

C-5

8-отанин.
Соединения

Суннер.

Sunner S.

Acta chem. scand., 1955, 9, № 5,
834-846.

Термодинамические иссле-
дования органических ве-
ществ, содержащих серу IV.
О термодинамических энер-
гиях связи серы.

1955

ж-56-3-6104.

Ерофеев об. В.

1958

8-орз

Глушкова С. Ф.

Сб. научн. работ. Ин-т
химии АН БССР, 1958,
вып. 6, 83-91

Термодинамика неко-
торых реакций сероорга-
нических соединений

X-59-2-3822

Тюльенберг

1959.

8-оправка

Gilldenberg Lawrence.

Microchem. J., 1959, 3, 12,
167-171.

Ботаника определение се-
рв в органических соеди-
нениях.

X-60-5-17568.

Термодинамика
 соединений
 C, H, S, O
 VI
 серия

11960

I. A system of molecular thermochemistry for organic gases and liquids. II. Extension to compounds containing sulfur and oxygen. Edward G. Lovering and Keith J. Laidler (Univ. Ottawa). *Can. J. Chem.* 38, 2367-72 (1960); cf. *CA* 50, 10508c.—At 25° the heat of atomization, Q_a , is obtained through the equation $Q_a = Q_f + 171.7n_c + 52.09n_H + 57n_s + 59.16n_o$, where Q_f is the heat (evolved) of formation of the gaseous compd. and n_c , n_H , n_s , and n_o are the nos. of C, H, S, and O atoms, resp. Also $Q_a = -Q_c + 265.75n_c + 86.25n_H + 57n_s + 59.16n_o$, where Q_c is the heat (evolved) of combustion, the products being CO_2 , $H_2O(l)$, and S(rhombic). To calc. Q_a it is assumed that the paraffin bond strengths given in part I are the same except in the case of C-H bonds when there is a S atom bound to the C: C-C, 85.40; C-H(primary), 98.47; C-H(secondary), 97.65; C-H(tertiary), 96.80; S-H, 81.90; S-C, 66.36; S-S, 54.46; for the C bound to the S, C-H(primary), 98.14; C-H(secondary), 97.63; C-H(tertiary), 97.14 kcal./mole. For 16 S compds., $Q_a(obs.) - Q_a(calcd.)$ ranged from -0.3 to +0.5 kcal./mole. For the calcn. of heat of vaporization of S compds., the following bond contributions were used; S-H, 2.209; S-C, 0.735; S-S,

2.A.1961, 55, 15
 14043abcd

сер. H/OB.

2.349; C-H(primary), 0.877; C-H(secondary), 1.002; C-H(tertiary), 1.117; when there is no S bound to C, C-H(primary), 0.494; C-H(secondary), 0.579; C-H(tertiary), 0.518 kcal./mole. $\Delta H_f(\text{obs.}) - \Delta H_f(\text{calcd.})$ ranged from -0.13 to $+0.13$. The calcn. of Q_a for O-contg. compds. was made by use of the following bond energies: O-H, 109.79; O-C, 90.99; O-O, 47.72; C-H(primary), 96.24; C-H(secondary), 95.42; C-H(tertiary), 94.54; and the paraffin bond energies given above. For 9 O-contg. compds. $Q_a(\text{obs.}) - Q_a(\text{calcd.})$ ranged from -1.1 to 0.9 kcal./mole. The greater success with S compds. is probably due to the greater accuracy of the exptl. data. Bond contributions to the heats of formation and combustion of S- and O-contg. liquids and gases are also given.

Martin Allen

8-
-органич.
соединен.
?
+1
х. 1962.3

3Б391. Тетраметилтиурамсульфид и тетраметилтиурамдисульфид: теплоты образования, определенные калориметрически с помощью вращающейся бомбы; термохимическая энергия связи S—S. Good W. D., Lacina J. L., McCullough J. P. Tetramethylthiuram monosulfide and tetramethylthiuram disulfide: heats of formation by rotating-bomb calorimetry; the S—S thermochemical bond energy. «J. Phys. Chem.», 1961, 65, № 5, 860—862 (англ.).—Определены ΔH^0 (ккал/моль) сгорания твердых тетраметилтиурамсульфида (I) ($1416,30 \pm 0,24$) и тетраметилтиурамдисульфида (II) ($1558,15 \pm 0,34$), конечное состояние: CO_2 (газ), N_2 (газ) и $\text{H}_2\text{SO}_4 \cdot 35\text{H}_2\text{O}$ (р-р). Из полученных данных вычислены ΔH^0 (ккал/моль) образования из элементов твердых I $11,44 \pm 0,30$ и II $9,74 \pm 0,41$. Величина энергии связи S—S в II та же, что и в сульфидах n-алканов и в S_8 (газ). Б. Тимофеев

1963

8-органка

3 Б382. Термохимия серусодержащих молекул и радикалов. Теплоты сгорания и теплоты образования. Mackle H., O'Hare P. A. G. The thermochemistry of sulphur-containing molecules and radicals-1. Heats of combustion and formation. «Tetrahedron», 1963, 19, № 6, 961—971 (англ.)

На основании литературных данных вычислены и табулированы значения теплот сгорания, теплот образования в стандартном состоянии и теплот образования в газообразном состоянии при $298,15^\circ \text{K}$ 102 органич. соединений серы, в том числе и ряда азотсодержащих соединений серы. Приведенные значения термодинамически согласованы между собой, причем табулированы значения термохим. величин, обеспечивающих эту согласованность. Для теплот образования SO , H_2S_2 , CS и S в газообразном состоянии при $298,15^\circ \text{K}$ приняты значения, равные соответственно $0,5 \pm 0,5$ ккал/моль, $3,9$ ккал/моль, 55 ± 15 ккал/моль и $65,9 \pm 0,8$ ккал/г-атом.

В. Байбуз

X. 1964.3

(См. также SO_2) I

8-оранжевая

1963

18 Б364. Термохимия серусодержащих молекул и радикалов. II. Энергии диссоциации связей, включающих серу, теплоты образования серусодержащих радикалов. Mackle H. The thermochemistry of sulphurcontaining molecules and radicals. II. The dissociation energies of bonds involving sulphur: the heats of formation of sulphurcontaining radicals. «Tetrahedron», 1963, 19, № 7, 1159—1170 (англ.)

На основании литературных данных, полученных изучением скорости пиролиза и методом электронного удара меркаптанов, сульфидов и сульфонов, вычислены и tabулированы величины энергии диссоциации различных связей, включающих серу: $R-SH$, $R-SCH_3$, $R-SC_2H_5$, $R-SC_6H_5$, $R-SO_2CH_3$, $R-S$, $R-SO_2$, R_1R_2-SO , $C=S$, $S-S$, где R — радикалы: CH_3 , C_2H_5 , $n-C_3H_7$, $изо-C_3H_7$, $n-C_4H_9$, $трет-C_4H_9$, C_6H_5 , $CH_2=CH-CH_2$, $C_6H_5CH_2$, CH_2CO . Используя данные по теплотам образования, приведенные ранее (сообщение I, РЖХим, 1964, 3Б382), авторы вычислили средние величины энтальпий образования в газообразной фазе (ккал/моль) наиболее важных серусодержащих радикалов: $\Delta H(обр.) (SH) = 34,6 \pm 4$, $\Delta H(обр.) (SCH_3) = 30,5 \pm 5$, $\Delta H(обр.) (SC_2H_5) = 25,5 \pm 3$, $\Delta H(обр.) (C_6H_5) = 51$, $\Delta H(обр.) (SO_2CH_3) = -60$ ккал/моль.

Т. Алексеева

ж. 1964. 18

1963

З Б393.

Исправленные значения теплот сгорания и теплот образования ряда органических соединений серы. Supper S. Corrected heat of combustion and formation values for a number of organic sulphur compounds. «Acta chem. scand.», 1963, 17, № 3, 728—730 (англ.)

Результаты измерений теплот сгорания органич. соединений серы методом вращающейся бомбы, проведенные в Термохимической лаборатории университета в Лунде (Швеция) и в Термодинамической лаборатории Бартлесвилл (США) в течение 1949—55 гг. пересчитаны с использованием новейших термохим. данных и таблицы ат. весов 1961 г. Табулированы значения теплот сгорания и теплот образования в стандартном состоянии при 25° 17 органич. соединений серы. При пересчете использовалось значение теплоты сгорания серы до серной к-ты, равное при 25° — $142,995 \pm 0,045$ ккал/моль, что соответствует $\Delta H_{f298}(\text{H}_2\text{SO}_4 \cdot 115\text{H}_2\text{O})$ (жидк.) = $-212,205$ ккал/моль. Эксперим. данные, полученные в двух указанных выше лабораториях для 7 органич. соединений серы, хорошо согласуются между собой, что свидетельствует об отсутствии систематич. ошибок.

В. Байбуз

8-органич.

 ΔH_f

Х. 1964. 3

1964

C-S-
соединения

(обзор)

8 Б540. Термохимия серусодержащих молекул и радикалов. III. Термодинамические свойства сероорганических соединений и термодинамика некоторых их реакций. Mackle H., O'Hare P. A. G. The thermochemistry of sulphur-containing molecules and radicals. III. The thermodynamic properties of organo-sulphur compounds and the thermodynamics of some of their reactions. «Tetrahedron», 1964, 20, № 3, 611—622 (англ.)

Обзор литературы по термодинамич. свойствам (теплоемкость, теплота плавления, давление пара, теплоты сублимации и испарения, энтропия, $(g^0 - H_0^0)$ или $(g^0 - H_0^0)/T$ и $(H^0 - H_0^0)$ или $(H^0 - H_0^0/T)$) содержащих серу органич. и некоторых неорганич. соединений (всего 50 соединений). Приведены имеющиеся в литературе данные по термодинамике р-ций окисления тиоалканов, окисления тиолов в газовой фазе, реакций свободных радикалов (включающие CO_2 в газовой фазе) некоторых равновесных превращений содержащих серу органич. соединений, барьеры внутреннего вращения молекул по связям (C—S, C—N, S—S, C—C). Сообщение II см. РЖХим, 1964, 18Б364. Т. Алексеева

X. 1965. 8

Elpropanur.
coegunent
reunent

1964

The thermochemistry of sulfur-containing molecules and radicals. III. The thermodynamic properties of organosulfur compounds and the thermodynamics of some of their reactions. H. Mackle and P. A. G. O'Hare (Queen's Univ., Belfast, Ire.). Tetrahedron 20(3), 611-22(1964); cf. CA 59, 10817e. The literature on the general thermodynamic properties of organo-S compds., including thiols, thia alkanes, thia cycloalkanes, and thiophenes, and of some of their reactions was surveyed. 96 references.

Jett C. Arthur, Jr.

C. A. 1964 60 N12 13935e

C-5

cb256

BQ-12054-IV

1964

Price C.C.

Chem. & Eng. News 1964, 42 N/48

58-63

C-2 - Coediment
5 - apr. colg

1966

ΔH_c

32446d Combustion calorimetry of sulfur-containing organic compounds. Ralph Harold Marking (Univ. of Minnesota, Minneapolis). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-9053, 56 pp.; *Diss. Abstr. B* 27(3), 740(1966)(Eng). SNDC

C.A. 1967. 66. 8

CS_3^{2-}

1968

15 Б124. Спектрофотометрическое исследование реакции между пертиокарбонатом и сульфидом натрия в щелочной среде. Кремер В. А., Затучная Л. А. В сб. «Материалы 8-й Научно-техн. конференции, 1967. Укр. заочн. политехн. ин-т». Харьков, Харьковск. ун-т, 1968, 99—104

Исследованы электронные спектры (300—420 мμ) р-ров тритиокарбоната Na_2CS_3 , пертиокарбоната Na_2CS_4 , полисульфидов, а также смесей Na_2CS_4 и Na_2S . Установлено, что в этой смеси протекает равновесный процесс (равновесие достигается за 2,5 часа). Стехиометрич. коэф. равновесия определен графич. методом из спектральных данных: $2CS_4^{2-} + S^{2-} \rightleftharpoons 2CS_3^{2-} + S_3^{2-}$. При 25° константа равновесия этой р-ции равна $(2,10 \pm 0,42) 10^{-3}$.
Ю. В. К.

Kp

л. 1969. 15

Соединения
серы (органические)

C-5

1969

м.
сб

10381n Physical properties of sulfur compounds. Literature review 1956-1960. Helm, Richard V. (Pet. Res. Cent., Bur. Mines, Laramie, Wyo.). *U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech. Inform.*, PB Rep. 1969, No. 193344, 143 pp. (Eng). Avail. CFSTI. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rep.* 1970, 70(19), 67-8. The tables of phys. properties of S compds., that have been found in petroleum, namely the thiols (mercaptans), sulfides (thioethers), disulfides, and thiophenes are given. The tables include all of these compds. from C_1 through C_n except those compds. that have atoms other than C, H, and S. The properties tabulated are b.p., d., n , and f.p. At the end of the table of properties for each compd., refs. are given for such properties as viscosity, vapor pressure, surface tension, and thermodynamic functions.

C.A. 1971.752

$(C_2H_5)_2P(S)SeTeSeP(S)(C_2H_5)_2$

1969

75257p Crystal structure of tellurium bis(diethylthionoselenophosphinate). Husebye, Steinar (Univ. Bergen, Bergen, Norway). *Acta Chem. Scand.* 1969, 23(4), 1389-97 (Eng). The crystal structure of Te bis(diethylthionoselenophosphinate) has been detd. and refined by 3-dimensional x-ray methods. The structure consists of $Et_2P(S)SeTeSeP(S)Et_2$ mols. The mols. have twofold symmetry with the Te atoms on twofold symmetry axes. One of the most interesting results of the anal. is the value found for the $Te-Se$ bond length, 2.50 Å. Other bond lengths and angles are: $Se-P$ 2.26 Å., $P=S$ 1.93 Å., $\angle Se-Te-Se'$ 100.7° , $\angle Te-Se-P$ 104.7° , and $\angle Se-P-S$ 103.8° . The dihedral angle $Se'TeSe/TeSeP$ is 93.1° . There are weak intermol. $Te...S$ bonds of length 3.65 Å. joining the mols. together in a 2-dimensional network. Each Te atom participates in 2 such bonds at a $S...Te...S$ angle of 78.1° . These 2 bonds are roughly trans to the 2 $Te-Se$ bonds of the mol. and a weak tendency to a sq.-planar coordination around the Te atom is thus found.

RCMW

Суперинформ.
направлен

C.A. 1969. H.16

C-S-соед.

1969

8БТ78. Рентгено-спектральное изучение химической связи серы. II. Число валентных электронов у атома серы в органических соединениях. Takahashi Yoshihito, Yabe Katsumasa, Sato Toshio. An X-ray emission spectroscopic investigation of the chemical bond of sulfur. II. The number of valence electrons of the sulfur atom in organic compounds. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1969, 42, № 9, 2707—2708 (англ.)

Рассчитано число валентных электронов N атома серы в 50 соединениях на основе теоретич. ф-лы, связывающей N и величину сдвига K α -дублета в соединении по сравнению с его положением в ромбич. сере. Для большинства соединений эксперим. величины сдвига получены впервые. Величина N в зависимости от типа связи изменяется в пределах от 6,5 до 4,1. Проведено обсуждение структурной формулы метиленовой сини. Ч. I см. РЖХим, 1967, 20Б130. В. И. Нефедов

X. 1970. 8

1969

C-S-соед.

9 Б902. Исследования по термохимии сульфонов. Часть 12. Термохимия сульфонов бутадиена и изопрена. Mackle H., McNally D. V. Studies in the thermochemistry of sulphones. Part 12. Thermochemistry of the butadiene and isoprene sulphones. «Trans. Faraday Soc.», 1969, 65, № 7, 1738—1741 (англ.)

Калориметрически определены теплоты сгорания, плавления, парообразования и теплоты образования в состоянии идеального газа сульфона α -бутадиена, сульфонов α - и β -изопрена. Показано, что α -изомеры относительно стабильнее β -изомеров. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1965, 1Б375. Резюме

 ΔH сгоран. ΔH т ΔH парообраз.

У. 1970. 9

1970

49218v Chemical-thermodynamic properties of hydrocarbons and related substances. II. Properties of 25 organic sulfur compounds in the ideal gas state from 0° to 1000°K. El-Sabban, M. Zaki; Scott, Donald William (Bartlesville Petrol. Res. Center, Bur. of Mines, Bartlesville, Okla.). U.S., Bur. Mines. Bull. 1970, No. 654, 26 pp. (Eng). Avail. GPO. 35¢. Tables (25) list calcd. values for 8 alkanethiols, 3 cycloalkanethiols and arylthiols, 6 thiaalkanes, 2 dithiaalkanes, 3 thiacyclohexanes, and 3 thiophenes. Included are the Gibbs energy function ($G^\circ - H_0^\circ$)/ T ; enthalpy function ($H^\circ - H_0^\circ$); entropy, S° ; heat capacity C_p° ; std. enthalpy of formation, ΔH_f° ; std. Gibbs energy of formation, ΔG_f° ; and the common logarithm of the equil. const. of formation, $\log_{10} K_f$, all for the hypothetical gas state at 1 atm. The last 3 properties are for formation from C (c, graphite), $H_2(g)$, and $S_2(g)$. The values of ΔH_f° , ΔG_f° , and $\log_{10} K_f$ are based on the std. values of the std. enthalpy of formation at 298.15°K, $\Delta H_{f,298.15}$, detd. by rotating-bomb combustion calorimetry.

C. W. Schuck

C-S

coeq.

mermoz.

cb - 68

C.D. 1970.73.10

C-S-соед

6 Б972. Газохроматографический метод определения энтальпии растворения из индексов удерживания. Голунова Р. В., Arsenyev Yu. N. Gas chromatographic method for determination of enthalpy of solution from retention indices. «Chromatographia», 1970, № 10, 455—461 (англ.; рез. нем., франц.)

1974

Предложено ур-ние для определения величин парц. мол. энтальпий р-рения в-в из их индексов удерживания. Величины энтальпии р-рения бензола, циклогексана, диэтилсульфида, ди-н-пропилсульфида, диметилсульфида, диэтилдисульфида, н-пропилмеркаптана, н-бутилмеркаптана в Аппезоне-М и полиэтиленгликоле (мол. в. 1000) определены 2 методами: через уд. объемы удерживания и с помощью предложенного ур-ния. Исследована зависимость парц. мол. энтальпии р-рения и испарения н-углеводородов от числа углеродных атомов. Экспериментально показано, что разница для энтальпий испарения и энтальпий р-рения гомологов практически тождественна и составляет ~ 1 ккал/моль.

Резюме

ΔH_{aq}

X. 1974. 6

C-3-
соед.

1971

10.Б557 Деп. Расчет физико-химических свойств органических и элементоорганических соединений. VI. Вычисление постоянных в формуле (12) [2] для расчета энтальпий образования алифатических сульфидов, сульфоксидов и сульфонов. Степанов Н. Ф., Ерлыкина М. Е. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР): М., 1971, 23 с., библиогр. 16 назв. (№ 2527—71 Деп.)

расчет
энтальпий
соед.

Найдены численные значения постоянных в ф-лах для расчета энтальпий образования алифатич. сульфидов, сульфоксидов и сульфонов методом Гатевского. Использовано приближение, в к-ром классификация структурных элементов проводится по атомам с учетом 1-го окружения. Постоянные в ф-лах рассчитаны в 2 вариантах: а) непосредственным вычислением всех постоянных

х. 1971. 10

по имеющимся экспериментальным данным для рассматриваемого класса соединений; б) вычислением только тех постоянных, к-рые характерны для данного класса соединений, с использованием известных постоянных, определенных при расчете энтальпий образования алифатич. углеводов. Постоянные определялись методом наименьших квадратов. Сообщ. V см. РЖХим, 1970, 18Б569. Автореферат

Органит. соедин. Серы.

1973

118567z Correlation of the physical properties of organosulfur compounds. II. Effective electronegativity of the molecules and their physical properties. Arshad, M.; Beg, A.; Hashmi, M. A. (Pakistan Counc. Sci. Ind. Res. Lab., Karachi, Pak.). *Rev. Roum. Chim.* 1973, 18(6), 1033-40 (Eng). Mol. electronegativity which is the arithmetic mean of the electronegativities of the central atom and of the substituents, is related to macrophys. properties such as b.p., and refractivity. Correlation of the b.p., d., and refractivity with mol. electronegativity was useful in detg. the electronegativity of substituents on various organosulfur compds.

св-ба

C. A. 1973, 79 N 20

30713.8836

Ch

 $M(\text{MeOC}_2)_2; \text{Me } 8; \text{Se, Te}$
 56004
 Cr. str

XIV 4884

Brøndmo Nils Johan, Esperas Steinar,
 Gräver Halvør, Husebye Steinar.

The crystal structures of the methyl-
 xanthates of divalent sulphur, selenium,
 and tellurium.

"Acta chem. scand.", 1973, 27, N 2, 713-715

0914 НИК

(англ.)

ММ

887 887

907

ВИНИТИ

организм. соединения

1973

7 Б762. Применение ППЛ к стандартным термодинамическим характеристикам органических соединений.
8. Соединения с поливалентными функциональными группами $-S-$, $-O-$, $-S(O)-$, $-S(O_2)-$, $>N-$, $>NN<$ и $-OO-$ (мостиковые системы). Источники Б. И., Пальм В. А. В сб. «Реакц. способность орган. соедин.» Т. 10. Вып. 2. Тарту, 1973, 537—565 (рез. англ.)

В рамках ранее предложенной модели получены ур-ния, связывающие энтальпии образования соединений, содержащих поливалентные функциональные группы, с энтальпиями образования алканов. Показана удовлетворительная применимость этих ур-ний для корреляции ΔH° (обр., 298° К, газ, жидк.) серий RSR, ROR, RS(O)R', ROOR', RS(O₂)R', RR'R''N и RR'NNR''R''', где R, R', R'' и R''' — различные алкильные заместители или H. На примере серий RR'R''N и RR'NNR''R''' установлено, что аналогичные ур-ния связывают и другие термодинамич. св-ва [$\lg K^\circ$ (обр., ΔG°)]

ΔH⁰₂₉₈

2. 1974 № 7

обр.), S°)] соединений с поливалентными функциональными группами и алканов. Осуществлен анализ параметров корреляции св-в ΔH°_T (обр.) и $\lg K^\circ_T$ (обр.) серии RSR' . Показано, что ΔH° (обр., $298^\circ K$, газ.) алканов строения $RR'R''R'''C$ удовлетворительно описывается ур-нием, вытекающим из принципа полилинейности. Найдено, что аналогичными ур-ниями удовлетворительно описываются также и величины ΔH° (обр., $298^\circ K$, газ.) соединений RSR' , ROR' и $RR'R''N$. Сообщ. 7 см. РЖХим, 1973, 18Б51/2. Резюме

30731.8704
Ch

С.-З.- соединен
ср. ст 56004

1973
XIV 4945

Husebye Steinar.

The crystal structure of bis(4-morpho-
linethiocarbonyl) trisulphide.
"Acta chem. scand.", 1973, 27, N 3,
756-762 (англ.)

0927

904 904

920

ВИНИТИ

CS'C(2) [Om. 21314] 1982

McC Millen D.F., Golden D.M.,

$\Delta_f H$;

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

C₂S₂

1991

Janoschek Rudolf.

J. Mol. Struct. Theochem.

1991, 232, C, 147-154.

(cm. ● C₅O₂ ; I)
C₄O₂

C₅S₂

1991

Janoschek Rudolf.

J. Mol. Struct. Theochem.
1991. 232. C. 147-154.

(C₅O₂ ; I)
(C₄O₂ ; I)

C-S-orig. coeq.

1992

Han Changri.

Hebei Shifan Daxue

(ΔfH)

Xuebao, Ziran Kexue-
ban 1992, 16(4), 60-3.

(see. C-N-orig. coeq. i I)

β -C₂S (no. p-BOP)

1995

миссия
сб-ра и
смагнен

125: 42764g Thermodynamic study of the stability of β -C₂S solid solution. Li, Jianxi; Feng, Peizhi; Tong, Tamao (Wuhan Univ. of Tecnology, Wuhan, Peop. Rep. China 430070). *Guisuanyan Xuebao* 1995, 23(6), 644-651 (Ch). The effect of minor ions on the stability of β -C₂S are studied, based on the thermodyn. theory and quant. X-ray analyses. Thermodyn. criteria for β -C₂S stability are derived. When the chem. potential, μ , of a doped ion is less than Gibbs free energy, ΔG_β , of pure β -C₂S, i.e. $\mu_i < \Delta G_\beta$, β -C₂S solid soln. is stable. A formula for the crit. concn., α_0 , of doped ions is obtained as $\alpha_0 = \Delta G_\gamma - \Delta G_\beta / \Delta G_i - \Delta G_\beta$. A stability criterion for multi-ion effect on β -C₂S is also derived: $\Delta G_\gamma \geq \Delta G_\beta + \sum_{i=1}^n (\mu_i - \Delta G_\beta) \alpha_i$.

C. A. 1996, 125, N4

C₂L₂

[Om. 38 185]

1995.

Ming Wah Wong[†],
Curt Wentrup[†] et al.,

(ΔH) J. Phys. Chem., 1995,
99, 16849 - 16856.

C3L2

DM 38185

1995

Ming Wah Wong[†],
Curt Wentrup[†] et al.,

(ΔH)

J. Phys. Chem., 1995,
99, 16849 - 16856

Оматурелле
 проулетел
 центр

мерзавец
 СВ-РА

134: 62309b Complete basis set model chemistry applied to molecules of increasing molecular complexity: thermochemical properties of organic sulfur derivatives. Benassi, Rois; Taddei, Ferdinando (Dipartimento di Chimica, Universita di Modena e Reggio E., 41100 Modena, Italy). *J. Comput. Chem.* 2000, 21(15), 1405-1418 (Eng), John Wiley & Sons, Inc. To est. the thermochem. properties, bond dissocn. energies and atomization energies of sulfur org. derivs., the complete basis set (CBS) method was employed at the lower computational level (CBS-4) owing to the large mol. size of a no. of the mols. chosen. By comparison with exptl. values, calcd. values of thermochem. properties are subject to error, which increases in line with the increase in mol. complexity. The main source of error affecting the calcd. enthalpy of formation stems from the difference between the energy of the mol. and that of the single atoms: the greater the size of the mol., the greater the accumulation of error. By acting on the empirical correction to the CBS energy and minimizing the error due to the contribution of



C.A. 2001, 134, N5

the single atoms to the dissocn. energy a parameter d_i for each atom i is obtained. Application of these corrections does not greatly affect the heats of formation of the small mols. included in test sets employed for previous comparisons of calcd. and exptl. values, while there is a great improvement in the case of large mols., for example, di-Ph disulfide. The mean abs. deviation turns out to be 2.52, which is greater than that obtained in recent re-examns. of model chem. methods including the G3 and G3(MP3) approaches. The improvement in the results calcd. for large mols., whose heats of formation are calcd. with large errors at the CBS-4 level, in comparison also with the CBS-4M version, justify our approach.

2000

F: C2Sm7

P: 1

133:110238 Studies on carbon/sulfur cluster anions produced by laser vaporization: Experiment (collision-induced dissociation) and theory (ab initio calculation). I. C2Sm- (1 .ltoreq. m .ltoreq. 11).

Chen, Hong; Huang, Rong-bin; Lu, Xin; Tang, Zichao; Xu, Xin; Zheng, Lan-sun Department of Chemistry, State Key Laboratory for Physical Chemistry of Solid Surface, Xiamen University Xiamen 361005, Peop. Rep. China J. Chem. Phys., 112(21), 9310-9318 (English) 2000. Binary cluster anions composed of carbon and sulfur atoms have been produced from laser vaporization of a sample mixed with sulfur and carbon powders in a 20:1 ratio. They were mass-selected and their mol. formula was detd. by collision-induced dissocn. The clusters consist of even carbon atoms only

and their no. of clustering sulfur atoms equals or exceeds that of carbon atoms. Ab initio calcs. at the ROHF/6-31G* level have been performed for the cluster anions contg. two carbon atoms, $C_2S_m^-$ (1 .ltoreq. m .ltoreq. 10). Geometries of various isomeric structures of the clusters were optimized and their energies were compared to find the most stable isomers. For the singly charged anions, attachment of an addnl. electron leads to break their sulfur rings, and the isomers with two dangling sulfur atoms and a closed ring have the lowest energy. According to the exptl. and theor. investigations, the two carbon atoms form the bone of the clusters, and ejection of two sulfur atoms is the most competitive dissocn. pathway of the cluster anions.
