

S-O-F-M.

II-1333

1959

H₂.SO₂; H₂.CO₂; H₂.CO₂ (λ i; ΔH_f)

HCl.SO₂; HCl.CO₂ (λ i; ΔH_f)

Burke T.G., Smith D.F.

J.Molec.spectrosc., 1959, 3, N 4,
381-387

H₂.SO₂ и аналогичные комплексы в
паровой фазе

PX., 1960, N 16,

64274

(Я)



Ф

Всего гр. 2.

H₂S₂O₆F

[A-574]

1963

(visos)
plut. (weil)

Gillespie R. J. et al.
Spectrochim. acta, 1963,
19, N4, 741-6.

FSO_3H

1964

7i

2) Infrared study of fluoro- and chlorosulfuric acids. Rodrigue Savoie and Paul A. Giguere (Univ. Laval, Quebec). *Can. J. Chem.* 42(2), 277-87(1964)(in French). The infrared spectra of FSO_3H and ClSO_3H were measured, $150\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$, in the gaseous, liquid, and solid states. All 12 fundamental vibrations of both mols. were observed. FSO_3H and ClSO_3H form H-bonded cyclic dimers in the vapor state. The standard entropies of the free XSO_3H mols. at 25° are 71.4 ($\text{X} = \text{F}$) and 74.9 ($\text{X} = \text{Cl}$) cal./degree mole. T. A. Donovan

C.A. 1964. 60. 8

8782 f

8

$\text{P} \text{SO}_3\text{H}$, $\text{Cl} \text{SO}_3\text{H}$ (V_1 , SO_3) 1685-II 1964.
157-6012-II

Savoie R. Giguere P.A. $\text{act. 103\%}$

Can. J. Chem. 1964, 42(2), 277-87.

Infrared study of fluoro- and
chlorosulfuric acids.

10 + 2 ✓ @ CA, 1964, 60, 18, 8782f.

vi. (HSO_3Cl , HSO_3F , HSO_3CH_3) # 266
XII 538
Ann. 364

Chenakaleral S. M., Stafford F. E.

J. Amer. Chem. Soc., 1966, 88, 21, 4815-
4819/ann

Infrared spectra of methanesul-
fonic, - and chlorosulfonic
acids.

Puckner, 1967, 105220. 7

1969

(OK) SO_2F_2

Cyril S. J.
Margittai F.

аннот.
исследования

Acta chim. Acad. scient.
Hung., 61(2), 15g.

(see. SO_2F_2)!!!

NaSO_3F , $\text{NO}_2\text{SO}_3\text{F}$, NOSO_3F ,
 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_7$, $\text{HS}_2\text{O}_6\text{F}$, $\text{NO}_2\text{S}_2\text{O}_6\text{F}$,
 $\text{KS}_2\text{O}_6\text{F}$

1970

12

1015

$\bar{\nu}$ 5022

Deporcq - Strar-mains M., Vast P.,
J. chim. phys. et phys-chim. Biol., 1970,

67, n5, 1000-1006 (9pp).

Spectre raman et infrarouge du fluor-
sulfate et du fluordisulfate de nit-
ryle.

Bull. 1974. 152. 24



57

14

F_5SO^- , F_5SOH

XII 1322

1973.

(Кв. мех. реакт., структ., энт. св-ва).

Rode B. M.

Z. Naturforsch, A 1973, 28 (9),
1538-9 (Ger).

MO theoretical treatment of the
sulfur pentafluoride oxide ion
 $[F_5SO^-]$ and the corresponding acid
sulfur pentafluoride hydroxide $[F_5SOH]$

C.A. 1974. 80. N 6. 30815p

10

(Φ)

vi, m.n. (SO_3F , HSO_3F) 1975
Suzuki E.M., Nibler J.W., Oakes K.A.,
Eggers D, Jr., XII-1509

J. mol. spectrosc, 1975, 58, N2, 201-
215 (acc)

Matrix isolation study of $\text{S}_2\text{O}_6\text{F}_2$
pyrolysis products: the infrared
spectrum of  SO_3F radical.

Pu Pn, 1976, 62404 10 (P)

60226.7409
Ch, TC, DB

~~H~~ O S O₂ F 58811GR

1976

H O S O₂ F

* 45-11590

Wilson William W., Winfield John M.,
Aubke Friedhelm.

Low temperature infrared spectra of
some halogen fluorosulfates and
related compounds.

"J. Fluor. Chem.", 1976, 7, N 1-3, 245-259

(АНГЛ.)

0566

(all F O S O₂ F)

544 546.5 5 8

ВИНИТИ

HSO_3F

1979

21 Б180. Колебательные спектры фторсерной кислоты. Gouyron Annie, Villepin Jacqueline de, Novak Alexandre. Spectres de vibration de l'acide fluorosulfurique. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1979, 76, № 3, 266—272 (франц.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения ($4000\text{--}80\text{ см}^{-1}$) и спектры КР ($4000\text{--}10\text{ см}^{-1}$; Ar^+ лазер, λ 4880, 5145 А) фторсерной к-ты HSO_3F (I) в крист. и жидк. состояниях, а также спектры КР в газ. состоянии при различных т-рах ($70\text{--}130^\circ$). Предложено полное отнесение частот по типам колебаний. Сделан вывод, что в газ. фазе молекулы I при 130° существуют в виде мономеров ($\nu=3600\text{ см}^{-1}$; при понижении т-ры газ. фазы образуются димеры ($\nu=3194\text{ см}^{-1}$) циклич. структуры. В крист. состоянии молекулы I образуют полимерные цепочки. В жидк. фазе сосуществуют полимерные цепочки и циклич. димеры.

Б. В. Рассадин

И. Г. Скляр

И

Х-1949/121



1979

21 Б180. Колебательные спектры фторсерной кислоты. Gouyigon Annie, Villepin Jacqueline de, Novak Alexandre. Spectres de vibration de l'acide fluorosulfurique. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1979, 76, № 3, 266—272 (франц.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры поглощения ($4000-80 \text{ см}^{-1}$) и спектры КР ($4000-10 \text{ см}^{-1}$; Ar^+ лазер, λ 4880, 5145 Å) фторсерной к-ты HSO_3F (I) в крист. и жидк. состояниях, а также спектры КР в газ. состоянии при различных т-рах ($70-130^\circ$). Предложено полное отнесение частот по типам колебаний. Сделан вывод, что в газ. фазе молекулы I при 130° существуют в виде мономеров ($\nu=3600 \text{ см}^{-1}$; при понижении т-ры газ. фазы образуются димеры ($\nu=3194 \text{ см}^{-1}$) циклич. структуры. В крист. состоянии молекулы I образуют полимерные цепочки. В жидк. фазе сосуществуют полимерные цепочки и циклич. димеры.

Б. В. Рассадни

И. К. Смирнов
И. К. Смирнов

2-1979/121

HSO_3F

1979

91:30001x Vibrational spectra of fluorosulfuric acid. Goypiro, Annie; De Villepin, Jacqueline; Novak, Alexandre (Lab. Spectrochim. Infrarouge Raman, CNRS, 94320 Thiais, Fr.). *J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol.* 1979, 76(3), 267-72 (Fr). The IR (4000-80 cm^{-1}) and Raman (4000-10 cm^{-1}) spectra of cryst. and liq. HSO_3F and Raman spectra of HSO_3F in the gaseous state at different temps. were obtained. A complete assignment of the bands is given. The results suggest that HSO_3F mols. are assocd. in cyclic dimers in the gaseous state and in infinite chains in the crystal. Both cyclic dimers and open chains appear to coexist in the liq. state.

Di.
Camp K.P.

C.A. 1979, 91 N4

HSO_2F

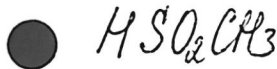
Оттиск 13934 1982

У 17 Б57. Исследование структуры сульфонов методом МО ЛКАО. Boyd Russell J., Szabo Jeffrey P. Molecular orbital structures of sulfones. «Can. J. Chem.», 1982, 60, № 6, 730—734 (англ., рез. фр.)

Неэмпирическим методом в базисе OCT—3 ГФ* (Collins J. B. e. a. «J. Chem. Phys.», 1976, 64, 5142) проведено вычисление равновесных геометрич. структур ациклич. сульфонов общей ф-лы XSO_2Y ($\text{X}, \text{Y} = \text{H}, \text{F}$,

равновесн.
геометр.,
структура

(+1) 



X. 1982, 19, N 17

CH_3) и теор. геометрии сравнены с имеющимися данными по структуре в газовой фазе. Все длины связей завышены в среднем на 0,003 нм. Оценены барьеры внутреннего вращения нек-рых из молекул XSO_2Y , к-рые находятся в качеств. согласии с эксперим. Приведены результаты расчета геометрич. структуры тиран 1,1-диоксида, сульфоксида, тиран-1-оксида и сульфида. Вычислены полные энергии и заряды на атомах, длины связей C—C и S—O сравниваются с эксперим. Обсуждено влияние учета d -АО на результаты. Выполнена частичная оптимизация длин связей S—O в молекулах тиоциклогексан-1,1-диоксида, а также в восьмичленном цикле с атомом S, примыкающим к группе SO_2 . В. Болотин

$H_nSO_2F_{2-n}$ Р.м. 13934/ 1982.

59 Д130. Строение молекулярных орбиталей сульфонов. Molecular orbital structures of sulfones. Boyd Russell J., Szabo Jeffrey P. «Can. J. Chem.», 1982, 60, № 6, 730—734 (англ.)

Электронное строение ациклич. сульфонов XSO_2Y ($X, Y=H, F, CH_3$) и некоторых циклич. сульфонов рассчитано методом Хартри—Фока—Рутана в базисе гауссовых орбиталей ОСТ-3ГФ, расширенном добавлением поляризационных d -ф-ций. Получены орбитальные энергии, заселенности АО и заряды атомов; кроме того, для части молекул проведена полная оптимизация геометрич. параметров и определены барьеры заторможенных вращений. Обнаружена линейная зависимость зарядов атомов S и O от n в рядах $H_nSO_2F_{2-n}$, $(CH_3)_nSO_2F_{2-n}$ и $(CH_3)_nSO_2H_{2-n}$. Изучено изменение характеристик трехчленных циклов в ряду $C_2H_4SO_n$. Показано, что заряды экваториального и

Электрон.
строение

⚡
(72)

ф. 1982, 18, № 9

аксиального атомов О в шестичленных циклич. сульфонах различаются незначительно, а соответствующие длины связей S—О почти равны. Исследованы эффекты замены группы CH_2 , непосредственно связанной с SO_2 в циклич. сульфонах, на атом S. Результаты расчетов качественно согласуются с данными экспериментов. Отмечается необходимость включения d -ф-ций в базисную систему. А. В. Зайцевский



SO₂...HF

[Om. 16317]

1983

'98: 22544f SO₂...HF. An ab initio study. Friedlander, Marvin E.; Howell, James M.; Sapse, Anne Marie (Brooklyn Coll., City Univ. New York, Brooklyn, NY 11210 USA). *Inorg. Chem.* 1983, 22(1), 100-3 (Eng). STO-3G and extended basis set calcns. were performed on the complex formed between SO₂ and HF. The most stable geometry (-5.2 kcal/mol relative to the noninteracting mols.) was found, as expected, to be with the HF linear to the S-O bond with a sepn. of 1.8 Å. Calcns. of the elec. field potential surrounding the SO₂ were also performed.

meopem-
pacrim

C. A. 1983, 98, N4.

$SF_3^+ \cdot H_2O$

1984

17 Б4038. Ионно-молекулярные реакции в смеси SF_6/H_2O . Температурные эффекты. Карачевцев Г. В., Маруткин А. З., Савкин В. В., Тальрозе В. Л. «Хим. физ.», 1984, 3, № 5, 695—699

Масс-спектрометрическим методом при повышенном давл. исследовано влияние т-ры на константы скорости ионно-молек. р-ций в смеси SF_6/H_2O . Показано, что с ростом т-ры отсутствует рост константы скорости запрещенной по симметрии р-ции $[SF_5^+ \cdot H_2O] \rightarrow SF_3O^+ + 2HF$. Оценена энергия связи в комплексе $[SF_5^+ \cdot H_2O] \approx 4,6$ ккал/моль. Измерена т-рая зависимость константы равновесия ионно-молек. р-ции $SF_3^+ + H_2O + SF_6 \rightleftharpoons [SF_3^+ \cdot H_2O] + SF_6$. Энергия связи в комплексе $[SF_3^+ \cdot H_2O]$ равна $(5,1 \pm 0,3)$ ккал/моль. Резюме

энергия
связи

Х. 1984, 19, N 17

$SD_2 \dots HF$
 $SD_2 \dots HCl$
 $SD_2 \dots HCN$

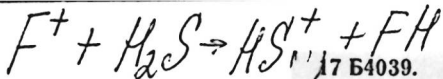
(смысл)

[DM. 23268]

1985

Buckingham A. D.,
Fowler P. W.

Can. J. Chem., 1985,
63, N 7, 2018-2025.



1986

17 Б4039. Исследование реакций F^+ с нейтральными молекулами при комнатной температуре. A study of the reactions of F^+ with neutral molecules at room temperature. Hamdan M., Copp N. W., Birkinshaw K., Jones J. D. C., Twiddy N. D. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Process.», 1986, 69, № 2, 191—195 (англ.)

В дрейфовой трубе с селекцией ионов определены константы скорости k и отношения скоростей каналов реакций F^+ с O_2 , N_2 , CO , NO , H_2 , CO_2 , N_2O , SO_2 , OCS , H_2S , NH_3 и CH_4 . Значения k в (10^{-10} см³/с⁻¹) составляют 8; 9; 10; 9; 12; 8; 11; 14; 22; 7 и 1,8 для перечисленных нейтр. реагентов соотв. В случае O_2 возможны три канала образования ионных продуктов $O_2^+ + F$, $FO^+ + O$ и $O^+ + OF$ с соотношением скоростей 0,8 : 0,1 : 0,1. Взаимодействие с CO протекает по двум каналам $CO^+ + F$ и $CF^+ + O$ с соотношением скоростей 0,92 : 0,08. Два канала образования продуктов обнаружены в реакции F^+ с NO : $NO^+ + F$ и $FN^+ + O$ с соотношением скоростей 0,9 : 0,1. Реакция с H_2 протекает по трем каналам с обра-

х. 1986, 19, № 17

зованием $\text{H}_2^+ + \text{F}$, $\text{HF}^+ + \text{H}$ и $\text{H}^+ + \text{HF}$ с соотношением
 скоростей 0,6 : 0,4 : 0,2. В этом случае возможно влия-
 ние втор. р-ций. Три канала образования продуктов
 имеет р-ция F^+ с NH_3 : $\text{NH}_2^+ + \text{HF}$, $\text{NH}_3^+ + \text{F}$ и $\text{NH}^+ +$
 $+(\text{FH}_2)$, соотношение скоростей к-рых составляют
 0,78 : 0,17 : 0,05. Взаимодействие F^+ с N_2O протекает в
 основном с образованием $\text{NO}^+ + \text{FN}$ (90%) и с выходом
 10% продуктов $\text{O}^+ + \text{FN}_2$. Двумя каналами с соотноше-
 нием скоростей 0,8 : 0,2 характеризуется р-ция $\text{F}^+ +$
 $+\text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{HS}^+ + \text{FH}$ (80%) и $\rightarrow \text{S}^+ + (\text{FH}_2)$ (20%). Взаи-
 модействие F^+ с CH_4 протекает по трем каналам с
 образованием $\text{CH}_3^+ + \text{FH}$, $\text{CH}_2^+ + \text{FH}_2$ и $\text{CH}_4^+ + \text{F}$ (соот-
 ношение скоростей 0,83 : 0,15 : 0,02). Различий в
 р-ционной способности состояний F^+ (3P_2 , 3P_0 , 3P_1) не
 обнаружено.

Л. Ю. Русин

$\text{SO}_2 \cdot \text{HF}$

1986

В 13 Б1312. Вращательный спектр, постоянные Н, ^{19}F спин-спиновой и D-ядерного квадрупольного взаимодействия и молекулярная геометрия димера двуокиси серы-фтористый водород. Rotational spectrum, H, ^{19}F spin-spin and D-nuclear quadrupole coupling constants, and molecular geometry of the sulphur dioxide-hydrogen fluoride dimer. Fillery-Travis A. J., Legon A. C. «J. Chem. Phys.», 1986, 85, № 6, 3180—3187 (англ.)
Место хранения ГПНТБ СССР

М.А.

На микроволновом (МВ) фурье-спектрометре с импульсным соплом в об. частот 7—18 ГГц с разрешением около 8 кГц измерены вращат. спектры 3 изотопич. образцов комплексов $^{32}\text{SO}_2 \dots \text{HF}$ (I), $^{32}\text{SO}_2 \dots \text{DF}$ (II) и $^{34}\text{SO}_2 \dots \text{HF}$ (III), в основном колебат. состоянии. Вращат. постоянные I, II и III, соотв., равны в (МГц): $A = 16502,775(4)$, $16320,261(5)$ и $16366,014(1)$, $B = 2100,308(1)$, $2081,076(2)$ и $2078,428(1)$, $C = 1853,642(1)$, $1836,804(2)$ и $1834,827(1)$. Из анализа

Х. 1987, 19, N 13

ядерной СТС определены для I и II постоянные $H(D)$, ^{19}F спин-спинового взаимодействия и для II постоянные D-ядерного квадрупольного взаимодействия. Димер обладает плоской структурой цис-конформации с H-связью между одним из атомов кислорода SO_2 и HF. С. Н. М.



SD₂... MF [Om. 26159]

1986

Fillery-Travis A.F., Legon A.C.,

Frauman.
Chem. J. Chem. Phys., 1986, 85,
N 6, 3180-3187.

SO₂ ... HF

OT 22997

1986

104: 78064j The geometries of the heterodimers sulfur dioxide-hydrogen fluoride (SO₂...HF) and sulfur dioxide-hydrogen chloride (SO₂...HCl) as determined by rotational spectroscopy. Fillery-Travis, A. J.; Legon, A. C. (Dep. Chem., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QD). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 123(1-2), 4-8 (Eng). The rotational spectra of the H-bonded heterodimers SO₂...HF and SO₂...HCl in their vibrational ground states were obsd. by pulsed-nozzle, Fourier-transform microwave spectroscopy. Rotational consts. A₀, B₀, and C₀, centrifugal distortion consts. Δ_J, Δ_{JK}, and δ_J, and Cl-nuclear coupling consts. χ_{aa} and χ_{bb} were detd. The spectroscopic consts. are interpreted in terms of a geometry in which the subunits are coplanar and in which the HX mol. forms a H bond to one of the O atoms of SO₂. The obsd. geometries were compared with those predicted from electrostatic models of the intermol. interaction.

структур.
параметры,
гравим.
спектр

⊕ ⊗ SO₂...HCl ●

C.A. 1986, 104, N10

SD₂ MF

(DM-29203) 1987

Legon A.C.,
Miller D.J.,
et al.

сверхкритическая,
мелкопористая

Chem. Soc. Rev.,
1987, 16, N 4,
467 - 498.

SO_2 - HF (DM. 29995) 1988.

Andrews L., Withnall R.
et al.

UK 6
mainpiece

J. Phys. Chem., 1988,
92, N. 1, 78-81.

OSO-HF

1988

Carroll Marshall T.

Chang Cheng, et al.

теор.
распредел.
свойств
матриц

Mol. Phys., 1988,
63 (3), 387-405.

(ср. N_2 -HF; III)

SO_2 -HF [om. 31323] 1988

Carroll M.T., Bader R.F.W.,
Mol. Phys. 1988, 65, N3, 695-722.

An analysis of the hydrogen
bond in BASE-HF complexes
using the theory of atoms in
molecules. ●

SD₂-HF

Im. 30888)

1988

109: 237474q The sulfur dioxide-hydrogen fluoride complex. Additional information to the experiment from ab initio calculations. Gerber, Stefan; Huber, Hanspeter (Inst. Phys. Chem., CH-4056 Basel, Switz.). Collect. Czech. Chem. Commun. 1988, 53(9), 1989-94 (Eng). The structure and D-nuclear quadrupole coupling const. of the title complex are calcd. by ab initio SCF methods. The results are compared with recently published exptl. data. The calcns. yield addnl. information not amenable to the expt.

см. кн. 109,
мел. пачка

C.A. 1988, 109, N26

$H_2S \cdots HF$ 1989

Legon A.C., Millen D.J.

J. Mol. Struct. 1989.

M.H. 193.C: 303-306.

($\bullet$ $N_2 \cdots HF$; III)

FSO_3H

Otto, A.H.; et al; 1997

железные
гептот-
теялсуу

J. Chem. Soc., Faraday
Trans. 1997, 93 (22),
3927 - 30.

(all. H_2SO_4 ; III)

HX-SO₃
X=F, Cl, Br

HF-SO₃

1998

структура,
и ф. спектры

130: 116645w Structures of the van der Waals isomers of halo-sulfuric acids: microwave spectra of HX-SO₃ (X = F, Cl, Br). Canagaratna, M.; Phillips, J. A.; Goodfriend, H.; Fiacco, D. L.; Ott, M. E.; Harms, B.; Leopold, K. R. (Department of Chemistry, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1998, 192(2), 338-347 (Eng), Academic Press. The complexes of SO₃ with HF, HCl, and HBr were studied by microwave spectroscopy. In all 3 systems, the halogen atom approaches the SO₃ on or near its C₃ axis, and the vibrationally averaged structure is that of the sym. top. The S-X bond lengths are 2.655(10), 3.1328(57), and 3.2339(85) Å for the HF, HCl, and HBr complexes, resp., and in all 3 systems the out-of-plane distortion of the SO₃ is negligible. In HF-SO₃, the H points away from the SO₃ and hyperfine structure in the DF complex gives an av. angle of 47.7° with respect to the vibrationally averaged C₃ axis of the

(+2) 

C. A. 1999,

130, N9

HCl-SO₃
HBr-SO₃

complex. In the HCl and HBr complexes, however, the HX unit is nearly parallel to the SO_3 plane. In HCl-SO_3 , the HCl forms a 72.8° angle with the av. C_3 axis of the complex, with the proton tilting slightly toward the SO_3 . In HBr-SO_3 , the av. orientation of the HBr is 73.0° off the symmetry axis of the complex, but the direction of tilt (toward or away from the SO_3) is not detd. Although the H halides react with SO_3 in bulk to produce halosulfuric acids, these gas-phase complexes are much like weakly bound dimers. (c) 1998 Academic Press.

FSO₂OH

1998

kk, meop.
paven

128: 314409u A far infrared and theoretical ab initio vibrational study of fluorosulfonic acid as monomer and cyclic dimer. Varetti, E. L. (Dep. de Quim., Fac. de Cienc. Exactas, Univ. Nac. de La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *THEOCHEM* 1998, 429, 121-130 (Eng), Elsevier Science B.V.. Geometrical parameters and wavenos. of the normal modes of vibration of fluorosulfonic acid (FSO₂OH) and its cyclic dimer were calcd. using ab initio methods. The vibrational results were adjusted by scaled force fields to the complete band assignments reported in the literature for the monomer mol. and to the partial assignments known for the dimer. Besides, a description of the H-bond or intermonomer modes was obtained. The far IR spectrum of the gaseous substance revealed a new band, due to 1 of the last mentioned modes.

C.A. 1998, 128, N25