

S-O-F

S<sub>2</sub>F<sub>10</sub>O<sub>2</sub> (спрыкмыра)

Harvey R.B., Bauer S.H.

J. Am. Chem. Soc., 1954, 76, 859-64.

Electron-diffraction study of disulfur  
decafluorodioxide.

Ch. A., 1954, III441

S<sub>2</sub>O<sub>6</sub>F<sub>2</sub>

Dudley F. B. | 1956

Cady G. H.

"J. Am. Chem. Soc."

1956, 79, 513-14.

Di

Box - 791 - II

$\hat{H} - 1272$

39-11-5028

1961

$\sqrt{i} \quad (S_2O_5F_2)$

Gillespie R.J., Robinson E.A.  
Canad J.Chem., 1961, 39, N 11,  
2179-2188 (anna.)

The Raman spectra of some polysul-  
phuryl chlorides and fluorides

PS., 1962, 106102

ko

epur.



$SF_4(SO_2F)_2$

1961.

Shreeve Jm.

Cady G. H.

u.k. envelop

Bcp-713-II

1961, 20, 4521-25

1961

B 90 - 1260 - II

$O(SO_2F)_2$   
 $SO_2(OSO_2F)_2$   
 $O(SO_2SO_2F)_2$

U.K.  
 Raman  
 (sequence)  
 cepn

Spectroscopic and preparative studies on di-, tri-, and tetrasulfurylfluoride. A. Simon and R. Lehmann (Saechs. Akad. Wiss., Leipzig, Ger.). *Z. Anorg. u. Allgem. Chem.* 311, 224-34(1961).—The infrared and Raman spectra of  $O(SO_2F)_2$  (I), b.  $51^\circ$ ,  $SO_2(OSO_2F)_2$  (II), b.  $53^\circ$ , and  $O(SO_2OSO_2F)_2$  (III), b.  $54-5^\circ$ , were studied. Complete band tables are reproduced. The following assignments are given for the infrared frequencies of the liquids (1st value I, 2nd values II, 3rd values III)  $\nu_{as}(SO_2)$  1508, 1400, 1510/1495;  $\nu_s(SO_2)$  1265, 1285sh/1253/1228, 1285/1260/1235/1225;  $\gamma(SF)$  871, 875, 878;  $\nu_{as}(SOS)$  825, 775, 835/752; the Raman frequencies are  $\nu_s(SOS)$  731, 721/699, 735/690;  $\delta(SOS)$  488, 470, 465  $cm^{-1}$ . The frequencies of the  $SO_2$  stretching modes and of the sym. SOS stretching mode of I are at higher wave nos. than those of  $O(SO_2Cl)_2$ .

W. J. Wirtz

C.A. 1962: 56:3  
 2091g

S-O-Hal

| BP-2494-II | 1962

Hal = F, Cl, Br

Venkateswarlu K.  
Rajalakshmi K.V.

(F.g. cb-bq)  
cur. no. 5.

J. sci. Industr. Res.,  
1962, 21B, 349-51

S<sub>2</sub>O<sub>5</sub>F<sub>2</sub>

[A-574]

1963

[ $\nu_i(S'O_S)$ ]

(cm<sup>-1</sup> ucm)

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

II -1298

1963

$F_2SO_4$  ( 9 )

Gillespie R.J., Robinson E.A.

The raman spectra of sulphuric, deuteriosulphuric, fluorosulphuric, chlorosulphuric, and methanesulphonic acids and their anions. "Canad.J.Chem.", 1962, 40, N 4, 644-657 (AMM.).

PX., 1963, 1, 6 139

$SF_4$ ;  $SOF_2$  (vi);  $SF_4-SF_4$ ;  $SF_4-SOF_2$  1965  
II 751 (crystalline)

Redington R.L., Benney C.V.,  
J. Chem. Phys., 1965, 43, N6,  
2020-26

$SF_4$  and  $SOF_2$ : improved evidence  
for dimer formation at low  
temperatures

6 of series

pp 66

10

$(FSO_3)_2SO_2$ ,  $(FSO_3)_2SF_4$  (Do) 12 1967

Castellano E., Schumacher H.J.

An Assoc. chim. argent., 1967, SS, N 3-5, XII 537  
147-151 (учет.)

Кинетика термических реакций перокси-  
дисульфоросульфурата с  $SO_2$  и  $SF_4$ . Энергия  
диссоциации  $DFSO_3-SO_2$  и  $DFSO_3-SF_4$   
прямых и обратных  $FSO_3-SO_2$  и  $FSO_3-SF_4$

РНХЛ, 1970

15842

М (CP)

ВНИИО АСХ

A F (S2O6F2; SO3F) XII-1887 1968  
80911.2879  
Ch Do (SO3F) 40892

Stewart R. Allan, Fujiwara Shizuo,  
Aubke F. EPR study of the equilibrium  
between peroxydisulfuryl difluoride and  
fluorosulfate free radicals in the gaseous  
state.

"J. Chem. Phys.", 1968, 48, N 12, 5524-  
5525  
(англ.)

821 827 830

ВИНИТИ



ВФ-ХИ-19

1970

$F_2S_2O_5$

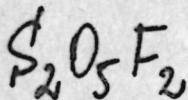
19 Б155. Молекулярные спектры фтористого дисульфурила. Bernard Pierre. Vast Pierre. Spectre moléculaire du fluorure de disulfuryle. «С. г. Acad. sci.», 1970, С270, № 15; 1291—1293 (франц.)

Измерены и изучены ИК- и КР-спектры  $F_2S_2O_5$  (I). Из сопоставления двух колебательных спектров, а также из результатов измерения поляризации КР-линий сделан вывод о том, что симметрия молекулы I —  $C_{2v}$ . Произведено отнесение частот:  $740\text{ см}^{-1}$  — сим. вал. кол. S—O—S,  $318\text{ см}^{-1}$  — асим. вал. кол. S—O—S,  $157\text{ см}^{-1}$  — деф. кол. S—O—S и  $875\text{ см}^{-1}$  — вал. кол. S—F. Рассмотрено влияние р-рения I в ацетонитриле на колебательные спектры. Наблюдаемые спектральные изменения объясняются за счет образования в р-ре ионов  $FSO_3^-$ .

И. В. Кумпаненко

$V_2$

Х. 1970. 19



$\nu_i$

Raman  
measuring

C. A. 1970. 73. 8

BP-X11-19

1970

(40280a) Molecular spectrum of disulfuryl fluoride. Bernard, Pierre; Vast, Pierre (Lab. Chim. Miner. I. C., Fac. Sci. Lille, Lille, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. C* 1970, 270(15), 1291-3 (Fr). The Raman spectrum of pure  $S_2O_5F_2$  is comprised of 17 lines,

only 6 of which are polarized; consequently, the mol. was assigned  $C_{2v}$  symmetry. The frequency (in  $cm^{-1}$ ) assignments are: S-O-S bridge  $\delta$  157 polarized,  $\nu_{asym}$  318,  $\nu_{sym}$  740 polarized and intense (corresponding to a very weak band in the ir); S-F bond, 875 polarized. When  $S_2O_5F_2$  was dissolved in MeCN, the ir and Raman spectra of  $S_2O_5F_2$  changed and the lines of the  $SO_3F^-$  ion were obsd.

DWJF

1970

 $\text{SOF}_3^+$  $\frac{1}{2}$ 

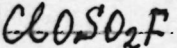
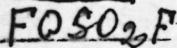
49377d Trifluorosulfur(VI) oxide cation,  $\text{SOF}_3^+$ . Brownstein, M.; Dean, P. A. W.; Gillespie, R. J. (Dep. Chem., McMaster Univ., Hamilton, Ont.). *J. Chem. Soc. D* 1970, (1), 9 (Eng). The adducts  $\text{SOF}_4 \cdot \text{AsF}_5$  and  $\text{SOF}_4 \cdot \text{SbF}_5$  have an ionic structure  $\text{SOF}_3^+ \cdot \text{MF}_6^-$  in the solid state and in soln. in HF as indicated by cond. measurements and NMR and Raman spectra. The vibrational spectrum of the  $\text{SOF}_3^+$  ion is assigned and the bonding in the ion is discussed.

CJJN

C.A. 1970 72.10

X11-906

1941



(103203w) Vibrational spectra of peroxydisulfuryl difluoride

$S_2O_6F_2$  and the halogen derivatives fluorine fluorosulfate  $FOSO_2F$  and chlorine fluorosulfate  $ClOSO_2F$ . Qureshi, A. M.; Levchuk, L. E.; Aubke, F. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *Can. J. Chem.* 1971, 49(15), 2544-51 (Eng). Vibrational spectra of the halogen fluorosulfates  $FOSO_2F$  and  $ClOSO_2F$  are recorded, and  $C_s$  symmetry is suggested for the mols. For peroxydisulfuryl difluoride a staggered nonplanar configuration with  $C_2$  symmetry is indicated by the polarized Raman spectra.

(Vi, стукт.)

(+2) ☒

C.A. 1941. 45. 16

$S_2O_6F_2$

S-Hal

1971

$SO_2F_2$

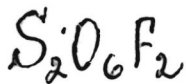
$SO_2Cl_2$

Хроение

2 Д523. Колебательные спектры пероксидисульфурилдифторида  $S_2O_6F_2$  и галогенопроизводных  $FOSO_2F$  и  $ClOSO_2F$ . Qureshi A. M., Levchuk L. E., Aubke F. Vibrational spectra of peroxydisulfuryl difluoride  $S_2O_6F_2$  and the halogen derivatives  $FOSO_2F$  and  $ClOSO_2F$ . «Can. J. Chem.», 1971, 49, № 15, 2544—2551 (англ.)

Исследованы спектры комб. рас. газообразных  $S_2O_6F_2$  (I),  $FOSO_2F$  (II) и  $ClOSO_2F$  (III) и ИК-спектры газообразных и твердых I—III. На основании анализа спектров и поляризационных данных в спектрах комб. рас. сделан вывод, что молекулы II и III имеют симметрию  $C_s$ , а молекула I — симметрию  $C_2$ . Приведены спектры и таблицы частот. Библ. 48. Э. В. Б.

Б. 1972. 2 Д



Qureshi, Abdul M.

1971

"Diss. Abst. Int. B"

Chemup

1971, 32 (5), 2584.

● [cu. Br(OSO<sub>2</sub>F)<sub>2</sub>; III]

$F_2SO_4$ ,  $F_2S_2O_7$ ,  $F_2S_2O_6$ ,  $FSO_4$  (vi) 1972

Oakes K.A., XII 1136

Diss. Abstr. Int., 1972, B33, N5, 2015 (anal.)

Vibrational analysis of fluorine  
fluorosulfate, pyrosulfuryl fluoride  
peroxidisulfuryl difluoride, and  
the fluorosulfate free radical.

L

10

⊕

CA, 1973, 78, N6, 35778x

FSO<sub>4</sub>

1942

Chem. Abstr.

81351e Normal coordinate analysis of the fluorosulfate radical and anion in the Urey-Bradley force field. So, S. P. (Chung Chi Coll., Chin. Univ. Hong Kong, Hong Kong). *Mol. Phys.* 1972, 23(6), 1147-54 (Eng). The Urey-Bradley force consts. of the fluorosulfate radical in the ground  $^2A_2$  and the excited  $^2E$  electronic states and the fluorosulfate anion in the ground  $^1A_1$  electronic state were calcd. by using published fundamental frequencies. The anal. was carried out within Wilson's *FG* formalism and the consts. were evaluated by a computer program based on the last-squares-fit method. The normal coordinates and the potential-energy distributions were also detd. Results support the assignments of the fundamental frequencies; the ground-state values for the radical have so far been obtained only from the anal. of its electronic spectrum.

C.A. 1972. 74. 12



SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup>

1973

19 Б147. Колебательный спектр и силовые постоянные аниона SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup>. Christe Karl O., Schack Carl J., Pilipovich Donald, Curtis E. C., Sawodny Wolfgang. Vibrational spectrum and force constants of the SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup> anion. «Inorg. Chem.», 1973, 12, № 3, 620—622 (англ.)

д.и.с.н.

Описан синтез аддукта CsF·SF<sub>4</sub>O (I) путем добавления SF<sub>4</sub>O к сухому CsF при т-ре жидк. азота с последующим нагреванием реакционной смеси до 90° в течение 5 суток. Измерены ИК-(4000—250 см<sup>-1</sup>) и КР-спектры I. Дано отнесение колебаний для аниона SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup> (II) на основе его псевдооктаэдрич. структуры (симметрия *c<sub>4v</sub>*) и с использованием аналогии с изоэлектронной молекулой SF<sub>5</sub>Cl (III), а также с JF<sub>5</sub>O, SF<sub>5</sub><sup>-</sup> и SeF<sub>5</sub>Cl. Проведен анализ нормальных колебаний II и вычислены силовые постоянные в модифицирован-

х. 1973 № 19

ном валентно-силовом поле. Указано на полную аналогию спектров I и III. Результаты подтверждают структурную модель с симметрией  $C_{4v}$ . Показано, что сильное снижение частоты вал. кол.  $\nu(\text{SO})$  ( $1154 \text{ см}^{-1}$ ) по сравнению с  $\text{SF}_3\text{O}^+$  ( $1538 \text{ см}^{-1}$ ) и  $\text{SF}_4\text{O}$  ( $1380 \text{ см}^{-1}$ ) связано с возрастанием отрицат. заряда на кислороде. Величина силовой постоянной в II намного меньше, чем для двойной связи  $\text{S}=\text{O}$  и сравнима со значением ее в анионе  $\text{SO}_4^{2-}$ . Отсюда сделан вывод о том, что в II связь  $\text{SO}$  имеет порядок  $\sim 1,5$ . Величина силовой постоянной  $\text{SF}$  в II существенно ниже, чем для ковалентных связей  $\text{SF}$ , что подтверждает существенный ионный вклад связей  $\text{SF}$  в II. Вал. кол.  $\text{SO}$  и  $\text{SF}$  сильно связаны между собой.

Е. Разумова

SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup>

1973

Cur. not.

Vi

± 104076f Vibrational spectrum and force constants of the SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup> anion. Christe, Karl O.; Schack, Carl J.; Pilipovich, Donald; Curtis, E. C.; Sawodny, Wolfgang (Rocketdyne Div., North Am. Rockwell Corp., Canoga Park, Calif.). *Inorg. Chem.* 1973, 12(3), 620-2 (Eng). The CsF.SF<sub>5</sub>O adduct was prepd. and characterized by ir and Raman spectroscopy. All 11 fundamental vibrations expected for a pseudooctahedral anion of symmetry C<sub>4v</sub> were obsd. and assigned. A modified valence force field was computed for SF<sub>5</sub>O<sup>-</sup> and it suggests a S-O bond order ~1.5.

C. A. 1973. 78 N 16

FOOSO<sub>2</sub>F

аттиса 1499

1973

3 Д395. Спектры комбинационного рассеяния перекисей фтористого фторсульфурила и трифторметилфторсульфурила. Carter Henry A., Kirchmeier Robert L., Shreeve Jean'ne M. Raman spectra of fluoro fluorosulfonyl peroxide and trifluoromethyl fluorosulfonyl peroxide. «Inorg. Chem.», 1973, 12, № 10, 2237—2240 (англ.)

спектр

Получены спектры комб. рас. (10—2000 см<sup>-1</sup>) жидких несимметричных фторированных перекисей FOOSO<sub>2</sub>F и CF<sub>3</sub>OOSO<sub>2</sub>F, а также их ИК-спектры поглощения (400—2000 см<sup>-1</sup>) в газообразном состоянии. Выполнен анализ норм. координат и предложено отнесение наблюдавшихся частот. Частоты вал. кол. O—O найдены равными 890 и 863 см<sup>-1</sup> для FOOSO<sub>2</sub>F и CF<sub>3</sub>OOSO<sub>2</sub>F, соответственно. Библи. 34.

С. Ф. Б.

Р. 1974 N3



FOOSO<sub>2</sub>F

оттиски 1499

1973

7 Б219. Спектры комбинационного рассеяния фтор-фторсульфурил-перекиси и трифторметил-фторсульфурил-перекиси. Carter Henry A., Kirchmeier Robert L., Shreeve Jean'ne M. Raman spectra of fluoro fluorosulfonyl peroxide and trifluoromethyl fluoro-sulfonyl peroxide. «Inorg. Chem.», 1973, 12, № 10, 2237—2240 (англ.)

Измерены спектры КР жидк. FOOSO<sub>2</sub>F (I) и CF<sub>3</sub>O-OSO<sub>2</sub>F (II) в области 10—2000 см<sup>-1</sup> и ИК-спектры газов I и II в области 400—2000 см<sup>-1</sup>. Измерена степень деполяризации линий КР. Проведено отнесение частот по типам колебаний. К вал. кол. O=O отнесены частоты 890 и 863 см<sup>-1</sup> для I и II соотв. Результаты сопоставлены с данными для др. перекисей: HOOH, FOOF, DOOD, CF<sub>3</sub>OOCF<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>OOSO<sub>2</sub>F, FOOS-O<sub>2</sub>F, FSO<sub>2</sub>OOSO<sub>2</sub>F, SF<sub>5</sub>OOSF<sub>5</sub>, SF<sub>5</sub>OOSO<sub>2</sub>F.

А. П. Курбакова

2.1974 №7

154/40

⊗

⊕

FOOSO<sub>2</sub>F

omnium 1499

1973

(Di)

120073d Raman spectra of fluoro fluorosulfuryl peroxide and trifluoromethyl fluorosulfuryl peroxide. Carter, Henry A.; Kirchmeier, Robert L.; Shreeve, Jean'ne M. (Dep. Chem., Univ. Idaho, Moscow, Idaho). *Inorg. Chem.* 1973, 12(10), 2237-40 (Eng). The liq.-phase Raman spectra of FOOSO<sub>2</sub>F and CF<sub>3</sub>OOSO<sub>2</sub>F are reported. The ir spectra were also reinvestigated at 400-2000 cm<sup>-1</sup> for the gaseous compds. Vibrational analyses were made for both mols. based on a description of the normal modes of vibration by the characteristic group vibrations. The O-O stretching vibrations were obsd. at 890 and 863 cm<sup>-1</sup> for FOOSO<sub>2</sub>F and CF<sub>3</sub>OOSO<sub>2</sub>F, resp.

0-7-1451

(+1)



C.A. 1973. 79 N20

SF<sub>5</sub>OOSF<sub>5</sub>

XT-1193

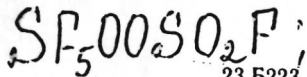
1973

SF<sub>5</sub>OOSO<sub>2</sub>F

110001q Vibrational spectra of bis(pentafluorosulfur) peroxide and pentafluorosulfur fluorosulfuryl peroxide. Carter, Henry A.; Shreeve, Jean'ne M. (Dep. Chem., Univ. Idaho, Moscow, Idaho). *Spectrochim. Acta, Part A* 1973, 29(7), 1321-8 (Eng). The liq. phase Raman spectra of SF<sub>5</sub>OOSF<sub>5</sub> and SF<sub>5</sub>OOSO<sub>2</sub>F were detd. at 100-2000 cm<sup>-1</sup> and the ir extended to 400 cm<sup>-1</sup>. Assignments for the normal modes of vibration were made on the basis of staggered nonplanar structures similar to H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. The O-O stretching frequencies were at 751 and 740 cm<sup>-1</sup> for SF<sub>5</sub>OOSF<sub>5</sub> and SF<sub>5</sub>OOSO<sub>2</sub>F, resp. These low frequencies were attributed to extensive vibrational coupling.

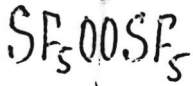
Di  
Raman -  
cm<sup>-1</sup>

C. A. 1973.79 N18



XI - 1193

1973



23 Б223. Колебательные спектры перекиси бис(пятифтористой серы) и перекиси фторсульфурилпятифтористой серы. Carter Henry A., Shreeve Jean'ne M. The vibrational spectra of bis (pentafluorosulfur) peroxide and pentafluorosulfur fluorosulfonyl peroxide. «Spectrochim. acta», 1973, A29, № 7, 1321—1328 (англ.)

(vi)

Исследованы спектры КР жидких  $\text{SF}_5\text{OOSO}_2\text{F}$  и  $\text{SF}_5\text{OOSF}_5$  в области  $2000-100 \text{ см}^{-1}$ . Анализ спектров проведен на основе неплоской структуры исследованных соединений, подобной перекиси водорода. К вал. кол.  $\text{O}-\text{O}$  в спектрах  $\text{SF}_5\text{OOSF}_5$  и  $\text{SF}_5\text{OOSO}_2\text{F}$  отнесены соотв. полосы при  $751$  и  $740 \text{ см}^{-1}$ . Необычно низкие значения этих частот объяснены взаимодействием колебаний.

Е. Матросов

х. 1973 № 23



2.681. Молекулярные структуры полисульфурилфторидов, изученные методом газовой электронографии:  $S_2O_5F_2$  и  $S_3O_8F_2$ , Hencher J. Lawrence, Bauer S. H. The molecular structures of the polysulfuryl fluorides by vapor phase electron diffraction:  $S_2O_5F_2$  and  $S_3O_8F_2$ . «Can. J. Chem.», 1973, 51, № 12, 2047—2054 (англ.; рез. франц.)

Методом газовой электронографии изучены молекулы  $S_2O_5F_2$  (I) и  $S_3O_8F_2$  (II). Установлено, что обе молекулы обладают структурой мостикового типа:  $SO_2F-O-SO_2F$  для I и  $SO_2F-O-SO_2-O-SO_2F$  для II. Из-за сложности структур полный конформационный анализ произвести не удалось; предполагалось, что найденные конформации более стабильны по сравнению с другими по крайней мере на 2,5 ккал/моль. Найденны след. значения межъядерных расстояний (А) и углов I:  $S=O$   $1,398 \pm 0,002$ ,  $S-F$   $1,525 \pm 0,005$ ,  $S-O$   $1,611 \pm 0,005$   $SOS$   $123,6 \pm 0,5^\circ$ ,  $OS=O$   $106,1 \pm 0,9^\circ$ ,  $FS=O$   $106,6 \pm 0,6^\circ$   $O=S=O$   $126,8 \pm 1,2^\circ$ ,  $OSF$   $102,4 \pm 1,8^\circ$ ,  $\tau_{FS/OS'}$  (диэдрич. угол  $FSOS'$ )  $53,8 \pm 2,7^\circ$ ,  $\tau_{F'S'/OS}$  (диэдрич. угол  $F'S'S'OS$ )  $73,7 \pm 2,4^\circ$ ; II  $S=O$   $1,402 \pm 0,003$ ,  $S-F$   $1,525 \pm 0,012$ ,  $S-O$   $1,613 \pm 0,006$ ,  $OSO$   $97,8 \pm 1^\circ$ ,  $SOS$   $123,6 \pm 1,2^\circ$ ,  $OS=O$   $106,5 \pm 0,8^\circ$ ,  $FS=O$   $105,5 \pm 1,2^\circ$ ,  $O=S=O$  (в мостике)  $128,8 \pm 1,4^\circ$ ,  $O=S=O$   $128,5 \pm 1,4^\circ$ ,  $OSF$   $101,3 \pm 1,5^\circ$ ,  $\tau_{SO/SO}$  (диэдрич. угол  $SOSO$ )  $295,3 \pm 0,9^\circ$ ,  $\tau_{FS/OS}$  (диэдрич. угол  $FSOS$ )  $319,4 \pm 2,2^\circ$ . В. Спиридонов

$S_2O_5F_2$   
 $S_3O_8F_2$

200177

x. 1974

N2

1973

ХЗ-1484

⊠

④1

Синько

\* 3 - 1474

1973

S<sub>2</sub>O<sub>5</sub>F<sub>2</sub>S<sub>3</sub>O<sub>8</sub>F<sub>2</sub>computer  
napa

C.A.

1973

79 N12

71123j Molecular structures of the polysulfuryl fluorides by vapor phase electron diffraction. Pyrosulfuryl fluoride and trisulfuryl fluoride. Hencher, J. Lawrence; Bauer, S. H. (Dep. Chem., Univ. Windsor, Windsor, Ont.). *Can. J. Chem.* 1973, 51(12), 2047-54 (Eng). The mol. structures of the polysulfuryl fluorides, S<sub>2</sub>O<sub>5</sub>F<sub>2</sub> and S<sub>3</sub>O<sub>8</sub>F<sub>2</sub>, were detd. by vapor phase electron diffraction. In each case it was assumed that a single rotomer was more stable than all others, by at least 2.5 kcal/mole. The possibility that the sample consisted of a mixt. of conformations of comparable stabilities was not explored. The thermally averaged  $r_0$  parameters for S<sub>2</sub>O<sub>5</sub>F<sub>2</sub> are as follows: S:O =  $1.398 \pm .002$  Å; S-F =  $1.525 \pm 0.005$  Å; S-O =  $1.611 \pm 0.005$  Å;  $\angle$  SOS =  $123.6 \pm 0.5^\circ$ ;  $\angle$  OS:O =  $106.1 \pm 0.9^\circ$ ;  $\angle$  FS:O =  $106.6 \pm 0.6^\circ$ ;  $\angle$  O:S:O =  $126.8 \pm 1.2^\circ$ ;  $\angle$  OSF =  $102.4 \pm 1.8^\circ$ ;  $\tau_{FS/OS}$  =  $53.8 \pm 2.7^\circ$ ;  $\tau_{F'S'/OS}$  =  $73.7 \pm 2.4^\circ$ . The  $r_0$  parameters for S<sub>3</sub>O<sub>8</sub>F<sub>2</sub> are: S:O =  $1.402 \pm 0.003$  Å; S-F =  $1.525 \pm 0.012$  Å; S-O =  $1.613 \pm 0.006$  Å;  $\angle$  OSO =  $97.8 \pm 1.0^\circ$ ;  $\angle$  SOS =  $123.9 \pm 1.2^\circ$ ;  $\angle$  OS:O =  $106.5 \pm 0.8^\circ$ ;  $\angle$  FS:O =  $105.5 \pm 1.2^\circ$ ;  $\angle$  O:S:O (bridge) =  $128.8 \pm 1.4^\circ$ ;  $\angle$  O:S:O =  $128.5 \pm 1.4^\circ$ ;  $\angle$  OSF =  $101.3 \pm 1.5^\circ$ ;  $\tau_{SO/SO}$  =  $295.3 \pm 0.9^\circ$ ;  $\tau_{FS/OS}$  =  $319.4 \pm 2.2^\circ$ . The std. errors listed are 3 times the calcd. values and are believed to encompass the nonrandom errors in the anal.

$(CF_3O)_3S$ ;  $(CF_3O)_2SF$ ;  $(SF_5O)_3S$ ;  $(SF_5O)_2SF$   $\left( \begin{array}{l} \text{VII 129} \\ \text{структ.} \end{array} \right) \begin{array}{l} 1973 \\ 12 \end{array}$

Morton J.R., Preston K.F.,

J. Phys. Chem., 1973, 77, N22,  
2645-8 (англ.)

Electron spin resonance spectra of sulfaeryl radicals in solution.

CA, 1973, 79, N26, 151286e

$F_5SO^-$

XII-1322

1973

$F_5SOH$

Si, Do

4 Б37. Теоретическое исследование методом МО иона  $F_5SO^-$  и соответствующей кислоты  $F_5SOH$ . Rode Bernd M. MO-theoretische Behandlung des  $F_5SO^-$ -Ions und der korrespondierenden Säure  $F_5SOH$ . «Z. Naturforsch.», 1973, 28a, № 9, 1537—1538 (нем.; рез. англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ПДП/2 исследовано электронное строение  $F_5SO^-$  (I),  $F_5SOH$  (II) и, для сравнения,  $F_4SO$  (III),  $HF$  (IV),  $SO_4^{2-}$  и  $SF_6$ . Рассчитаны распределения электронной плотности, полные энергии и энергии связи. Показано, что II на 124 ккал/моль стабильнее, чем III+IV. Полученные результаты сопоставлены с имеющимися данными по ИК- и КР-спектрам. Предсказано, что II по к-тности должна быть промежуточной между  $HCl$  и  $FSO_3H$ .  
В. Лебедев

X1974N4

(+5)

⊗

$F_5SO^-$

$F_5SOH$

XII - 1322

1973

Кв. сек.  
раств.;  
суперкрит.  
Делфт. хим.

30815p. MO theoretical treatment of the sulfur pentafluoride

oxide ion  $[F_5SO]^-$  and the corresponding acid sulfur pentafluoride hydroxide  $[F_5SOH]$ . Rode, Bernd M. (Inst. Anorg. Anal. Chem., Univ. Innsbruck, Innsbruck, Austria). *Z. Naturforsch., Teil A* 1973, 28(1), 1538-9 (Ger). Bonding in the  $F_5SO^-$  ion is discussed by comparing the results of complete neglect of differential overlap (CNDO) calcs. for this compd. and  $F_5SO$ ,  $SO_2$ , and  $SiF_4$  with data obtained from ir and Raman spectra. Theor. and exptl. results agreed well. Calcs. for  $F_5SOH$  yielded a stabilization with respect to  $F_5SO + HF$  by 124 kcal. Since stabilization energies obtained by CNDO methods are generally too high, this value indicates the reason why  $F_5SOH$  has not as yet been prepd. The acid strength of  $F_5SOH$  in glacial AcOH should be between those of  $HCl$  and  $FSO_3H$ .

C.A. 1974. 80. N 6

XII-1509

1975

$S_2O_6F_2$ ,  $SO_3F$  ( $V_i$ , mat. uost.)

Suzuki E.M., Nibler J.W., Oakes K.A.,  
Eggers D.

J. Mol. Spectrosc., 1975, 58, 12, 201-215

PNUP, 1976, 6D209

10

1975

2 Д503. ИК-спектры дифтордисульфана, тиотионилфторида и дифтортрисульфана при низких температурах. Wanczek Karl-Peter, Bliefert Claus, Budenz Rudolf. Low temperature infrared spectroscopic studies of difluorodisulfane, thiothionylfluoride and difluorotrisulfane. «Z. Naturforsch.», 1975, 30a, № 9, 1156—1163 (англ.)

Получены ИК-спектры дифтордисульфана (I), тиотионилфторида (II), смесей I и II, I и  $\text{OSF}_2$ , II и  $\text{OSF}_2$  в твердом состоянии и в матрице циклогексана при пониженной ( $95-100^\circ\text{K}$ ) т-ре. Для дифтортрисульфана (III) зарегистрирован ИК-спектр в твердом состоянии. Обнаружено, что II не образует олигомеров,

и.к.  
спектр



Ф 1976 №2

тогда как в спектре I присутствуют линии колебаний димера 635 и 682  $\text{см}^{-1}$ . Предположено, что структура димера I аналогична строению димера тетрафторида серы. Стабилизация димера I связывается с большей длиной связи S—F в I (1,635 Å) по сравнению с II (1,598 Å). В спектре III обнаружены 3 линии (590, 605 и 680  $\text{см}^{-1}$ ), приписанные ассоциированным молекулам III. При нагревании происходит терморазложение III с образованием I и II. Отмечено уменьшение частот валентных колебаний связей S—S и S—F I и II в условиях матричной изоляции по сравнению с газовой фазой. Библиография. 31.

И. В. А.



$\text{SF}_5\text{O}^-$  (anion. noted.)

1976

185: 133415r Average vibrational amplitudes of pentafluorooxosulfate(1-) ion. Baran, Enrique J.; Botto, Irma L. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, La Plata, Argent.). Z. Chem. 1976, 16(8), 329-30 (Ger). The mean vibrational amplitudes (in Å) were calcd. for  $\text{SF}_5\text{O}^-$  at various temps. The axial S-F bond is stronger than the equatorial S-F bonds. The S-O bond, which has the lowest amplitude value and the least temp. dependence, appears in the region which is characteristic for this bond.

C.A. 1976. 85 N 18

70801.7434

Ch, Pl

29864

1977

FSO<sub>2</sub>OF

XII-2012

Allen Peter S., McCall Michael J.,  
Aubke Felix, Dunnell Basil A.  
Wide-line N.M.R. analysis of the  
molecular structure of FSO<sub>2</sub>OF.

"J.Chem.Soc.Faraday Trans.", 1977, Part 2,  
73, N 6, 769-773.

(англ.)

0927 нмк

909 909 9 18

ВИНИТИ

(F<sub>5</sub>SO)<sub>2</sub>

XII-1836a

1978

18 Б987. Кинетика термического разложения бис-пентафторсульфоперекиси в присутствии окиси углерода. Czarnowski J., Schumacher H. J. Kinetics of the Thermal Decomposition of Bis-Pentafluorine Sulfur Peroxide in the Presence of Carbon Monoxide. «Int. J. Chem. Kinet.», 1978, 10, № 1, 111—116 (англ.)

В статическом реакторе при 130—162° и давл. 50—600 мм изучался термич. распад F<sub>5</sub>SOOSF<sub>5</sub> (I) в присутствии СО. Показано, что в условиях опытов распад I гомогенен, скорость распада пропорциональна кол-ву (I) и не зависит от парц. давл. СО, О<sub>2</sub> и общего давления. Конечными продуктами распада являются СО<sub>2</sub> и S<sub>2</sub>F<sub>10</sub>. Полученные результаты объясняются в рамках схемы F<sub>5</sub>SOOSF<sub>5</sub> → 2OSF<sub>5</sub> (1); OSF<sub>5</sub> + СО → СО<sub>2</sub> + SF<sub>5</sub> (2) и 2SF<sub>5</sub> → S<sub>2</sub>F<sub>10</sub>. Лимитирующей стадией является р-ция (1). В пределе больших давл. константа скорости р-ции (1) равна  $(1,82 \pm 0,1) \cdot 10^{15} \exp [-(37,2 \pm 0,3)/RT] \text{сек}^{-1}$ ; соотв. энергия, связи F<sub>5</sub>SO—OSF<sub>5</sub> равна  $37,2 \pm 0,3$  ккал/моль. Полученные данные сравниваются с литературными.

И. О. Лейпунский

энергия  
связи  
К реакции

2. 1978, № 18

$SF_5OOH$

$SF_5OOF$

$SF_5OOCl$

$I_1$

(+2)  $\boxtimes$

2. 1979 IV 2

1978

(2 Б224) Перекиси пятифтористой серы: синтез, свойства и колебательные спектры  $SF_5OOH$ ,  $SF_5OOF$ ,  $SF_5OOCl$  и доказательство существования трехокиси  $SF_5OOOSF_5$ . Des Marteau D. D., Hamaker R. M. Pentafluorosulfur peroxides: synthesis, properties and vibrational spectra of  $SF_5OOH$ ,  $SF_5OOF$ ,  $SF_5OOCl$  and evidence for the trioxide,  $SF_5OOOSF_5$ . «Isr. J. Chem.», 1978, 17, № 1—2, 103—113 (англ.)

$SF_5OOH$  (I) получена при контролируемом гидролизе  $SF_5OOC(O)F$ ,  $SF_5OOF$  (II) и  $SF_5OOCl$  (III) синтезированные при взаимодействии I с фтором и монофторидом хлора соотв., в присутствии  $CsF$ . При получении II образуется также неустойчивый продукт  $SF_5OOOSF_5$  (IV). Соединения I—IV летучи, II взрывоопасен, охарактеризованы т. кип., т. пл., мол. весом,  $\Delta H_{\text{парообр.}}$ ,  $\Delta S_{\text{парообр.}}$ , спектрами ЯМР- $^{19}F$ . Измерены ИК-спектры газообр. I, III, спектры КР жидк. I—IV, а также ИК-и КР-спектры соединений  $SF_5OF$  (V) и  $SF_5OCl$  (VI) в области 160—4000  $cm^{-1}$ . Проведено сравнение колеба-

тельных спектров двух изоэлектронных серий:  $\text{SF}_5\text{Cl}$  (лит. данные), V, I; VI, II, III и  $\text{SF}_5\text{OH}$  (лит. данные). Предложено отнесение наблюдаемых в спектрах I—VI частот, исходя из локальной симметрии фрагментов  $\text{SF}_5\text{X}$  и  $\text{SF}_5\text{O}—\text{C}_{4v}$ , а в ряде случаев — исходя из полной симметрии молекул ( $\text{C}_4$  для I—III). Самая интенсивная и поляризованная линия КР —  $730\text{ см}^{-1}$  (I),  $715\text{ см}^{-1}$  (II),  $732\text{ см}^{-1}$  (III),  $741\text{ см}^{-1}$  (VI),  $718\text{ см}^{-1}$  (VI) — отнесена к сим. вал. кол. квадрата  $\text{SF}_4$ . К вал. кол. 0—0 отнесены КР-линии  $938$ ,  $873$  и  $837\text{ см}^{-1}$  для I, II и III соотв. В спектре КР смеси IV с  $\text{SF}_5\text{OOSF}_5$  появляются новые линии  $731\text{ см}^{-1}$  (вал. кол. квадрата  $\text{SF}_4$ ) и  $150\text{ см}^{-1}$  (деф. кол. скелета).

С. Букалов

F<sub>5</sub>SO<sub>5</sub>F<sub>5</sub> ommea 6558 1978.

mod. Oberhammer H., et al.  
empyrt Inorg. Chem., 1978, 17 (6)  
1435-39

Electron Diffraction Study.

$F_5SOSeF_5$

1978

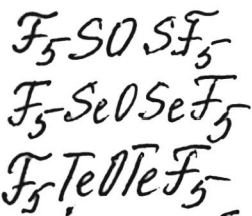
$F_5SeOSeF_5$

Синтез

нагреве

88:68070v Molecular structure of  $F_5SOSeF_5$ ,  $F_5SeOSeF_5$  and  $F_5TeOTeF_5$ : d-orbital contribution to compounds between main group elements. Oberhammer, Heinz; Seppelt, Konrad (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Tuebingen, Tuebingen, Ger.). *Angew. Chem.* 1978, 90(1), 66-7 (Ger). The mol. structures of the title gaseous compds. were detd. by electron diffraction and the d-orbital contribution to the bonding assessed. The chalcogen-O-chalcogen bond angles are 142.5, 142.4, and 145.5°, resp. Each chalcogen has 4 equatorial F atoms. The chalcogen-O bonds appear to be double (pd)- $\pi$  bonds.

C.A. 1978, 83, 110



молекуляр.  
структ.

(+1) 18

(+1) F-Fe.

2. 1978, N 10

1978

10 Б91. Молекулярная структура  $\text{F}_5\text{SOSF}_5$ ,  $\text{F}_5\text{SeOSeF}_5$  и  $\text{F}_5\text{TeOTeF}_5$ : участие  $d$ -орбиталей в связи между элементами главных групп. Oberhammer Heinz, Seppelt Konrad. Molekülstruktur von  $\text{F}_5\text{SOSF}_5$ ,  $\text{F}_5\text{SeOSeF}_5$  und  $\text{F}_5\text{TeOTeF}_5$ :  $d$ -Orbitalbeteiligung an Bindungen zwischen Hauptgruppenelementen. «Angew. Chem.», 1978, 90, № 1, 66—67 (нем.)

Для эксперим. подтверждения участия  $d$ -орбиталей в образовании связи между элементами главных групп методом газовой электронографии исследована молекулярная структура халькогеноксифторидов  $(\text{F}_5\text{X})_2\text{O}$  ( $\text{X}=\text{S}$  (I),  $\text{Se}$  (II),  $\text{Te}$  (III)), полученных по усовершенствованным или новым методикам (I из  $\text{SF}_4$  и  $\text{F}_2\text{O}$  фотооблучением при  $-78^\circ$ ; II — термич. разложением  $\text{Xe}(\text{OSeF}_5)_2$  при  $130^\circ$ ; III из  $\text{TeO}_2$  р-цией со смесью  $\text{F}_2/\text{N}_2$ ). Для I—III установлены приблизительное постоянство и большая величина угла при мостиковом атоме O ( $142,5^\circ$  в I,  $142,4^\circ$  в II и  $145,5^\circ$  в III), а также затменная конформация 4 экваториальных связей  $\text{X}-\text{F}$  при двух атомах X. Уже эти факты, по мнению авторов, указывают на вклад  $\pi$ -двоесвязности в связи  $\text{X}-\text{O}$ . Найденные значения длин связей  $\text{X}-\text{O}$



(1,586, 1,697 и 1,832 Å в I—III соотв.) короче известных длин ординарных связей, а для III длина связи  $\text{Te—O}$  совпадает с формально двойной связью в  $\text{TeO}_2$  (1,83 Å). Наблюдаемое сокращение длин связей  $\text{X—O}$  интерпретировано как проявление  $d_\pi(\text{X})—p_\pi(\text{O})$ -взаимодействия. Эксперим. различия в длинах связей  $\text{X—F}_{\text{экв.}}$  и  $\text{X—F}_{\text{акс.}}$  невелико (1,558 и 1,572; 1,683 и 1,665; 1,820 и 1,799 Å соотв. в I—III), однако для II и III аксиальные связи короче экваториальных, что

не позволяет объяснить частично двойной характер связи  $\text{X—O}$  в II и III сверхсопряжением типа  $—\text{O}^+=\text{S}\cdots\text{F}^-$ , при котором аксиальные связи должны быть ослаблены. Для I учет ионности связи  $—\text{O}—\text{S}^+$  не приводит к удовлетворительному объяснению двоевязности из-за небольшого различия в электроотрицательностях атомов S и O. По значениям валентных углов  $\text{F}_{\text{экв.}}$   $\text{XF}_{\text{акс.}}$  (87,9, 88,9 и 89,8° в I—III соотв.) вклад  $p_\pi—d_\pi$ -взаимодействия в III должен быть наибольшим. Относительно вклада  $\pi$ -компоненты в связи  $\text{X—F}$  эксперим. оценки отсутствуют.

А. Е. Калинин

1978

SF<sub>5</sub>O -

SF<sub>5</sub>Br

SF<sub>5</sub>Cl

SeF<sub>5</sub>Cl

TeF<sub>5</sub>Cl

(curr. recd.)

☒

(+3)

89: 137755g Urey-Bradley force constants of some pentafluoride compounds of Group VIA elements. So, S. P.; Li, K. K.; Hung, L. K. (Dep. Chem., Chin. Univ. Hong Kong, Shatin, Hong Kong). *Bull. Soc. Chim. Belg.* 1978, 81(6), 411-14 (Eng). The Urey-Bradley force consts. of SF<sub>5</sub>O-, SF<sub>5</sub>Br, SF<sub>5</sub>Cl, SeF<sub>5</sub>Cl, and TeF<sub>5</sub>Cl were detd. by least-squares-fit method using published fundamental frequencies. Results appear to suggest that some of the reported assignments are questionable.

C.A., 1978, 89, N16

$\text{SO}_2\text{-F}^-$ ,  $\text{SO}_2\text{-Cl}^-$  (Do) 1978  
 $\text{SO}_2\text{F}$ ,  $\text{SO}_2\text{Cl}$  (Ae) XII-1955

Sullivan S.A., Beauchamp J.L.  
Int. J. mass Spectrom. and Ion Phys.,  
1978, 28, n1, 69-80 (anew.)

Positive and negative ion  
chemistry of sulfonyl halides.

pne Py., 1979, 18 226

LO, M

$S_2O_6F_2 =$  OMNICK 6103 1978  
XIII - 4074  
 $= 2 SO_3F$  Warren C. H.

Chem. Phys. Lett.,

1978, 53 (3) 509-14

Resonance spectrum and  
production of  the ...

$\text{SO}_3\text{F}(\text{Vi}, \text{zeom. crop})$

1979

Warren C.H., XII-2013

Chem. Phys., Lett., 1979, 68, 22-3, 404-  
411 (ann.)

Laser fluorescence spectrum of the  
fluorosulfate radical. 514.5 nm  
excitation.

RuXue, 1980, 35158

40

Ⓢ

SO<sub>3</sub>F (an), vi)

1980

Warren C.H.,

XII-2041

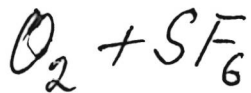
Chem. Phys. Lett., 1980, 72, v2,  
233-236 (aur)

Dye laser excitation of the fluoro-  
sulfate radical. Totally symmet-  
ric upper state fundamentals

Pr 92, 1980, 122697

10

(9)



1981

Brodbeck C., et al.

UK-nepe-  
xogbi.

Can. J. Phys., 1981, 59,  
N10, 1434-1438.

●  
(cur.  $N_2 + SF_6$  ; III)

SOF<sub>4</sub>

1981

Eusel Hans H.

Bull. Soc. chim. France,

vi,

1982, part. 1, N 9-10: Conf.

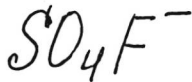
empyxiu. et commun. présentées

Spectrom. vibz., Châtenay-  
Malabry, 27-28 avr., 1981, 318.

- 324.

(see SF<sub>4</sub> ; iii)





1982

97: 14201f Infrared and Raman spectra of the fluoroxysulfate ion,  $\text{SO}_4\text{F}^-$ , and of fluorine perchlorate,  $\text{ClO}_4\text{F}$ . Appelman, Evan H.; Basile, Louis J.; Kim, Hyunyoung (Chem. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *Inorg. Chem.* 1982, 21(7), 2801-4 (Eng). The IR and Raman spectra of solid cesium and rubidium fluoroxysulfates,  $\text{CsSO}_4\text{F}$  and  $\text{RbSO}_4\text{F}$ , were measured, along with the gas-phase spectra of the

isoelectronic mol. fluorine perchlorate,  $\text{ClO}_4\text{F}$ . The spectra are consistent with a perchloric acid type structure of  $C_s$  symmetry, and the vibrational bands were assigned with ref. to the analogous species of  $C_{3v}$  symmetry: the fluorosulfate ion,  $\text{SO}_3\text{F}^-$ , and perchloryl fluoride,  $\text{ClO}_3\text{F}$ . Normal-coordinate analyses were carried out for both  $\text{ClO}_4\text{F}$  and  $\text{SO}_4\text{F}^-$ .

(Di)



C.A. 1982, 97, N2.

$\text{SOF}_4$

1982

Medberg Lise.

анн. новиз., J. Phys. Chem., 1982,  
vi. 86, NS, 593 - 598.

● (ссыл.  $\text{PF}_5$ ; III)

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

1983

14 Б87.  $\text{SO}_2 \cdots \text{HF}$ . Неэмпирическое исследование.  $\text{SO}_2 \cdots \text{HF}$ . An ab initio study. Friedlander Marvin E., Howell James M., Sapse Anne-Marie. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 1, 100—103 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием миним. базисного набора (БН) ОСТ-3 ГФ и расширенного БН 4—31 ГФ, дополненного поляризац.  $d$ -АО на атоме серы, выполнены расчеты электронного и геометр. строения комплекса  $\text{SO}_2 \cdots \text{HF}$  (I). Длина связи S—O в молекуле  $\text{SO}_2$  (II) принята равной 1,432 А, OSO 119,5, а расстояние H—F в молекуле HF (III) 0,917 А. Оптимизировали только расстояние от II к III. Рассмотрены 20 конформаций комплекса I, к-рые по способу приближения III к II условно разделены на 4 категории: 1) атом H молекулы III — атом S молекулы II, 2) атом F — атом S, 3) атом F — атом O и 4) атом H — атом O. Приведены рассчитанные заселенности перекрытия для всех конфигу-

геометрия,  
структура

Х. 1983, 19, N 14.

раций I и сравнена энергетика всех комплексов. Наиболее стабильная конфигурация I (энергия взаимодействия  $-5,2$  ккал/моль относительно невзаимодействующих молекул) соответствует комплексу, в котором молекула III расположена по линии связи S—O на расстоянии  $1,8$  А. Кроме того выполнены расчеты электростатич. Пот вокруг молекулы II. . . . И. Н. Сенченя

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

1983

UK chemist  
&  
matriline

Garber, Kevin;  
Hult, Bruce S.

Inorg. Chem. 1983,  
22(18), 2509-13.

(see.  $\text{SO}_2\text{F}_3^-$ ; III).



1983

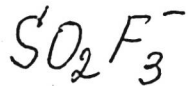
Garber, Kevin;  
Hult, Bruce S.

Inorg. Chem. 1983,  
22 (18), 2509-13.



(см.  $\text{SO}_2\text{F}^-$ ; III).

UK спектр  
в  
матрице



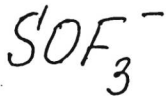
1983

Garber Kevin, Ault  
Bruce S.

И, водостр.,  
сепрукт.

Inorg. Chem., 1983,  
22, N 18, 2509-2513.

(all.  $\text{SO}_2\text{F}^-$ ; III)



1983

Garber Kevin, Ault  
Bruce S.Vibromетр,  
структураInorg. Chem., 1983,  
22, N 18, 2509-2513.(ср.  $\text{SO}_2\text{F}^-$ ; III)



SF50-

Ом. 18998

1984

Кляшкна А.П., Гусев П.А.  
и др.,

электрон.  
стрелки,  
природа  
свечи  
S-O.

эл. неорган. химии,  
1984, 29, N 5, 1142-1144.

$SiF_4^-$  (aq)

[Vm. 22413]

1985

Appelman E.H., Basile h. J.,  
Kim H., et al.,

crxmp

Spectrochim. Acta, 1985,  
A41, N 11, 1295-1300.

SO<sub>2</sub> - HF

1986

5 Л187. Определение геометрии гетеродимеров SO<sub>2</sub>...HF и SO<sub>2</sub>...HCl по вращательным спектрам. The geometries of the heterodimers SO<sub>2</sub>...HF and SO<sub>2</sub>...HCl as determined by rotational spectroscopy. Fillery-Travis A. J., Legon A. C. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 1—2, 4—8 (англ.)

С использованием МВ-фурье-спектрометра в сочетании с импульсной сверхзвуковой струей в диапазоне 8—18 ГГц исследованы МВ-спектры гетеродимеров. Идентифицированы линии 23 вращательных переходов с  $J \leq 6$  димера SO<sub>2</sub>—H<sup>35</sup>Cl и ряда переходов с  $J \leq 4$  димеров SO<sub>2</sub>—HF и SO<sub>2</sub>—DF в основном колебательном состоянии. В случае HCl—SO<sub>2</sub> идентифицирована также квадрупольная СТС линий. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных и постоянных квадрупольной связи ядра хлора. Показано, что комплексы SO<sub>2</sub>—HX образуются за счет Н-связи типа OSO...HX с расстоянием O...H=3,379 Å (Cl) и 2,818 Å (F) и углом SO...H=209,73° (Cl) и 215,06° (F).

М. Р. Алиев

М.П.

☒ (7)

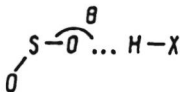
ср. 1986, 18, 45

SO<sub>2</sub> ... HF

1986

Р 10 Б1231. Геометрия гетеродимеров SO<sub>2</sub>...HF и SO<sub>2</sub>...HCl, определенная методом вращательной спектроскопии. The geometries of the heterodimers SO<sub>2</sub>...HF and SO<sub>2</sub>...HCl as determined by rotational spectroscopy. Fillery-Travis A. J., Legon A. C. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 123, № 1—2, 4—8 (англ.)

Методом МВ фурье-спектроскопии измерены вращат. спектры гетеродимеров SO<sub>2</sub>...HCl (I), SO<sub>2</sub>...HF



геометр.,  
структура,  
М.П.

(+)

(II), SO<sub>2</sub>...DF (III) с Н-связью, образующиеся в импульсной струе. Приведены значения вращат. постоянных A<sub>0</sub>, B<sub>0</sub>, C<sub>0</sub> (МГц), постоянных центробежного искажения Δ<sub>J</sub>, Δ<sub>JK</sub>, δ<sub>J</sub> (кГц). Определены постоянные ядерного (Cl) взаимодействия χ<sub>aa</sub> и χ<sub>bb</sub> равные, соотв. —48,37 и 21,861 МГц. Димеры имеют плоское строение. Межъядерные расстояния R[O...X (X=F, Cl)] и

Х. 1986, 19, N 10

углы  $\theta$  составляют: I 3,379 А и  $209,73^\circ$ ; II 2,818 А и  $215,78^\circ$ .  
В. М. Ковба

FOSO<sub>2</sub>F

1986

№ 16.Б1032. Электронное строение фторсульфатов фтора и хлора. Фокин А. В., Татаринов А. С., Поташников П. Ф., Фетисов В. И., Рапкин А. И., Студнев Ю. Н. «5 Всес. конф. по химии фторорган. соедин., 20—22 мая, 1986. Тез. докл.» М., 1986, 125.

С целью выяснения природы р-ционной способности фторсульфатов фтора (FOSO<sub>2</sub>F) и хлора (ClOSO<sub>2</sub>F) проведены расчеты этих молекул в приближении ППДП/2 в *sp*-базисе.

Из резюме

М.П.

(41) ☒  
X. 1987, 19, № 16

SO<sub>2</sub> ... HF

1987

структурн.  
параметр,  
электр. расч.  
и спектр

108: 45934x Pulsed-nozzle, Fourier-transform microwave spectroscopy of hydrogen-bonded dimers. Legon, A. C. (Dep. Chem., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QD). NATO ASI Ser., Ser. C. 1987, 212(Struct. Dyn. Weakly Bonded Mol. Complexes), 23-42 (Eng). A review with 38 refs. The technique of pulsed-nozzle, Fourier-transform microwave spectroscopy for observing the rotational spectra of hydrogen-bonded (and other weakly bound) dimers is discussed. The sensitivity of the technique for weakly bound species and its accompanying high resolu. are illustrated by ref. to examples. The mol. properties of dimers that can be detd. from rotational spectra via the spectroscopic consts. are outlined and, the detn. of geometry from rotational consts. is discussed by ref. to SO<sub>2</sub>...HF. The obsd. geometry for SO<sub>2</sub>...HF is then considered in the light of some simple rules for predicting the angular geometries of hydrogen-bonded dimers. Some recent results for (SO<sub>2</sub>, HCN) are presented, and the obsd. angular geometry is compared with the predictions of the Buckingham-Fowler electrostatic model for weakly bound dimers.

(H) ☒



SO<sub>2</sub> · HCN

C.A. 1988, 108, N 6

SO<sub>2</sub> ... HF

1988

Andrews Lester,  
Witrall Robert, et al.

UK comp  
8  
manipulate

J. Phys. Chem.  
1988, 92 (1), 78-81.

(see O<sub>3</sub> ... HF; 111)



F<sub>4</sub>SO

Reed A.E., von Rague  
Schleyer P. 1990

(copy) J. Amer. Chem. Soc. 1990,  
112, N4. C. 1434-1445.

(cell. ● F<sub>3</sub>SiF; III)

SF<sub>5</sub>OF

1991

115: 190230p A re-investigation of the gas-phase structure of pentafluorosulfur hypofluorite, SF<sub>5</sub>OF. Jaudas-Prezel, Eveline; Christen, Dines; Oberhammer, Heinz; Mallela, S. P.; Shreeve, Jean'ne M. (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Tuebingen, 7400 Tuebingen, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1991, 248(3-4), 415-19 (Eng). Gas-phase mol. structure was detd. of SF<sub>5</sub>OF by a joint anal. of electron diffraction and microwave spectra data. The exptl. studies were supplemented by ab initio calcns. The overall sym. of SF<sub>5</sub>OF is C<sub>s</sub> with the O-F bond staggering the equatorial F atoms. Six geometric parameters and nine vibrational amplitudes were refined simultaneously.

M.N.

C.A. 1991, 115, N18

F<sub>5</sub>SO-OSeF<sub>5</sub>

1991

114: 254262q Gas-phase structures of the bis(pentafluoro-chalcogen) peroxides F<sub>5</sub>MO-OMF<sub>5</sub> with M = sulfur, selenium, and tellurium. Zyika, Petra; Oberhammer, Heinz; Seppelt, Konrad (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Tuebingen, 7400 Tuebingen, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1991, 243(3-4), 411-18 (Eng). The gas-phase structures of the three bis(pentafluorochalcogen) peroxides F<sub>5</sub>MO-OMF<sub>5</sub> were detd. by electron diffraction. The O-O bond lengths (1.43(2) Å, 1.42(3) Å, and 1.45(4) Å for M = S, Se, and Te, resp.) are not well detd. (all geometric parameters are  $r_a$  values with 3 $\sigma$  estd. uncertainties). The mean values for M-F distances (S-F = 1.561(3) Å, Se-F = 1.685(3) Å, and Te-F = 1.822(4) Å) are equal to or very similar to those in the resp. MF<sub>6</sub> compds. The M-O bonds in the peroxides (S-O = 1.600(6) Å, Se-O = 1.783(10) Å, and Te-O = 1.911(21) Å) are longer by 0.07-0.08 Å than those in the corresponding oxides F<sub>5</sub>MOMF<sub>5</sub>. This lengthening is partly due to the much smaller oxygen bond angles (SCO = 110.3(11)°, SeOO = 110.7(13)°, and TeOO = 109.3 (16)°) compared with those of the oxides (MOM ca. 143°). The effective values for the dihedral angles  $\delta$ (MOOM) are nearly equal in the three peroxides, i.e. 129(2)°, 126(2)°, and 127(2)°, resp.

структура  
(микронная)

(42) 27

C.A. 1991, 114, N 26

F<sub>5</sub>SeO-OSeF<sub>5</sub>  
F<sub>5</sub>TeO-OTeF<sub>5</sub>

$S_2O_5F_2$

1993

7118: 262985a Vibrational spectra and normal coordinate analysis of disulfuryl difluoride  $S_2O_5F_2$  and diselenonyl difluoride  $Se_2O_5F_2$ . Touzin, Jiri; Cernik, Milos (Dep. Inorg. Chem., Masaryk Univ., 611 37 Brno, Czech.). Collect. Czech. Chem. Commun. 1993, 68(3), 517-29 (Eng). Raman spectra ( $1600-100\text{ cm}^{-1}$ ) of liq.  $S_2O_5F_2$  and  $Se_2O_5F_2$  and IR spectra ( $1600-400\text{ cm}^{-1}$ ) of liq. and gaseous  $S_2O_5F_2$  were measured. A modified general valence force field was used for their interpretation by normal coordinate anal. Refinement of the no. of lines in the Raman spectrum of  $S_2O_5F_2$  by means of numerical sepn. of the overlapping bands led to the conclusion that liq.  $S_2O_5F_2$  consists of at least three rotamers at room temp.

(CKP, Vi)

(7)  $Se_2O_5F_2$

C. A. 1993, 118, N 26

$\text{Se}_2\text{O}_5\text{F}_2$

1993

20 Б1365. Колебательные спектры и расчет частот нормальных колебаний дифторида дисульфурила  $\text{S}_2\text{O}_5\text{F}_2$  и дифторида диселеноила  $\text{Se}_2\text{O}_5\text{F}_2$ . Vibrational spectra and normal coordinate analysis of disulfuryl difluoride  $\text{S}_2\text{O}_5\text{F}_2$  and diselenonyl difluoride  $\text{Se}_2\text{O}_5\text{F}_2$  /Toužín J., Černík J. M. //Collect. Czechosl. Chem. Commun. —1993. —58, № 3. —С. 517—529. —Англ.

Получены спектры КР (1600—100  $\text{cm}^{-1}$ ) жидк.  $\text{S}_2\text{O}_5\text{F}_2$  (I) и  $\text{Se}_2\text{O}_5\text{F}_2$  (II) и ИК-спектры (1600—400  $\text{cm}^{-1}$ ) в жидк. и газ. состояниях. Проведен расчет нормальных колебаний I и II в приближении модифицированного обобщенного валентно-силового поля. Предложено отнесение колебаний I и II. Анализ спектров КР I и математич. разделение контуров линий позволяют заключить, что I в жидк. состоянии представляет смесь по крайней мере трех конформеров. Б. В. Локшин

М.П.

Д

(4)

Х. 1993, № 20

$\text{SF}_3^+$

1994

Stricklett K. L.,

Kassoff J. M., et al.

Gaseous Dielectr. VII, [Proc.

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

(cur.  $\text{SF}_5^+$  ; III)

$\text{SO}_2\text{F}^+$

1994

Stricklett K. L.,  
Kassoff J. M., et al.  
(A.P.) Gaseous Dielectr. VII,  
[Proc. Int. Symp.] 7th  
1994, 257-64.

(  $\text{SF}_5^+$ ; III)

FOSO<sub>2</sub>F

1995

122: 223432f Vibrational spectra and gas phase structures of fluorine fluorosulfate (FOSO<sub>2</sub>F) and chlorine fluorosulfate (ClOSO<sub>2</sub>F). Aubke, Friedhelm; Casper, Bernd; Mueller, Holger S. P.; Oberhammer, Heinz; Willner, Helge (Department of Chemistry, University of British Columbia, Vancouver, Can.). *J. Mol. Struct.* 1995, 346, 111-20 (Eng). IR spectra in the gaseous state, and in the matrix and Raman spectra in the solid state, were recorded for the halogen fluorosulfates XOSO<sub>2</sub>F, X = F, Cl. The absence of frequency splittings in the matrix spectra demonstrates the presence of one single conformer for both compds. The assignments of the fundamental vibrations are supported by normal coordinate analyses based on frequencies and isotopic shifts. The mol. structures of both compds. were detd. by gas electron diffraction (GED) and ab initio calcns. (HF/3-21G\* and HF/6-31G\*). According to the GED anal. and in agreement with the ab initio calcns. gauche conformers with dihedral angles  $\tau$  (FSOX)  $\approx 70^\circ$  are preferred in both fluorosulfates. The calcns. predict the trans forms,  $\tau$ (FSOX)  $\approx 180^\circ$ , to be higher in energy by about 10 kJ mol<sup>-1</sup> for X = F and by about 8 kJ mol<sup>-1</sup> for X = Cl.

UK & ray.  
page(H) ☒C.A. 1995, 122, N18ClOSO<sub>2</sub>F



F302

1997

Li, Zhuangjie

смп-ра,  
Di оск. J. Phys. Chem. A 1997,  
и химн.  
вожум. 101 (49), 9545-9550.  
(оск.,  
мед.  
рацем

(all

F30; III)

S<sub>2</sub> O<sub>6</sub> F<sub>2</sub> (Am. 40 973)

2001

Монекун.  
СМР-РА

Kolbjørn Hagen,  
Kenneth Hedberg<sup>†</sup>  
et al.,

y. Mol. Struct., 2001,

567-568, 1-10.

Molecular structure

and conformation of peroxy-  
disulfonyl difluoride,  
 $S_2O_6F_2$ , as determined  
by gas-phase electron  
diffraction and ab  
initio molecular orbital  
calculations.