

GF

SF(2)

~~1966~~.

(термод. ф.)

86-II-ТКВ

Юнгман В.С.

Термодинамические функции ($C_p, S, H-H$)

SF 1Г1, 2 с.

SF (2)
(20)

~~7566~~

86-II-ТХВ

Медведев В.А.

Энергия диссоциации

SF /Г/, 2 с.

SF, SF₂, SF₃, SF₄, SF₅, SF₆ (термодинам. св-ва)

Wilkins R. L.

XII 219

J. Chem. Phys., 1969, 51, N2, 854-853 (англ.)
 Thermodynamics of SF₆ and its
 decomposition and oxidation products

10

P14 Kern, 1970

451052



10 (9p)

1770
paper J. Ae, D (SF, SeF⁺, SF⁺, SeF⁺,
SF⁻, SeF⁻) 12 XII 400

O'Hare P.A.G., Wahl A.C.,
J. Chem. Phys., 1970, 53, 47, 2834-2846
(corr)
Hartree-Fock wavefunctions and computed
properties for the ground (211) states
of SF and SeF and their positive and negative
ions. A comparison of the theoretical
results with experiment. 609 653
B. Qu, 1971, 3D 118  10 

$X_1 - 831$ (1971)
 $S F_0; S F_5; S F_4; S F_3; S F_2; S_2 F_2; S F_1; S_2; S_3;$
 $S_2; F_2; S; F; F^-; S^+; F^+; S^{2+}; F^{2+}; S^{3+};$
 $F^{3+}; S^{4+}; F^{4+}; S^{5+}; F^{5+};$ (перевод. гр.-ин)
 Frost H.S.; Lieberman R.W.;

Proc. Y.E.E.E.; 1971; 59 (4), 474-85

CA, 1971, 75 (2) 11883 p

10 (10)

SF; SF₂; SCF₂; SF₄ ($\Delta H_f^\circ 2.98$) XII 1158 1973

SF; SF₂; SCF₂ (I)

SF (D₂)

Hildenbrand D.L.,

J. Phys. Chem., 1973, 77, 117, 897-902 (anal.)

Mass spectrometric studies of some
gaseous sulfur fluorides.

4

M, 10 (P)

Q

Ch, 1973, 78, 1122, 1410 5 1/2

SF +

1977

Rosenstock W. M. et al

T.G.
CBBA

J. Phys. Chem. Ref. Data,
1977, 6. Suppl. v1, p 1-423

SF(2)

Om. 21314

1982

McC Miller D.F., Golden D.M.,

$\Delta_f H;$

Ann. Rev. Phys. Chem. 1982,
33: 493-532.

Om 38293
38293

1995

F: SF

P: 1

8Б329. Сочетание теории с экспериментом: оценка термохимии SF[n], SF[n]{+}, SF[n]{-} (n=1-6). Combining theory with experiment: Assessment of the thermochemistry of SF[n], SF[n]{+}, and SF[n]{-}, n=1-6 / Cheung Y.-S., Chen Y.-J., Ng C. Y., Chiu See-Wing, Li Wai-Kee // J. Amer. Chem. Soc. - 1995. - 117, N 38. - С. 9725-9733. - Англ.

Место хранения ГПТБ

Вычисление термохим. св-в SF[n], SF[n]{+} и SF[n]{-} (n=1-6) проведено ab initio с использованием процедуры ГФ-2 или ГФ-2(MP2) описанной Куртисом. Теор. расчеты выполнены методом возмущений с базисом 6-31 G(d). Констатировано хорошее согласие вычисленных и эксперим. данных по 'ДЕЛЬТА'[f]H и энергиям связей в молекулах и ионах. Рекомендованы по 'ДЕЛЬТА'[f][0]°, ккал/моль SF 2,9+-'1,4;

х. 1996, N 8.

$SF\{+\}$ 240,9'±'1,2; $SF\{-}$ -43'±'13; $SF[2]$ -69,4'±'2,6; $SF[2]\{+\}$ 163,2'±'2,6; $SF[3]$ -103'±'5; $SF[3]\{+\}$ 85,6'±'5,0; $SF[3]\{-}$ -174,5'±'6,8; $SF[4]$ -181'±'5; $SF[4]\{+\}$ 93'±'5; $SF[4]\{+\}$ 93'±'5; $SF[4]\{-}$ -215,6'±'6,8; $SF[5]$ -205,9'±'3,4; $SF[5]\{+\}$ 15,5'±'3,6; $SF[5]\{-}$ -291'±'5,7; $SF[6]$ -284,4'±'0,2; $SF[6]\{-}$ -314,5'±'2,4. Для $SF[2]\{-}$ рекомендована расчетная величина -102,4 ккал/моль, эксперим. данные отсутствуют. $SF[6]\{+\}$ неустойчив по отношению к низшим $SF[n]\{+\}$. Проведены теор. расчеты структур ионов с использованием теории электронных пар и учетом сил отталкивания (VSEPR). Библ. 60.. DHf.



SF

1995

F: SF

P: 1

06.Д.0195. Структура и термохимия фторидов серы $SF[n]$ ($n=1-5$) и их ионов $SF[n]\{+\}$ ($n=1-5$). Structure and thermochemistry of sulfur fluorides $SF[n]$ ($n=1-5$) and their ions $SF[n]\{+\}$ ($n=1-5$) / Irikura Karl K. // J. Chem. Phys. - 1995. - 102, N 13. - С. 5357-5367. - Англ. эмпирическим методом Гауссиан-2 рассчитаны равновесная геометрия и термохимич. характеристики $SF[x]$ и $SF[x]\{+\}$, $x=1-5$. Энергии связей S F найдены равными $444' \pm 6$, $159' \pm 7$, $398' \pm 7$, $227' \pm 6$, $374' \pm 6$ и $345' \pm 6$ кДж/моль для нейтральных систем с $x=5-1$ и $371' \pm 6$, $56' \pm 6$, $400' \pm 6$, $372' \pm 6$ и $367' \pm 8$ для катионов, а адиабатич. энергии ионизации оценены в $9,71' \pm 0,16$; $11,90' \pm 0,16$; $8,36' \pm 0,18$; $10,15' \pm 0,19$ и $10,13' \pm 0,20$ эВ соответственно. Также приведены колебательные частоты и вертикальные энергии ионизации.

X. 1996, N 6

1996

17 Б313. Термохимия отрицательного иона: фториды серы SF_n/SF_n^- ($n=1-7$). Negative ion thermochemistry: The sulfur fluorides SF_n/SF_n^- ($n=1-7$) / King Rollin A., Galbraith John Morrison, Schaefer Henry F. (III) // J. Phys. Chem. — 1996. — 100, № 15. — С. 6061—6068. — Англ. . Место хранения ГПНТБ

С использованием методов функционала плотности предсказаны молек. структуры и полные энергии SF_n и SF_n^- ($n=1-7$). Приведены три характерные меры сродства к электрону, а именно: адиабатич. сродство к электрону, вертикальное сродство к электрону и энергия вертикального отделения аниона. Также приведены энергии диссоциации первой связи S—F основного состояния SF_n и анионов SF_n^- . Проведено сравнение с экспериментально определенными значениями энергии диссоциации. Сделан вывод, что методы функционала плотности весьма полезны в установлении общих тенденций, но, как правило, не дают надежных количеств. результатов. Однако необходимы дополнит. эксперименты для точного установления надежности различных методов функционала плотности. Библ. 36. В. Ф. Байбүз

термохим.

46

SF_2, SF_3, SF_4, SF_5
 SF_6, SF_7

X. 1996, N 17

SF

1996

Su Keh, Deakye C.A.,
et al.

ΔfH Yuanzi Yu Fenzi Wuli

(расхожден.
расчитан.
и жетерим.)

Хуево 1996, 13 (4),

522 - 525.



(ссл. O_2^+ ; $\bar{I}$)

SF +

1997

Su, Dehe; et al.,

Yuanzi Yu Fenzi Nuli
Xuebao 1997, 14 (1), 136-
140.

(S+K98)

(see PCL; I)

F: SF{-}[n] (n=1-6)

P: 1

1998

21Б322. Точные теплоты образования для SF[n], SF{+}[n] и SF{-}[n] для n=1-6. Accurate heats of formation for SF[n], SF{+}[n], and SF{-}[n] for n=1-6 / Bauschlicher Charles W. (Jr), Ricca Alessandra // J. Phys. Chem. A [бывш. J. Phys. Chem.]. - 1998. - 102, 24. - С. 4722-4727. Англ.

Место хранения ГПНТБ России С использованием различных неэмпирич. методов рассчитаны точные значения энергий связи и теплот образования для SF[n], SF{+}[n] и SF{-}[n] для n=1-6. Молекул. структуры и частоты колебаний определены с использованием методов B3LYP и функционала плотности. Т-рные зависимости теплот образования, теплоемкостей и энтропий с использованием приближения жесткий ротатор-гармонич. осциллятор рассчитаны в интервале т-р 300-4000 К и результаты расчетов представлены с помощью полиномиальных уравнений. Библ. 45. —

F: SF{+}[n] (n=1-6)

P: 1

21Б322. Точные теплоты образования для SF[n], SF{+}[n] и SF{-}[n] для n=1-6. Accurate heats of formation for SF[n], SF{+}[n], and SF{-}[n] for n=1-6 / Bauschlicher Charles W. (Jr), Ricca Alessandra // J. Phys. Chem. A [БЫВШ. J. Phys. Chem.]. - 1998. - 102, 24. - С. 4722-4727. Англ.

Место хранения ГПНТБ России С использованием различных неэмпирич. методов рассчитаны точные значения энергий связи и теплот образования для SF[n], SF{+}[n] и SF{-}[n] для n=1-6. Молекул. структуры и частоты колебаний определены с использованием методов V3LYP и функционала плотности. Т-рные зависимости теплот образования, теплоемкостей и энтропий с использованием приближения жесткий ротатор-гармонич. осциллятор рассчитаны в интервале т-р 300-4000 К и результаты расчетов представлены с помощью полиномиальных уравнений. Библи.

45.

1998