцевого перестраиваемого лазера на красителе с удвоением частоты выполнены измерения эффекта Штарка (поля до 12 кВ/см) на ряде линий вибронной структуры вблизи начал переходов

М.П.

X. 1993, N 17

B^1B_1 , A^1A_2 , X^1B_1 молекул SO_2 , охлажденных в сверхзвуковом пучке аргона ($T_{ар} \sim 6\text{ K}$). Средние значения электрич. дипольного момента (μ_b), полученные из анализа штарковских сдвигов для отдельных вращат. уровней возбужденного состояния в области полос 327,4; 322,6; 315,7 нм ($A \rightarrow X$), составили соотв. 1,77; 1,82; 1,75 Д. Какой-либо определенной колебат. зависимости μ_b не выявлено, поэтому для состояния A^1A_1 среднее значение определено в $1,79 \pm 0,05$ Д. В области более высоких энергий структура спектров осложнена вз-вием между уровнями состояний A^1A_2 , B^1B_1 , $\bar{a}^3B_1$ и высоколежащими уровнями состояния A^1A_1 , поэтому уменьшение μ_b при измерении штарковских сдвигов на полосе 313,3 нм (1,28 Д), лежащей в области начала перехода в состояние B^1B_1 , интерпретировано как влияние этого состояния. «Чистый» дипольный момент SO_2 в состоянии $\bar{B}^1B_1$ заметно меньше, чем в состоянии A^1A_2 . Сообщ. 1. // J. Chem. Phys. — 1990. — 92. — С. 6391.

В. М. Ковба

502

1992

Ka~~h~~ppi B.

Holonen L.

J. Chem. Phys

1992, 96 (4), 2933-41

д. техн.ч.
ор-ия
расчет

сеп. H₂S (III)

SO₂

1992

116: 264670b The 3_{ν_2} band of sulfur dioxide ($^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$): line positions and intensities. Lafferty, W. J.; Fraser, G. T.; Pine, A. S.; Flaud, J. M.; Camy-Pevret, C.; Dana, V.; Mandin, J. Y.; Barbe, A.; Plateaux, J. J.; Bouazza, S. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1992, 154(1), 51-60 (Eng). The room-temp. high-resoln. IR spectrum of the a-type 3_{ν_2} asym. S-O stretching overtone band of SO_2 was investigated at long path lengths (28-80 m) in two different labs. using difference-frequency laser and Fourier-transform IR spectrometers. The effectively unperturbed spectrum has been fit to a Watson asym.-top Hamiltonian to a precision of 0.0003 cm^{-1} to yield a band origin of $4054.00117(4) \text{ cm}^{-1}$ and a complete set of rotational and centrifugal distortion consts. The intensities have been fit using Herman-Wallis type corrections to account for the K_a dependence of the effective vibrational transition moment, giving a

(3 ν_2)

C. A. 1992, 116, N26

rotationless transition moment, $|\mu_1| = 3.1679(67) \times 10^{-33} \text{ C m}$
($0.0009497(20) \text{ D}$), and an integrated band intensity for $^{32}\text{SO}_2$, $S_v =$
 $3.79(15) \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$ ($0.0384(15) \text{ cm}^{-2} \text{ atm}^{-1}$), at 295 K. The
present results furnish data necessary to test the recent assignment
of a feature in the IR spectrum of Venus to the $3v_3$ band of SO_2 .

SO₂

[om. 36662]

1992

$A^1A_2 - X^1A_1$ Ohta N., Yamazaki I., et al.,

J. Phys. Chem. 1992, 96,
6124-6126.

Observation of  Stark Quantum

Heats for single Rotational
Level Excitation of SO_2 .

SO₂

1992

Yu Dake, Laek Arvi,
et al.

(А, меор.
ракрѣм)
мер иог.
св-ва

J. Phys. Chem. 1992,
96 (14), 6031-8.

$C_p^\circ, S^\circ, H^\circ - H_0^\circ$

$\Delta_f H, \Delta_f G$



(сеч. N₃; III)

SO₂

1992

Ж. Чекмр

б. о. а.

3900-1700 Å

ab initio pacem

120: 230366z Ab initio investigations of the sulfur dioxide electronic spectrum in the 3900-1700 Å region. Zellmer, Robert J. (Ohio State Univ., Columbus, OH USA). 1992. 343 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA9307888. From *Diss. Abstr. Int. B* 1993, 53(11), 5744-5.

C.A. 1984, 120, N 18

SO₂

1993

120: 173900t Periodic orbits as a probe to reveal exotic states in vibrationally excited molecules: the saddle-node states. Farantos, Stavros C. (Inst. Electron. Struc. Laser, FORTH, Crete, Greece 711 10). *Laser Chem.* 1993, 13(2), 87-99 (Eng). The author presents theor. results which show the existence of isomerizing localized quantum states above potential barriers for the excited electronic ¹B₂ states of SO₂ and O₃. These states are assigned by periodic orbits, which emerge from saddle-node bifurcations, the characteristic of which is the simultaneous generation of two families of periodic orbits, one stable and one unstable. Similar isomerizing states and bifurcations have been found for other mols., and this leads to the conclusion, that the appearance of saddle-node type states may be a generic phenomenon for mol. potentials with barriers.

теор. расчет
момента ф-ции

(H) O₃

C.A. 1994, 120, N14

32 J¹⁶O₂

1993

119 36575f A reanalysis of the (010), (020), (100), and (001) rotational levels of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Flaud, J. M.; Perrin, A.; Salah, L. M.; Lafferty, W. J.; Guelachvili, G. (Lab. Phys. Mol. Appl., Univ. Pierre et Marie Curie, 76252 Paris, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 160(1), 272-8 (Eng). Using high-resoln. IR spectra, a reanal. of the ν_2 , $2\nu_2 - \nu_1$, and ν_3 bands of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ was performed. These IR data, combined with the available heterodyne and microwave data, were fitted within their resp. exptl. accuracies. For the (010) levels it was sufficient to use a Watson-type Hamiltonian, whereas it proved necessary to consider explicitly interaction terms for the [(020)(100)(001)] states. More precisely a $\Delta K = 2$ quadratic distortion-correction to the Fermi interaction term was used to treat the interactions between (020) and (100) and a $\Delta K = 3$ Coriolis-type term to treat the interactions between (100) and (001).

(UK, ν_2 , ν_1 , ν_3)C.A. 1993, 119, N4

SO₂

1993

119: 236851e Sulfur dioxide: a refined analysis of the $3\nu_3$ band and determination of equilibrium rotational constants. Flaud, J. M.; Lafferty, W. J. (LPMA, Universite Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, Fr.). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 161(2), 396-402 (Eng). The spectrum of the $3\nu_3$ overtone band of $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ was refitted using a Hamiltonian matrix treatment which includes a Fermi-like interaction term between the (003) and (131) states. The fitting consts. obtained for the higher-order terms now have values consistent with those of the ground state. The rotational consts. of a no. of vibrational states were fitted to obtain equil. rotational consts. and a set of rotation-vibration interaction consts. An improved equil. structure was obtained.

(3 ν_3)

C.A. 1993, 119, N 22

302

1993

118: 69216x The 2_{-3} band of sulfur dioxide $^{32}\text{S } ^{16}\text{O}_2$ line positions and intensities. Lafferty, W. J.; Pine, A. S.; Flaud, J. M.; Camy-Peyret, C. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1993, 157(2), 499-511 (Eng). The room temp. high resolu. IR spectrum of the 2_{-3} band of $^{32}\text{S } ^{16}\text{O}_2$ in the $3.7 \mu\text{m}$ region was studied with a difference-frequency laser spectrometer and completely analyzed. The rotational levels of the upper state (002) were reproduced to an accuracy of $\pm 0.0003 \text{ cm}^{-1}$ using a Hamiltonian matrix which explicitly takes into account the weak Fermi-type interaction coupling the rotational levels of the (002) state with those of the (130) state yielding a band origin $\nu_0 = 2713.332650(6) \text{ cm}^{-1}$ and a complete set of rotational consts. and a Fermi-type interaction const. This band exhibits a pronounced Herman-Wallis effect. However, the intensities were very satisfactorily fit leading to a precise vibrational transition moment for the 2_{-3} band. Finally, a comprehensive set of line positions and intensities was generated. For this band, the integrated band intensity was found to be $S_0(T = 295 \text{ K}) = 9.81(20) \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-1}$. A set of harmonic frequencies and vibrational anharmonic consts. were obtained. The effects of Darling-Dennison interaction appear to be very small.

(223)

C.A. 1993, 118, N8

SO₂

1993

Павлюченко А. И.

л. п.,

Ис. прикл. спектроско-
песч. 1993. 58, № 3-4. С.

De

358-365.

(сеч.  H₂O; III)

SO₂

1993

118: 245181t An automatic device for precision photometry and mathematical treatment of molecular electron diffraction pictures. Spiridonov, V. P.; Il'yakova, E. V. (Russia). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim.* 1993, 34(1), 35-8 (Russ). A photometer was built for scanning electron diffraction patterns from mols. in the gas phase. It gives much higher accuracy than conventional app. The app. was demonstrated for SO₂. The results agreed with those detd. using other instruments.

(Электро-
граф.
исспов.)

© A. 1993, 118, N 24

SO₂

(от. 36996)

1993

Смирнов В. П.,

растворен.
геометрия

изв. АН СССР, Сер. физическая,
1993, 57, N2, 105-III.

Анализ данных метода газовой электро-
кографии на основе молекулярных
потенциалов. Ф-ий.



SO₂

1994

Д 22 Б159. Экспериментальное и теоретическое исследование фотоэлектронного спектра валентной оболочки диоксида серы. An experimental and theoretical study of the valence shell photoelectron spectrum of sulphur dioxide / Holland D. M. P., MacDonald M. A., Hayes M. A., Baltzer P., Karlsson L., Lundqvist M., Wannberg B., Niessen W. von // Chem. Phys. — 1994. — 188, № 2 - 3. — С. 317—337. — Англ. *М. П.*

М. П.

С использованием возбуждений He-I, He-II и синхротронного излучения изучен полный фотоэлектронный спектр валентной оболочки SO₂. Проведен детальный анализ колебательной структуры полос, отвечающих ионизации внешних валентных орбиталей. Обнаружена новая спутная полоса с колебательной структурой в области около 19 эВ. Спектры интерпретированы на основании расчетов методом многочастичной ф-ции Грина. Библ. 59. Н. Л.

Х. 1995, № 22

SO₂

1994

7 Б1235. Инфракрасный спектр димера диоксида серы.
The infrared spectrum of the sulphur dioxide dimer /Nxu-
malo L. M., Ford T. A. //EUCMOS XXII: 22nd Eur. Congr.
Mol. Spectrosc., Essen, Sept. 11—16, 1994: Book Abstr.
.—Essen, 1994 .—С. 419 .—Англ.

Измерены ИК-спектры SO₂, изолированного в азот-
ной и аргонной матрицах, при криогенных условиях.
Спектры интерпретированы в рамках присутствия
димерного электронного донорно-акцепторного ком-
плекса. Структура, энергетика и спектр димера пред-
сказаны также неэмпирически, на уровне Хартри — Фока
в базисном наборе 6-31ГФ*. Результаты обсуждены в
свете ранее полученных матричноизолированных спек-
тров, современных неэмпирич. расчетов и спектров
молек. пучков в газ. фазе.

И. Е. Кузинец



И.Н.

Х. 1995, № 7

SO₂

1994

Shchegolev B. F.
Fiz. Khim. Stekla
1994, 20 (1), 139-43.

теор.
расчет
эксперим.
сравн. теор.
и

(сравн. TeO₂; III)

SO₂

1994

(³B₁)

Chenmp
papers

122: 117903a Time-resolved phosphorescence spectra of matrix-isolated SO₂(³B₁). Zhou, Mingfei; Wang, Zhaohui; Yu, Min; Zheng, Qike (Inst. Laser Chem., Fudan Univ., Shanghai, Peop. Rep. China). *Huaxue Wuli Xuebao* 1994, 7(4), 302-6 (Ch). Laser-induced emission of SO₂ isolated in Ar, N₂ and CO matrixes were measured after its excitation to ¹B₁, ¹A₂, and ³B₁ states. The vibrational bands of the emission spectra of SO₂(³B₁ state) can be resolved in the Ar and N₂ matrixes. The band width in CO matrix is so wide that the vibrational structure is barely seen. The dispersed fluorescence of the ¹B₁ and ¹A₂ states are structureless. The fluorescence excitation spectra of the singlet and triplet are also measured. The similarity of the excitation spectra of the singlet and triplet states ranging from 276 to 284 nm implies that the intersystem crossing could be observable. The time resolved emission of the singlet state and that of triplet state indicate that the time const. of the intersystem crossing is 2-3 μs. The matrix effect on the coupling of the singlet and triplet states is discussed.



C.A. 1995, 122, N10

SO₂

1995

123: 324760n⁻ Unexpectedly rich vibronic structure in supersonic jet spectra of sulfur dioxide between 360 and 308 nm. Baskin, J. S.; Al-Adel, F.; Hamdan, A. (Laser Research Laboratory, King Fahd University of Petroleum and Minerals, Dhahran, Saudi Arabia 31261). *Chem. Phys.* 1995, 200(1,2), 181-99 (Eng). An extensive vibrational resolu. study of SO₂ between 27780 and 32500 cm⁻¹, spanning absorption to the ³B₁, ¹A₂, and ¹B₁ electronic states, has been carried out via fluorescence excitation in a mol. beam, achieving substantial improvements in sensitivity and rotational cooling over previous studies. Characterization of the dependence of transition intensities on mol. beam conditions has been used to identify and sep. the contributions of cold and hot transitions in the spectra. Vibrational-mode-selective, carrier-gas-dependent cooling is obsd. and is instrumental in the identification of a group of vibrational levels exhibiting novel Franck-Condon patterns and little or no cold absorption. At least 135 vibronic levels are identified in the energy range studied, adding 71 to the previous total reported from our own and other labs. Eight levels below 29000 cm⁻¹ are assigned to the ³B₁ electronic state, supported by a set of anharmonic consts. to approx. the obsd. vibrational structure. In the higher energy region, the accepted two-singlet-electronic-state model is compared to the exptl. results and shown to be inadequate to account for the large no. of obsd. levels.

CHAMP

NOVUS.

³B₁, ¹A₂, ¹B₁

C-A. 1995, 123, N24

030

1995

Cohen, E.A.; Hillig, K.W.,
et al.,

Крайзам.
спектры
изотопов
и м.п.

у. Мол. Struct., 1995,
352/353, 273-82.

(all. O₃;



III)

SO₂

1995

F: SO₂

P: 3

05.D.0078. Циклический и супероксидный изомеры SO[2]. The ring and superoxide isomers of SO[2] / Kellogg Charles B., Schaefer Henry F. (III) // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 10. - С. 4177-4183. - Англ.
эмпирическим методом ССП МО ЛКАО с учетом корреляции электронов по различным схемам и методом МК ССП в базисах до трехэкспонентного с включением поляризационных ф-ций до f-типа рассчитаны линейный, циклический и супероксидный изомеры SO[2]. Обнаружено, что наиболее выгодна линейная структура, а циклический и супероксидный изомеры выше по энергии на 111 и 104 ккал/моль соответственно. Показано, что ни один из этих двух изомеров не может объяснить все особенности УФ-спектров SO[2].

X.1996, №5.

1995

SO₂

122: 225351c The ring and superoxide isomers of SO₂. Kellogg, Charles B.; Schaefer, Henry F, III (Cent. Computational Quantum Chem., Univ. Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(10), 4177-83 (Eng). The superoxide isomer of sulfur dioxide was first proposed by Myerson, Taylor, and Hanst in 1957 [*J. Chem. Phys.* 26, 1309 (1957)] as a possible intermediate in the combustion of CS₂, COS, and H₂S as well as a possible source of some troublesome UV absorptions in the spectra assocd. with those combustion processes. Subsequent exptl. work on SO₂ has also referred to the hypothesized asym. structure. Single ref. post Hartree-Fock methods, including CI with single and double excitations (CISD), coupled cluster singles and doubles (CCSD), and coupled cluster singles and doubles with perturbative triples [CCSD(T)], as well as multireference CI (MRCISD) performed with CI natural orbitals (CINOs) have been employed in the interest of characterizing the relative energies of the open, ring and superoxide isomers of SO₂. The largest basis used was a triple- ξ plus double polarization function set with f-type functions appended to each atom [TZ2P(f)]. The ring and superoxide isomers are predicted to lie approx. 111 and 104 kcal mol⁻¹, resp., above the open isomer ground state. Based upon these energy sepns., it is predicted that neither the ring nor superoxide isomers are responsible for the troublesome UV absorption continuum, as postulated by Myerson et al. Moreover, neither the ring nor the superoxide structure is the source of the spectroscopic features very recently obsd. below 100 kcal mol⁻¹ by Dai's group.

(Kono, Di)

C.A. 1995, 122,
N18

SO₂

1995

123: 68898n Laser-induced fluorescence spectroscopy of the $C^1B_2-X^1A_1$ band of jet-cooled SO_2 : rotational and vibrational analyses in the 235–210 nm region. Yamanouchi, Kaoru; Okunishi, Misaki; Endo, Yasuki; Tsuchiya, Soji (Department of Pure and Applied Sciences, College of Arts and Sciences, The University of Tokyo, Komaba, Meguro-ku, Tokyo, Japan 153). *J. Mol. Struct.* 1995, 352/353, 541–59 (Eng). Laser-induced fluorescence spectra of the $C^1B_2-X^1A_1$ band of SO_2 in the 235–210 nm region were measured under jet-cooled conditions. By high-resoln. ($\approx 0.08 \text{ cm}^{-1}$) measurements of the vibronic transitions, which were well sepd. from each other due to rotational and vibrational cooling, the rotational consts. and term values for the 33 vibrational levels were detd. For the other four levels, only the term values were detd. A total of 573 ro-vibronic transition wavenumbers are presented. It was found that the C rotational consts. exhibit considerable fluctuation over the whole obsd. energy range due to the C-axis Coriolis interaction. The obsd. vibrational term values were utilized for the extension of the secure vibrational assignments to the higher energy region. However, due to the strong 1:2 Fermi interaction between ν_1 (sym. stretch) and ν_3 (anti-sym. stretch), definitive vibrational assignments for the transitions to the vibrational levels above 2000 cm^{-1} were found to be

($C^1B_2-X^1A_1$)
 Kon.-Ip. Aramug,
 Sakp 6038.
 Cnekmp
 $P_2 = 517-90 \text{ cm}^{-1}$

C.A. 1995, 123, N6

intrinsically impossible except for the $C(v_1, v_2, v_3) = (1, n, 0), (2, n, 0), (3, n, 0)$ and $(1, n, 2)$ vibrational levels. By constructing the three-dimensional Hamiltonian with a vibrational potential expanded to the fourth-power of the normal coordinates, the expansion coeffs. were detd. by the least-square fitting to the obsd. term values and those of several known low-lying vibrational levels. The Franck-Condon intensity pattern calcd. using the vibrational wavefunctions derived as eigenfunctions was consistent with the obsd. pattern below the $C(1, 4, 2)$ band, above which the predissocn. occurs. The derived vibrational eigenfunctions showed that the ν_1 and ν_2 modes mix with each other significantly in the higher energy region above 2000 cm^{-1} , which is consistent with the difficulty encountered in assigning the definitive ν_1 and ν_2 vibrational quantum nos. The vibrational wavefunctions were further utilized to analyze the C-axis Coriolis interaction, and the counterpart levels of the perturbation having an odd ν_2 quantum no. were identified for the low-lying vibrational levels. By measurements of the hot-band transitions from $X(0, 1, 0)$, the ν_2 (bend) fundamental wavenumber of the electronic ground $X^1 A_1$ state was detd. to be $517.90(3) \text{ cm}^{-1}$.

SD₂

1996

124: 355139s The high-precision millimeter-wave spectrum of $^{32}\text{SO}_2$, $^{32}\text{SO}_2(\nu_2)$, and $^{34}\text{SO}_2$. Alekseev, E. A.; Dyubko, S. F.; Ilyushin, V. V.; Podnos, S. V. (Lab. Mol. Spectroscopy., Ukrainian Acad. Sci., Kharkov, Ukraine 310002). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 176(2), 316-320 (Eng). Frequencies of a no. of $^{32}\text{SO}_2$, $^{32}\text{SO}_2(\nu_2)$, and $^{34}\text{SO}_2$ transitions were measured at 50-150 GHz. The frequency detn. error was -1-3 kHz. Such accuracy is -2 orders of magnitude better than that of previous studies. By combining these data with previously available submillimeter and FIR measurements, greatly improved sets of the parameters of Watson's A-reduced Hamiltonian were obtained in the I^r representation.

(new spectr)

C. A. 1996, 124, N 26

1996

F: SO₂

P: 3

6B1286. Высокоточный миллиметровый спектр {32}SO[2], {32}SO[2] ('ню'[2]) и {34}SO[2]. The high-precision millimeter-wave spectrum of {32}SO[2], {32}SO[2]('ню'[3]), and {34}SO[2] / Alekseev E. A., Dyubko S. F., Ilyushin V. V., Podnos S. V. // J. Mol. Spectrosc. - 1996. - 176, N 2. - С. 316-320. - Англ.

На миллиметровом спектрометре в области частот 50-150 ГГц с точностью 10 кГц измерены вращат. спектры {32}SO[2] и {34}SO[2] в основном и {32}SO[2] в возбужденном $v=1$ колебат. состояниях. Анализ спектров выполнен с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с привлечением известных субмиллиметровых и длинноволновых ИК-данных с включением 24 спектроскопич. постоянных. Полученные результаты существенно уточняют ранее выполненные измерения.

PMX 1997

SO₂

[Om 38538] 1996

- 1) 23Б1353. Альтернативные интерпретации колебательной структуры системы полосы $^3B_1 - X^1A_1$ SO₂. Alternative assignments for the vibrational structure of the $^3B_1 - X^1A_1$ band system of SO₂ / Joens J. A. // Chem. Phys. Lett.— 1996.— 261, № 6.— С. 659-664.— Англ.

Сопоставлены две возможные интерпретации 19 частот в области 25 768–29 100 см⁻¹ колебат. структуры полосы $^3B_1 - X^1A_1$ спектра поглощения SO₂, отличающиеся наборами колебат. квантовых чисел. Приведены молекулярные постоянные состояния 3B_1 . Анализ относит. интенсивностей линий и их изотопич. сдвигов (¹⁶O—¹⁸O) не позволил сделать выбор между двумя вариантами.

М. А. Ковнер

М.А.

X. 1997, N 22

SO₂

(Om. 38538/1996)

126: 96130m Alternative assignments for the vibrational structure of the $^3B_1-X^1A_1$ band system of SO₂. Joens, Jeffrey A. (Department of Chemistry, Florida International University, Miami, FL 33199 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 261(6), 659-664 (Eng), Elsevier. Two assignments for the $^3B_1-X^1A_1$ band system of SO₂ are presented. Vibrational consts. for the triplet state are calcd. for both assignments. Both assignments are consistent with existing exptl. information on band locations, band intensities, and isotopic shift data. Possible exptl. methods to distinguish between the two assignments are briefly discussed.

($^3B_1-X^1A_1$)
konf.
no cm -

C. A. 1997, 126, N⁷

F: SO₂

P: 3

1996

6B1273. 'ню'[1]+'ню'[3]- и 2'ню'[1]+'ню'[3]-системы полос SO₂.
Положения линий и интенсивности. The 'ню'[1]+'ню'[3] and
2'ню'[1]+'ню'[3] band systems of SO₂: Line positions and intensities /

Lafferty W. J., Pine A. S., Hilpert G., Sams R. L., Flaud J.-M. // J. Mol. Spectrosc. -
1996. - 176, N 2. - С. 280-286. - Англ.

На лазерном спектрометре, работающем на разностной частоте, в области
частот 2300-3700 см⁻¹ с доплеровским разрешением измерены ИК-спектры
'ню'[1]+'ню'[3]-, 'гамма'[1]+'гамма'[2]+'гамма'[3]-'гамма'[2]- и 2'ню'[1]+'ню'[3]-
полос {32}SO₂ и 'ню'[1]+'ню'[3]-полосы {34}SO₂. Анализ спектров
выполнен с использованием гамильтониана Уотсона с учетом центробежного
искажения и слабого резонанса Ферми между (101)- и (021)-состояниями.
Определены интегральные интенсивности полос и дипольные моменты
переходов.

РМХ 1997

SO₂

[Vol. 38 504]

1996

Li - Shien Chen, Cheng-I
Lee, and Yuan-Pern Lee,

J. Chem. Phys., 1996, 105(21),

9454

Isomers of SO₂ ● : Infrared
absorption at 800 in solid argon

1996

SO₂

($\nu_1 + \nu_3$)
($2\nu_1 + \nu_3$)

C. A. 1996, 124,
N 26.

124: 355136p The $\nu_1 + \nu_3$ and $2\nu_1 + \nu_3$ band systems of SO₂: line positions and intensities. Lafferty, W. J.; Pine, A. S.; Hilpert, Georg; Sams, R. L.; Flaud, J.-M. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1996, 176(2), 280-286 (Eng). The room temp. IR spectra of the a-type $\nu_1 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2$, and $2\nu_1 + \nu_3$ bands of ³²SO₂ and the $\nu_1 + \nu_3$ band of ³⁴SO₂ were recorded using a difference-frequency laser spectrometer and completely analyzed. It is possible to reproduce the rotational energy level for the (201) and (111) vibrational states using a single Watson-type Hamiltonian, but it is necessary to consider the weak Fermi-type interaction coupling the rotational energy levels of the (101) state with those of the (021) vibrational state to fit the energy levels of (101). The band centers, $\nu_0(101)$, $\nu_0(111)$, and $\nu_0(201)$, are 2499.87003(20), 3010.31730(20), and 3629-76,194(30) cm⁻¹, resp., where the uncertainty cited includes an est. of the uncertainty in the wavenumber calibration. For the ³⁴SO₂ isotopic species, $\nu_0(101)$ is 2475.82917(57) cm⁻¹. A complete set of rotational and centrifugal distortion consts. was obtained for each state. Precise line intensities were detd. for each band yielding improved band transition moments. The integrated band intensities at 296 K are $S_\nu(\nu_1 + \nu_3) = 0.539(23) \times 10^{-18}$, $S_\nu(\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_2) = 0.425(18) \times 10^{-19}$, and $S_\nu(2\nu_1 + \nu_3) = 9,607(25) \times 10^{-20}$ cm⁻¹/(mol. cm⁻²). The total integrated intensity if the $\nu_1 + \nu_3$ band system was also detd. at 0.11 cm⁻¹ resolu. from the dil. mixts. of SO₂ in N₂ at atm. pressure. The value of $S_\nu(\nu_1 + \nu_3)$ detd. from this technique in parentheses are estd. exptl. errors.

SO₂

1996

теорет.
расчет
структур, γ

124: 156538w Computational Study of the Mono- and Dianions of SO₂, SO₃, SO₄, S₂O₃, S₂O₄, S₂O₆, and S₂O₈. McKee, Michael L. (Department of Chemistry, Auburn University, Auburn, AL 36849 USA). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(9), 3473-81 (Eng). DFT theory (B3LYP/6-311+G(2d)//B3LYP/6-31+G(d)) was used to characterize sulfoxy anions and dianions as large as S₂O₈²⁻, while post-HF theory ([QCISD(T)/6-31+G(2d η)]//MP2/6-31+G(d)) was used for systems as large as S₂O₃²⁻. Adiabatic and vertical ionization potentials were computed to assess the gas-phase stability of the dianions. Three dianions (S₂O₆²⁻, S₂O₈²⁻, and SO₄²⁻·4H₂O) are predicted to have pos. vertical ionization energies. S₂O₈²⁻ is predicted to have a neg. (exothermic) adiabatic ionization potential; however, a large predicted geometry change between the dianion and monoanion rationalizes the measurable exptl. lifetime of the dianion in the gas phase. Isotropic hyperfine coupling consts. for ³³S were calcd. for the sulfoxy monoanions and compared with expt.

(46) $\boxtimes$

C. A. 1996, 124, v12.

1996

F: SO₂

P: 3

10Б146. Теоретическое изучение моно- и дианионов SO₂, SO₃, SO₄, S₂O₃, S₂O₄, S₂O₆ и S₂O₈. Computational study of the mono- and dianions of SO₂, SO₃, SO₄, S₂O₃, S₂O₄,

S₂O₆, and S₂O₈ / McKee M. L. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 40. - С. 16444. - Англ.

Место хранения ГПНТБ Дано исправление к стр. 3480 этого тома журнала.



РМХ 1997

SO₂

1996

/ 125: 339441z Computational Study of the Mono- and Dianions of SO₂, SO₃, SO₄, S₂O₃, S₂O₄, S₂O₆, and S₂O₈. [Erratum to document cited in CA124:156538]. McKee, Michael L. (Dept. of Chemistry, Auburn Univ., Auburn, AL 36849 USA). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(40), 16444 (Eng). The errors were not reflected in the abstr. or the index entries.

prop.
parum □

Erratum.

(+6)

C.A. 1996, 125, N26

SO₂

1996

Tarasov Yu. I.,

Spiridonov V. P.

раз. электро-
проводимости
и мол. пара-
метра

J. Mol. Struct.

1996, 376, 207-16.

(сер. CO₂; II)

SO₂

(PM 38399)

1996

not a
numerical
frequency,
u.n.
Youngshang Pak and
R. Claude Woods,
J. Chem. Phys., 1996,
104, N14, 5547...

Coupled cluster calculation -
the potential energy

SO₂

1997

(CAREMP)

127: 312634u Spectroscopic investigation of the G band of SO₂. Dastageer, A.; Hegazi, E.; Hamdan, A.; Al-Adel, F. (Laser Research Section, King Fahd University of Petroleum and Minerals, Dhahran, Saudi Arabia 31261). *Chem. Phys. Lett.* 1997, 275(3,4), 283-290 (Eng), Elsevier. The spectral region of Clements' G band (33150-33400 cm⁻¹) of SO₂ was investigated in a crossed supersonic jet and laser beams under low rotational temp. Ten vibronic origins were identified within the region and their dispersed fluorescence spectra were sep. excited and measured. The most intense peak of the G band was found to be composed of two adjacent vibronic bands, sep'd. by only 5 cm⁻¹ and having different Franck-Condon patterns for the (n,0,0)" and (0,m,0)" progressions in their dispersed fluorescence spectra. The results were qual. interpreted on the basis of a multilevel vibronic coupling between the ¹B₁ and ¹A₂ electronic states and were used to explain the obsd. nonradiative vibronic relaxation.

C. A. 1997, 127, N 22

SO₂

1997

NAME AND ADDRESS OF ENERGY PARTNER:

128: 81550r Effect of kinetic energy terms on the vibrational frequencies (ν_1 , ν_3) in the 1B_2 ($^1A'$) excited state of SO₂. Indu, C.; Rao, Ch V. S. Ramachandra (Whitewater, WI 53190 USA). *Proc. - Indian Acad. Sci., Chem. Sci.* 1997, 109(4), 257-265 (Eng), Indian Academy of Sciences. The effect of various kinetic energy terms on the soln. of the 2-dimensional Schroedinger equation; involving the 2 large-amplitude stretching modes ν_1 and ν_3 of SO₂ in its 1B_2 excited state, is discussed. Employing two large amplitude Hamiltonian $H^0(q_1, q_3)$ obtained earlier, three sets of force consts. were obtained. In obtaining set 1, all the 6 coeffs. of the kinetic energy A, H, B, G, F, and C were taken into account and varied with (q_1, q_3) . For set 2, only the 3 coeffs. A, H, and B, evaluated at the abs. min. $(q^*_1 + \delta, \pm q^*_3)$ were considered. In obtaining the set 3 consts., only the 2 coeffs. A and B evaluated at the saddle point $(q^*_1, 0)$ were retained. The 9 force consts. of the potential $V_0(q_1, q_3)$ which includes a double min. function in q_3 , were obtained in each case by a least squares fit to the 12 vibrational frequencies corresponding to the levels $(\nu_1, \nu_3) = (0, 2), (1, 0), (1, 2), (2, 0), (0, 6)$ and $(3, 0)$ of S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂. Set 2 is superior to set 3, and sets 1 and 2 fit the frequencies essentially to the same degree of accuracy.

(CAREMP)

C.A. 1998, 128, N7

SO₂

1997

128: 210425e ³³SO₂: interstellar identification and laboratory measurements. Klisch, E.; Schilke, P.; Belov, S. P.; Winnewisser, G. (I. Physikalisches Institut, Universitat zu Koln, D-50937 Cologne, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 1997, 186(2), 314-318 (Eng), Academic Press. The rotational spectrum of ³³S isotopically substituted SO₂, ³³SO₂, was measured up to nearly a THz. The combined anal. of these new data together with the published line frequencies resulted in refined mol. consts., such as the rotational (A = 59856.4723(62) MHz, B = 10318.3012(15) MHz, C = 8780.1363(15) MHz) and centrifugal distortion consts. which yielded precise frequency predictions. The carrier of six previously unidentified interstellar lines in the Caltech mol. line survey in the 325-360 GHz band could be assigned to ³³SO₂.

Галлан.
НОСМОДЕРУ,
A, B, C

C.A. 1998, 128, N17

SO₂

1997

128: 94723z Degenerate four-wave mixing and photofragment yield spectroscopic study of jet-cooled SO₂ in the C 1B₂ state: Internal conversion followed by dissociation in the X state. Okazaki, Akihiro; Ebata, Takayuki; Mikami, Naohiko (Graduate School of Science, Department of Chemistry, Tohoku University, Sendai, Japan 980-77). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(21), 8752-8758 (Eng), American Institute of Physics. The predissocn. mechanism of the C state of SO₂ were studied by the measurements of degenerate 4-wave mixing (DFWM), laser-induced fluorescence (LIF) and photofragment yield spectra. The DFWM spectrum of jet-cooled SO₂ was measured under a high power condition where the DFWM signal corresponds well to the absorption spectrum. Relative fluorescence quantum yields of various vibronic bands were obtained by comparing the DFWM spectrum with the LIF spectrum. The fluorescence quantum yields of the vibronic levels involving anti-sym. stretching (ν_3) vibration are considerably smaller than those of other levels. The nonradiative process of the C state is initiated as the internal conversion to the X state and ν_3 acts as the promoting mode. By observing the O atom photofragment yield spectrum the predissocn. occurs from the (1,4,2) level. Vibronic dependence of the rise time of the O atom generation is in accordance with those of the fluorescence decay rate. The obtained results represent that the dissocn. occurs immediately after the internal conversion to the X state.

(Criepp)

C.A. 1998, 128, N8

SD₂

(am. 39095)

1997

Spiridonov V.P., Yu I.
Tarasov et al.,

romeny.

Y. Mol. Street,

1997, 413-414, 465-470

A practical method for

dissociation analysis of
equilibrium geometries
of molecules without
refined force fields.

SO₂

1998

129: 251876s High frequency transitions in the rotational spectrum of SO₂. Belov, S. P.; Tretyakov, M. Y.; Kozin, I. N.; Klisch, E.; Winnewisser, G.; Lafferty, W. J.; Flaud, J.-M. (Institute of Applied Physics, Russian Academy of Sciences, Nizhnii Novgorod, Russia 603 600). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 191(1), 17-27 (Eng), Academic Press. A large no. of rotational transitions of ³²S¹⁶O₂, ³⁴S¹⁶O₂, and ³²S¹⁸O¹⁶O were measured in the mm-, submillimeter-, and terahertz (~1 THz) spectral regions. These data sets were combined with all previously measured SO₂ microwave and selected far IR data to obtain a highly precise set of ground state rotational consts. for these isotopomers. The rotational consts. for the 3 isotopomers are in MHz as follows: Parameter A ³²S¹⁶O₂, 60778.54977(44); ³⁴S¹⁶O₂, 58991.18295(51); ³²S¹⁸O¹⁶O, 59101.1690(27). Parameter B ³²S¹⁶O₂, 10318.07348(7); ³⁴S¹⁶O₂, 10318.50993(9); ³²S¹⁸O¹⁶O, 9724.64284(56). Parameter C ³²S¹⁶O₂, 8799.703399(70); ³⁴S¹⁶O₂, 8761.302481(97); ³²S¹⁸O¹⁶O, 8331.56018(51). Centrifugal distortion consts. up to P¹⁰ are included in the fit. A frequency listing of all the data used in the frequency range between ~7 GHz and 1 THz is included. (c) 1998 Academic Press.

franz. chem.,
A, B, C rocm.

C. A. 1998, 129, N 19

SO₂

1998

128: 236438m Analysis of the $2\nu_1$ band system of SO₂. Lafferty, W. J.; Flaud, J.-M.; Guelachvili, G. (Optical Technology Div., Natl. Inst. Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 188(1), 106-107 (Eng), Academic Press. The vibrational energies and rotational and coupling consts. were calcd. for the excited state of sulfur dioxide mol.

(2ν₁)

C.A. 1998, 128, N19

302

of 39227a

1998

- ✓ 128: 235380z Basis set convergence study of the atomization energy, geometry, and anharmonic force field of SO_2 : The importance of inner polarization functions. Martin, Jan M. L. (Room 262, Kimmelman Building, Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science, 76100 Reh[dundot]ovot, Israel). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(7), 2791-2800 (Eng), American Institute of Physics. The total atomization energies, geometries, and anharmonic force fields of the SO and SO_2 mols. have been studied at the augmented coupled cluster [CCSD(T)] level near the one-particle basis set limit. The effect of core correlation has been accounted for. The addn. of high-exponent d and f "inner polarization functions" to the sulfur basis set was found to be essential for obtaining reliable mol. geometries. The differential effect of core correlation on computed properties is in fact much less important. The CCSD(T) one-particle basis set limit for the sym. stretching frequencies appears to be higher than the exact value, while the antisym. stretching frequency benefits from an error cancelation. The basis set extension effects of diffuse functions and inner polarization functions appear to be nearly perfectly additive. Our best computed atomization energies and geometries agree to within 0.1 kcal/mol, 0.0004 Å, and 0.03 degrees with expt.; the errors in the fundamentals of SO_2 are +3.9, -0.4, and +0.4 cm^{-1} . The best computed quartic force field for SO_2 should provide a good starting point for a new exptl. refinement.

cmp-na,
cul. rocm,
d amouy,
meop-pa net

CA. 1998, 128, 19

F: SO₂

P: 3

[sf, 39227a]

1998

22Б153. Изучение сходимости базиса при расчете энергии атомизации, геометрической структуры и ангармонического силового поля SO[2]. Важная роль "внутренних" поляризационных функций. Basis set convergence study of the atomization energy, geometry, and anharmonic force field of SO[2]: The importance of inner polarization functions / Martin Jan M. L. // J. Chem. Phys. - 1998. - 108, 7. - С. 2791-2799. - Англ.

На уровне метода связанных кластеров (CCSD(T)) с учетом эффекта остовой корреляции вблизи предела одночастичного базиса исследованы указанные в заглавии молек. свойства SO и SO[2]. Показано, что дополнительный учет высокоэкспоненциальных внутренних d- и f-функций атома серы является необходимым для получения надежных молек. структур. Обсуждены также др. факторы, влияющие на точность расчета. Библ. 60.

ФЖХ, 1998, №22

SO₂

1998

$\tilde{A}^1A_2$,
2 (S-O)
4 0 50
Yang, Cheng

130: 174689z Rotational analyses of laser-induced fluorescence excitation spectra of the supersonic jet-cooled SO₂($\tilde{A}^1A_2$ - $\tilde{X}^1A_1$) system. Wang, Chu-ji; Chen, Jun; Zhang, Tao; Zhang, Li-min; Dai, Jing-hua; Chen, Cong-xiang; Ma, Xing-xiao (Dep. Chem. Physics, Univ. Sci. Technol. China, Hefei, Peop. Rep. China 230026). *Wuli Xuebao* 1998, 47(8), 1258-1264 (Ch), Kexue Chubanshe. The influence of the different gas ratios (SO₂/Ar) on the vibronically resolved laser radiation-induced fluorescence excitation spectra of the SO₂($\tilde{A}^1A_2$ - $\tilde{X}^1A_1$) system was investigated under the supersonic jet conditions. High resolu. spectra of two complete progressions (1, m, 1), (0, n, 1) were obtained, in which the rotational structures of the (0, 9, 1), (0, 10, 1), (1, 7, 1), (1, 5, 1)-(0, 0, 0) bands were obsd., for the first time, so long as we know. The assignments of 847 rotationally resolved lines were based on an asym. top simulation, physicochem., which results in the detn. of the rotational and centrifugal distortion consts. of each vibrational level of $\tilde{A}$ state. The approx. geometry parameters of $\tilde{A}$ state was derived to be $r(S-O) = 0.160$ nm, $\angle OSO = 101.64^\circ$. In addn., a discussion on the inertial defect of each vibrational level of $\tilde{A}$ state was presented.

C.A. 1999, 130, N13

F: SO2

P: 3

131:249789 Vibronic Relaxation among the
Clements Bands of SO2 from the E Excitation. Bae,
S. C.; Son, H. S.; Kim, G. H.; Ku, J. K.

Department of Chemistry, Pohang University
of Science and Technology Pohang Kyung-buk 790-

784, S. Korea J. Phys. Chem. A, 103(37), 7432-7436
(English) 1999 Vibronic relaxation among the
Clements bands of SO2 mol. was studied fro time-resolved
fluorescence spectra in the 300-350 nm region. The $K' = 6$,
level of the Clements E-band was populated at 32,812.8 cm^{-1} ,
and detailed resolved fluorescence spectra for the period 0-160 ns
were obtained. For the fast decay of the laser excited level,
weak emissions from Clements A bands appeared almost simultaneously.
The simultaneous appearance of man Clements bands was

attributed to fast rovibronic relaxation of the laser mols. among the dark levels. Also the broad apparent continuum emission following the direct fluorescence showed different decay rates at different wavelengths, but the decay rates of the emissions for $\lambda > 350$ nm were virtually identical. Based on the wavelength dependence of the decay rate apparent continuum emissions were ascribed to the emissions from the rovibronically dispersed hybrid bright states and the low-lying rovibrational levels of the A1A2 state generated by collisional relaxation of the laser excited level.

SO₂

of. 40073

1999

Binkmann, N.R.; et al.;

(Ar) J. Chem. Phys., 1999,
110 (13), 6240-45

(all.



ALO; III)

F: SO2

1999

P: 3

132:42266

Quantum beat spectroscopy of SO2 in the 235-224 nm range. Chen, Yang; Pei, Lin-Sen; Jin, Jin; Chen, Cong-Xiang; Ma, Xing-Xiao Department of Chemical Physics, University of Science and Technology of China Hefei 230026, Peop. Rep. China Chin. Phys. Lett., 16(9), 641-642 (English)

1999 Using time-resolved laser-induced fluorescence (LIF) spectroscopy, the fluorescence quantum beat decay was obsd. in C(1B2) .ltwarw. X(1A1) transition of SO2 mol. Only the v3 mode and its combination band v1 + v2 v3 excitation exist the beat decay. The quantum beat states were attribu to the coupling of the v3 vibration mode of C state with the high vibrati levels of the electronic ground state.

C. A. 2000, 132

131:134917 Theoretical study of the atomization energy and geometry of sulfur dioxide and sulfur monoxide. Jursic, Branko S. (Dep. Chem., Univ. New Orleans, LA, USA). THEOCHEM, 467(3), 187-193 (English) 1999 Computational studies with complete basis set, hybrid, gradient-cor., an local spin d. approxn. d. functional methods were performed on sulfur dioxide and sulfur oxide with target to compute their structures, bond dissociation energies, vibrational spectra, and atomization energies. The obtained results are compared with the exptl. results. It was demonstrated that the complete basis set ab initio method and the hybrid DFT method were accurate for bond dissociation energies. The total atomization energy is better described by the gradient-cor. d. functional method. It was demonstrated that sulfur is a very difficult computational system that requires a larger basis set high order electronic interaction for its proper description.

C.A. 1999

F: SO2-3

1999

P: 3

132:158298 Structure and vibrational spectra of
XO2 molecules and XO2-3 i (X = S, Se and Te).

Marenich, A. V.; Solomonik, V. G.

Ivanov. Gos. Khim.-Tekhnol. Univ.

Ivanovo, Russia

Zh. Fiz. Khim.,

73(12), 2205-2210 (Russian) 1999 The perturbation
theory (Moeller-Plesset), Hartree-Fock method and
configuration interactions methods were used to
calc. geometrical paramet force consts.,
vibrational frequencies and intensities of IR bands
for ti compds. Some calcns. were carried out using
two-exponential and valence- exponential forms.

Davidson corrections and Stevens potentials were
take into consideration. A role of the electronic
correlation for a descripti of mols. and ions
properties is pointed out. A comparison with
literatur data for M2XO3 (where M = alkali metal)
and dioxides and anions was performed.

C.A. 2000, 132

1999

F: SO2

P: 3

132:158298 Structure and vibrational spectra of
XO2 molecules and XO2-3 i (X = S, Se and Te).

Marenich, A. V.; Solomonik, V. G.

Ivanov. Gos. Khim.-Tekhnol. Univ.

Ivanovo, Russia

Zh. Fiz. Khim.,

73(12), 2205-2210 (Russian) 1999 The perturbation theory (Moeller-Plesset), Hartree-Fock method and configuration interactions methods were used to calc. geometrical paramet force consts., vibrational frequencies and intensities of IR bands for ti compds. Some calcns. were carried out using two-exponential and valence- exponential forms. Davidson corrections and Stevens potentials were take into consideration. A role of the electronic correlation for a descripti of mols. and ions properties is pointed out. A comparison with literatur data for M2XO3 (where M = alkali metal) and dioxides and anions was performed.

C.A. 2000, 132

SO₂

1999

нометр. 10-
реакции
в $\tilde{X}^1A_1$ и
 $\tilde{C}^1B_2$ 100 см.

131: 36071m Investigation of the potential energy surfaces for the ground $\tilde{X}^1A_1$ and excited $\tilde{C}^1B_2$ electronic states of SO₂. Nachtigall, Petr; Hrusak, Jan; Bludsky, Ota; Iwata, Suehiro (J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague, Czech Rep. 18223). *Chem. Phys. Lett.* 1999, 303(3,4), 441-446 (Eng), Elsevier Science B.V.. The stationary points along the disson. path were investigated by means of high-level ab initio methods; the reliability of the different methods is discussed. The multi-ref. AQCC method using the ANO-type basis set was shown to give geometrical parameters and relative energies in very good agreement with expt. At this level of theory, the $\tilde{C}^1B_2(1A')$ state has an asym. equil. geometry and double-min. potential with a barrier of 170 cm⁻¹, in good agreement with exptl. data.

C.A., 1999, 131, N3

1999

F: SO2

P: 3

131:314372 Assigning the transition from normal to local vibrational mode SO2 by periodic orbits.

Prosmiti, R.; Farantos, S. C.; Guo, H.

Department Chemistry, University of Crete

Iraklion, Crete 71110, Greece Chem. Phys.

Lett., 311(3,4), 241-247 (English) 1999 The
bifurcation diagrams of periodic orbits are
compared for three different potential functions of

the ground electronic state of SO_2 . By assigning families of periodic orbits to overtone and combination vibrational levels of the sym. stretch mode, the transition from normal- to local-type motions is identified to take place at the energy where the sym. stretch turns from stable to unstable and new local-type periodic orbits are generated.

F: SO2

P: 3

132:7207 Quantum calculations of highly excited
vibrational spectrum of sulfur dioxide. III. Emission
spectra from the C 1B2 state. Xie, ~~Daqian~~; Guobin;
Guo, Hua Department of Chemistry and
Albuquerque High Performance Computer Center,
University of New Mexico Albuquerque, NM 87
131, USA J. Chem. Phys., 111(17), 7782-7788
(English) 1999 We report quantum mech.
calcns. of the X - C emission spectra of SO2 at the
red wing of the C absorption band. The near equil.
potential energy surface of the C 1B2 state is

C.F. 2000, 132

deduced by fitting exptl. vibrational frequencies using an exact quantum mech. Hamiltonian. Low-lying vibratio eigenenergies on this double min. potential agree well with exptl. frequencies and the corresponding eigenstates show some interesting featu Both spectral positions and intensities of the X - C transitions were obtained up to 16,000 cm^{-1} using a Chebyshev based spectral method, which does not explicitly construct vibrational eigenfunctions in the X state. emission spectra are in reasonably good agreement with exptl. measurement

1999

F: SO2

P: 3

133:341955 Spectroscopy and dynamics of highly
excited SO2. Xue, Bing University of Pennsylvania

USA 171 pp. Avail. UMI, Order No. DA9953620

From: Diss. Abstr. Int., B 2000, 60(12), 6

130-6

131 (English) 1999. Abstract Unavailable.

2000

F: SO2

P: 3

132:199216 The calculation of the vibrational states of SO2 in the C 1B2 electronic state up to the SO(3.SIGMA.-)+O(3P) dissociation limit. Bludsky, O.; Nachtigall, P.; Hrusak, J.; Jensen, P. J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic Prague CZ-182 23, Czech Rep. Chem. Phys. Lett., 318(6), 607-613 (English) 2000 In a previous paper [P.

C.A. 2000, 132

Nachtigall et al., Chem. Phys. Lett. 303 (1999) 441], we reported an investigation of the stationary points along the dissocn. path of ClB2 SO2, carried out with high-level ab initio methods. Here we calc. the vibrational energy levels up to the SO(3.SIGMA.-) + O(3 dissocn. limit using a scaled ab initio potential energy surface. The sc potential energy surface is of near-spectroscopic accuracy below the diss limit and has a realistic behavior along the dissocn. path. vibrational s sulfur dioxide dissocn limit; oxide sulfur vibrational state dissocn limi

SO₂

[Om. 41073]

2000

Ching-Chi Zen, I-Chia
Chen et al.,

J. Phys. Chem., 2000,
A104, 771-776.

Laser-Induced  Phosphorescence
of SO₂ in solid Neon:

Direct observation
 γ^3A_2 state in the $^{16}O^{18}O$ the ^{18}O Molecule.

2000

F: SO₂

P: 3

133:288235 High-Resolution Spectroscopy of Jet-Cooled ³²SO₂ and ³⁴SO₂: The a₃B₁-X₁A₁, 210 and 110 Bands. Huang, Cheng-Liang; Ju, Shan-Shan; Chen, I-Chia; Merer, Anthony J.; Ni, Chi-Kung; Kung, A. H.

Department of Chemistry, National Tsing Hua University Hsinchu 300, Taiwan J. Mol. Spectrosc., 203(1), 151-157 (English) 2000, Laser-induced excitation spectra of the 2 bands a₃B₁-X₁A₁, 210 and 110 of ³²SO₂ and ³⁴SO₂ were recorded

in a supersonic jet at a resoln. of 0.015 cm^{-1} . The rotational and electron-spin fine structure was analyzed for both isotopic species. Anal. of the rotational and electron-spin fine structure yields precise values of the rotational consts. A, B, and C and the spin consts. α and β for both $^{32}\text{SO}_2$ and $^{34}\text{SO}_2$ in the states $a^3B_1(010)$ and (100) .

No interaction between these 2 vibrational states with any nearby triplet state is obsd. for rotational levels with $J \leq 8$ and $K \leq 2$.

2000

F: SO2

P: 3

133:326141 Dissociative excitation of SO2 by
electron impact. Kedzierski, W.; Malone, C.;

McConkey, J. W. Department of Physics, University
of Windsor Windsor, ON N9B 3P4, Can. Can. J.

Phys., 78(5/6), 617-624 (English) 2000. The
dissociative excitation of SO2 by electron impact to
produce excited oxygen fragments, in particular O (1S),
was studied in the energy range from threshold to 400
eV. Three processes leading to O (1S) prodn. were

identified and the positions of the relevant repulsive states of SO_2 in the Franck-Condon region were detd. The multiplicities and symmetry characteristics of two of these states were also established. The abs. cross section for prodn. of $\text{O}(1\text{S})$ by all channels was measured to be $2.2 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ at 150 eV. The relative cross section for prodn. of $\text{O}(3\text{p } 3\text{P} \text{ and } 3\text{p } 5\text{P})$ from threshold to 400 eV was also measured. The existence of a hitherto unidentified triplet state of SO_2 that emits in the near IR was established.

SO₂

2000

Frankam
C. A. M.

132: 315127v The Rotational Spectrum of SO₂ and the Determination of the Hyperfine Constants and Nuclear Magnetic Shielding Tensors of ³³SO₂ and SO¹⁷O. Müller, Holger S. P.; Farhoomand Jam; Cohen, Edward A.; Brupbacher-Gatchouse, Bethany; Schafer Martin; Bauder, Alfred; Winnewisser, Gisbert (I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, 50937 Cologne, Germany). *J. Mol. Spectrosc.* 2000, 201(1), 1-8 (Eng), Academic Press. Precise frequencies for the 1₁₁-2₀₂ transition of ³³SO₂ and SO¹⁷O in natural isotopic abundance were obtained near 12 GHz by microwave Fourier transform spectroscopy to yield improved hyperfine consts. Nuclear spin-rotation coupling consts. were detd. exptl. for ³³SO₂ for the 1st time. The spin-rotation consts. were used to derive nuclear magnetic shielding parameters. These

C.A. 2000, 132, N23

parameters are compared with values for the isoelectronic O_3 mol. The transition mentioned above was also measured for $^{32}SO_2$, $^{34}SO_2$, $SO^{18}O$, and vibrationally excited ($v_2 = 1$) $^{32}SO_2$. For $^{33}SO_2$, some transitions with large hyperfine splitting were also recorded in the millimeter-wave region. Continuing studies of the rotational spectra of SO_2 in the submillimeter region, several transitions of $SO^{17}O$ were recorded with the Cologne terahertz spectrometer between 540 and 840 GHz with J and K_a up to 63 and 16, resp. Transitions with high K_a , up to 28, were recorded with the JPL laser sideband spectrometer between 1.8 and 3.2 THz. (c) 2000 Academic Press.

$\text{SO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

2000

F: $\text{SO}_2\text{-H}_2\text{O}$

P: 1

$\text{SO}_2 \cdot n \text{H}_2\text{O}$ (равновесие жидкость-пар)

02.10-19БЗ.61. Спектрофотометрическое измерение
равновесий пар-жидкость в системе диоксид серы-
вода. Spectrophotometric measurement of the (vapor
p-liquid) equilibria of (sulfur-dioxide plus water)
/ Siddiqi M. A., Krissm J., Petersgerth P., Luckas
M., Lucas K. // J. Chem. Thermodyn. - 2000. 7. - С.
937-939. - Англ.

F: SO2

P: 3

134:287237 Theoretical studies on the potential energy surface and rovibrational states for the electronic ground state of SO2. Xu, Ding-Guo; Lu, Yu-Hui; Xie, Dai-Qian; Yan, Guo-Sen. Department of Chemistry, Sichuan University, Chengdu, Peop. Rep. China. Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao (2000), 21(12), 1884-1887. Journal written in Chinese. A potential energy surface for the electronic ground state of SO2 was optimized by using a variational procedure with the exact vibrational Hamiltonian in the bond length-bond angle coordinates. In the optimization, the ab initio force field of Martin is taken as the starting point, and the obsd. vibrational band origins ≤ 6500 cm⁻¹ are involved. The root mean square error of this fit for the 38 obsd. vibrational energy levels is 0.93 cm⁻¹. In order to test the refined potential, the vibrational energy levels for the isotopomer ³⁴SO2 were calcd. and compared with the obsd. values and other theor. results. The rovibrational energy levels $J \leq 6$ were calcd. and compared with the obsd. values.

2000

2000

F: SO₂

P: 3

132:143620 Observation of the singlet-triplet pair of the 4p Rydberg stat and assignment of the Rydberg series of SO₂. Xue, Bing; Chen, Yang; Dai, Hai-Lung Department of Chemistry, University of Pennsylvania Philadelphia, PA 19104-6323, USA J. Chem. Phys., 112(5), 2210-2217 (English) 2000 The triplet g Rydberg state of SO₂ with an origin at 78,245.8 cm⁻¹, 526 cm⁻¹ below the previously detected singlet G state origin, was obsd. in a two-color resonantly enhanced multiphoton ionization expt. The bending vibrational levels ($v = 0-5$ with intervals of 400

C.A. 2000, 132

.+- . 10 cm⁻¹) was identified and reported. Based on the symmetry, bending frequencies, quanta defects, and term values, this G state singlet-triplet pair was assigned the S 4p state belonging to the series converging to the SO₂⁺ X 2A₁ state. The same procedure also allows the reassignment of the Rydberg state previously obsd. in the 111.5-115 nm region to the S 4p orbital (converging to the SO₂⁺ A 2A₂ state) and the one in the 106.3-110.4 nm region to the orbital (converging to the SO₂⁺ X 2A₁ state). The spectral patterns also indicate that the G states have a detectable increase in the dissociation rate above the v₂ = 2 level. The triplet state near the 193 nm region is dissociative with a homogeneous width of ~13 cm⁻¹.

2000

F: SO2

P: 3

132:98366 Constructing potential energy surface of
SO2 using Lie algebra. Zheng, Yu-Jun; Ding, Shi-
Liang Institute of Theoretical Chemistry, Shandong
University Jinan 250100, Peop. Rep. China

Huaxue Xuebao, 58(1), 56-59 (Chinese) 2000 The
algebraic Hamiltonian of the SO2 mol. is classified by
using the coherent state. The potential energy surface
is derived from the classic Hamiltonian. We propose a
new transformation for introducing the bond an the
potential energy surface. We calcd. the force consts.
and dissocn. e using this potential energy surface, and
create the surface figure and it contour. These results
are in good agreement with previous results. Thi method
can be easily extended to other polyat. mols.

C.A. 2000, 132

SO₂

2001

ab-initio
расчет и
результаты
электронной
и спектроскопической
моделей

135: 185731m The use of ab initio calculation results in electron-diffraction studies of equilibrium structure of molecules. Kochikov, I. V.; Tarasov, Yu. I.; Spiridonov, V. P.; Kuramshina, G. M.; Saakyan, A. S.; Pentin, Yu. A. (Nauchno-Issled. Vychisl. Tsentr, Mosk. Gos. Univ. im. M. V. Lomonosova, Moscow, Russia). *Zh. Fiz. Khim.* 2001, 75(3), 461-466 (Russ), MAIK Nauka. The authors used SO₂ mol. as an example to demonstrate the use of quantum-mech. cubic force fields in processing data obtained by IR spectroscopy and gas electron diffraction. The effects of various ab initio levels and of a priori restrictions (scaling of force consts.) on the equil. geometrical parameters were studied.

C. H. 2001, 135, N13

SO₂

2001

Frappier, Gilles;

New. J. Chem. 2001,
25(3), 440-445.

(meopem-
pavrem)

(all. SO₂, III) ●

102

of 40465

2001

134: 200018j Spectra of jet-cooled $^{32}\text{SO}_2$ and $^{34}\text{SO}_2$ in systems a^3B_1 and $b^3A_2-X^1A_1$: Rotational structure of perturbed b^3A_2
Huang, Cheng-Liang; Chen, I-Chia; Merer, Anthony J.; Ni, Chi-Kung; Kung, A. H. (Department of Chemistry, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan 30013). *J. Chem. Phys.* 2001, 114(3), 1187-1193 (Eng), American Institute of Physics. Spectra of $a^3B_1(\nu_1\nu_2\nu_3) = (110)$ and $(200)-X^1A_1(000)$ of $^{32}\text{SO}_2$ and $^{34}\text{SO}_2$ are obtained in a supersonic jet at a resolu. 0.015 cm^{-1} . The rotational structures are analyzed for both isotopic species to obtain precise rotational and spin consts. Two new bands at $27032.222(1)$ and $27515.41(1)\text{ cm}^{-1}$ arising from vibronic interaction sep. with vibrational state (110) and (200) of a^3B_1 are assigned to transitions to $b^3A_2(011)$ and (101) . The rotational structure of b^3A_2 is obsd. and analyzed for the 1st time. The 2 vibrational states are analyzed to yield effective rotational consts. $A = 1.4348(3), 1.89(3)$, $B = 0.3610(3), 0.412(3)$, and $C = 0.2689(3), 0.239(3)\text{ cm}^{-1}$, resp. Then the difference $\nu_1 - \nu_2$ of vibrational frequency of b^3A_2 is obtained to be 483.19 cm^{-1} . Because of interaction to $b^3A_2(011)$ the obsd. spacing of K stack and spin consts. α and β for $a^3B_1(110)$ are smaller whereas the state $a^3B_1(200)$ is relatively unaffected and only spin consts. vary significantly.

a^3B_1 ,

$b^3A_2-X^1A_1$

Prallan

Chemist, M. N.

C. A. 2001, 134, 114

SO₂

2001

Xi Mo, et al.,

Faodeng Xuebiao ~~et al.~~,
Huaxue Xuebao 2001,
22 (1), 81-85

meopem-
pavem
cmp-MH,
Di, cha-
Funt H.

(cu. Bl3 ● ; III)

SO₂

2000

134: 185353u Collisional deactivation of highly vibrationally excited SO₂. A time-resolved FTIR emission spectroscopy study. (Qin, Dong; Hartland, Gregory V.; Chen, Carl L.; Dai, Hai-Lung (Department of Chemistry, University of Pennsylvania, Philadelphia, PA 19104-6323 USA). *Z. Phys: Chem. (Muenchen)* 2000, 214(11), 1501-1519 (Eng), R. Oldenbourg Verlag. Time-resolved FTIR emission spectroscopy, capable of 10⁻⁸ s and 0.1 cm⁻¹ spectral resolu., was used to study the collisional deactivation of highly vibrationally excited SO₂ by bath-gas mols. Ar, N₂, O₂, CO₂, and SF₆. The vibrationally excited SO₂ were initially prepd. with 32,500 cm⁻¹ energy in the X¹A₁ state by the pulsed 308 nm laser excitation followed by internal conversion. The entire collisional deactivation process of the excited SO₂ was monitored by time-resolved IR emission spectra through the IR active transitions. The av. energy, <E>, of excited SO₂ was extd. from the IR emission bands using known vibrational const. and selection rules. <E> is further used to derive the av. energy loss per collision, <ΔE>, by each of the bath-gas mols. The results show that <ΔE> increases from mono- and diat. quenchers to more complex polyat. mols., as V-V energy transfer contributes to V-T/R. For all bath mols., <ΔE> increases with <E> and displays a marked increase at <E> ≈ 20,000 cm⁻¹. The obsd. threshold behavior most likely arises from intramol. vibronic coupling within SO₂ and implies the importance of long range interaction in intermol. energy transfer.

(FTIR check)

C.A. 2001, 134, NB

SO₂

135: 159337t Lie algebraic method for studying the vibrational excited states of a SO₂ molecule. Pan, Lu-ning; Ding, Shi-liang; Yao, Jing (Dep. Applied Chem., Yantai Univ., Yantai, Peop. Rep. China 264005). *Yantai Daxue Xuebao, Ziran Kexue Yu Gongchengban* 2001, 14(2), 111-115 (Ch), Yantai Daxue Xuebao Bianjibu. Lie algebraic method for the vibrational excited states of SO₂ was studied. The root-mean-square deviation of a SO₂ mol. is only 1.66 cm⁻¹.

2001

komam.
Ross. vpcn

SD₂

OM. 41.852

2002

Rodrigues S.P. et al.,

невероятно
популярно.
Земли

J. Phys. Chem., 2002,
A106, 556 - 562.