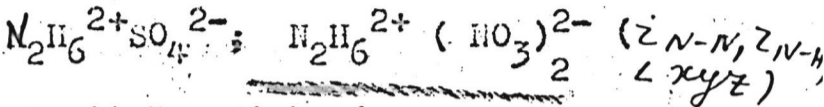
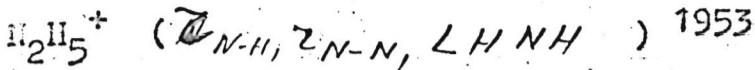


N-H-O

672-III



Pratt L., Richards R.E.

Trans. Faraday Soc., 1953, N 7,  
744-751 (anw)

Proton magnetic resonance  
spectra of hydrazine salts. Part I.

IX., 1954, N7, 21307

III - 2215

1953

$(\text{CH}_3)_4\text{N.OH}$ ;  $(\text{CH}_3)_4\text{N.HO}_2$ ;  $\text{H}_2\text{O}_2 \cdot \text{NH}_3$ .  
(связь) ~~связь~~

Simon A., Uhlig U.

Chem. Technik, 1953, 5, N8, 454 (нем.)

Zur Kenntnis ammoniakalischer  
Hydroperoxydlösungen und der  
Struktur von  $(\text{CH}_3)_4\text{N.OH}$ ,  $(\text{CH}_3)_4\text{N.HO}_2$  und  
PZCh, 1954, N10, 26829

$H_2O_2 \cdot NH_3$ .

745-III

NH<sub>2</sub>OH, ND<sub>2</sub>OH (V<sub>i</sub>)

1954

Nightingale R.E., Wagner E.L.  
J.Chem.Phys., 1954, 22, 203-8

The vibrational spectra and  
structure of solid hydroxylamine and  
deuterio hydroxylamine

C.A., 1954, 4974d



10

797-III

$\text{ND}_2\text{OD}$ ,  $\text{NH}_2\text{OH}$  (Vi.)

1954

Nightingale R.E., Wagner S.E.

J. Chem. Phys., 1954, 22, 11 2,  
205-208 (Amu)

The vibrational spectra and  
structure of solid hydroxylamine  
and deuterio-hydroxylamine.

PK., 1954, 11 16,  
37338



471-10

1955

$N_2O_2$ ;  $NH_2OH$  (  $\zeta$   $\kappa y$  )

Meyers E.A.

Doct.diss.Univ.Minnesota, 1955

Dissert.Abstrs., 1955, 15,

2423 (  $\alpha H T J$  )

Structure determinations of  $N_2O_2$

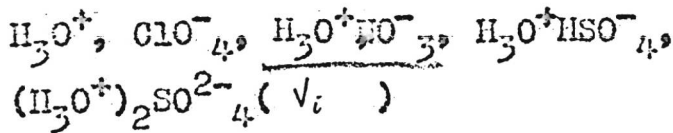
and  $NH_2OH$

PX., 1956, N 23,  
74288D



17 0

lo



Millen D.J., Vaal E.G.

J. Chem. Soc., 1956, Aug., 2913-2915

Raman spectra and constitution of solid hydrates. Hydroxonium perchlorate, nitrate, hydrogen sulphate and sulphate.

PX, 1958, 49332



753-III

$\text{NH}_4\text{O}_2\text{H}$

$\text{NaO}_2\text{H}$

( $\nu_i$ )

1959

Knop O., Gignere P.,  
Canad. J. Chem., 1959, 37, N 10,  
1794-1797

Инфракрасный спектр перекиси  
аммония

РХ., 1960, N 13, 50850

K

2529-III

1960

$NE_3$ ;  $PF_3$ ;  $AsF_3$  (  $H-H_0$ ;  $-(P-H_0)$ ;  $Cl, Co^0$  )

Mundaca S., Cleveland F.F.,

wave numbers, rotational distortion  
constants and thermodynamic  
properties for  $NE_3$ ,  $PF_3$ ,  $AsF_3$ .

J. Mol. Spectr. 1960, 5, N 1, 61-64

Ann. Rev., 1961,  
305, c.55



10

V. 6198

6 10 6 1966

LiNO<sub>3</sub>, NaNO<sub>3</sub>, KNO<sub>3</sub>,  
RbNO<sub>3</sub>, CsNO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>,  
TeNO<sub>3</sub>, HgNO<sub>3</sub> (Si)

Томьяненко М. А., Рагченко  
И. В.,

Укр. гос. ун-т., 1966, 11(3), 317-20

10

1970

vi, evidence ( $LiNO_3$ ,  $KNO_3$ ,  $NH_4NO_3$ ,  
 $\bar{x}$  4700,  $ND_4NO_3$ ) w 3

Devlin J.P., Li P.C., Pollard G.

J. Chem. Phys, 1970, 52, 45, 2267-2273 (corr.)

Vibrational spectra and structures  
of ionic liquids. IV Isotopic dilution  
of the alkali metal and ammonium  
nitrates.

Pukhov, 1970, 165228



w 9



$(\text{NH}_2\text{OH})_2$ ;  $\text{HO}\ddot{\text{F}}\cdot\text{H}_2\text{O}$ ; (стрелки), 1972  
 $\text{NH}_2\text{OH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ ;  $(\text{HO}\ddot{\text{F}})_2$  (кв. мех. расит) XT 3180

Del Bene J. E.,  
J. Chem. Phys., 1972, 57, N5, 1899-908  
(англ.)

Molecular orbital theory of the  
- hydrogen bond. III. Dimers  
containing hydroxylamine,  
water,  $\text{HO}\ddot{\text{F}}$ ,  $\text{O}$  and water.

10

CA, 1972, 74, N16, 1057-969

$\text{NO}(\text{H}_2\text{O})_n^+$

Mc Adams, M. J.;  
et al.

1972

См. п. 1.

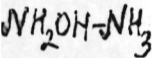
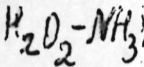
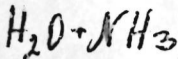
"J. Chem. Phys."

1972, 57, (5), 2173-7.

III

(см.  $\text{NO}(\text{H}_2\text{O})_n^+$ ; I)

1973



водор. связ.

электр. стр.

1 Д134. Исследование водородной связи методом молекулярных орбиталей. VII. Ряд димеров, содержащих аммиак в качестве акцептора протона. Del Bene J and E. Molecular orbital theory of the hydrogen bond. VII. A series of dimers having ammonia as the proton acceptor. «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 17, 5460—5465 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение связанных водородной связью (ВС) комплексов  $ROH \dots NH_3$  (I), где  $R = H, CH_3, NH_2$  или  $F$ . Варьировались только длины ВС и относит. ориентация молекул в комплексах. Рассчитаны равновесная геометрия, энергетич. характеристики, силовые постоянные, проведен анализ заселенностей по Малликену. Полученные результаты сопоставлены с данными расчетов в том же приближении для  $ROH \dots H_2O$  (II)

+4



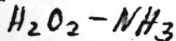
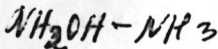
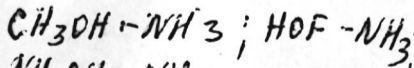
Ф. 1974 N 1

еще на бумаге

(ч. V см. РЖФиз, 1973, 6Д128). Обнаружено, что прочность ВС в I растет с ростом  $\sigma$ -электронно-акцепторной способности заместителя R, что свидетельствует о доминирующем влиянии электростатич. взаимодействий на прочность ВС. Отмечено, что гибридизационная модель пригодна к описанию природы связи в I и II. Также показано, что вращение  $\text{NH}_3$  в I вокруг ее оси 3-го порядка является практически свободным и не влияет на свойства ВС. При образовании ВС наблюдается неболь-

шой перенос заряда с  $\text{NH}_3$  на  $\text{ROH}$ , при этом сравнительно со свободными молекулами увеличиваются отрицат. заряды на атомах O и положит. заряды на всех атомах H. Изменение длины ВС в I всегда легче, а изгиб труднее, чем в II.

В. Л. Лебелен





$\text{CO}_2\text{H}^+$ ;  $\text{CH}_4$ ;  $\text{CH}_5^+$ ;  $\text{CO}_2$ ; (1973)

$\text{N}_2\text{OH}^+$ ;  $\text{CO}$ ;  $\text{HCO}^+$ ;  $\text{N}_2\text{O}$  ( $k_p, \Delta H$ ) XIII 2262

Hemsworth R. S., Rundle H. W., Bohme  
D. K., Schiff H. I., Dunkin D. B.,

Fehsenfeld F. C.  
J. Chem. Phys., 1973, 59, N1, 67-69 (anal.)

Determination of proton affinity  
from the kinetics of proton trans-  
fer reactions. III The measurements  
of the equilibrium constant at  
various temperatures.

J. Phys. Chem., 1973, 245 (14)

10, 4  
66-69

1973

HAAN; HABX; H<sub>2</sub>ABH; H<sub>2</sub>AAH<sub>2</sub>

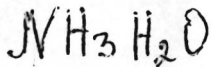
(A=C; N; O; S; B=N; O; X=O; S, N)

(row. сифура. - парей) XI 3453

Nakat suji H,  
J. Amer. Chem. Soc.; 1973, 95,  
N 7, 2084-95

10 (9)

12



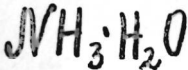
1973

(Do)

166262x Electron correlation and basis effects in the theory of hydrogen bonds. Mixed dimer ammonia-water. Meunier, Annie; Levy, Bernard; Berthier, Gaston (Lab. Chim., Ec. Norm. Super. Juenes Filles, Montrouge, Fr.). *Theor. Chim. Acta* 1973, 29(1), 49-55 (Fr). The energy of the H-bond N...H-O in  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  was calcd. by the LCAO-MO method and a minimal set of Slater-type orbitals optimized for the isolated monomers. The bond energy was detd. to be 7.66 kcal/mole at the SCF step and 9.65 kcal/mole after 2nd order corrections. Taking into account the basis extension arising from the vicinity of the 2 monomers inside the dimer, gave 3.96 kcal/mole at the SCF step and 4.63 kcal/mole at the 2nd order.

C. A. 1973. 78 N 26

1973



9 Б22. Теория молекул в молекулах. IV. Применение к изучению водородной связи в  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . Niessen Wolfgang von. A theory of molecules in molecules. IV. Application to the hydrogen bonding interaction in  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . «Theor. chim. acta», 1973, 32, № 1, 13—26 (англ.)

м.к.  
по темат.  
крив..

Предложенный ранее автором метод «молекулы в молекулах» (сообщ. II см. РЖХим, 1974, 5Б44) использован для изучения Н-связи между молекулами аммиака и воды. Волновая функция комплекса  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  построена из локализованных МО (ЛМО), полученных в расчетах отдельных молекул методом ССП в базисе гаус-

совских функций. Часть ЛМО перенесена без изменения, а часть (валентные ЛМО) получена вариационным методом. Перенесенные ЛМО ортогонализированы с помощью техники проекц. операторов. С целью упрощения расчетов последовательно вводился ряд дополнительных приближений, в том числе: сокращение числа базисных ЛМО, рассчитываемых вариационно; уменьшение числа исход-

х. 1974 № 9

ных базисных гауссовских функции; пренебрежение не-ортогональностью части МО; расчет кулоновских интегралов между ЛМО в приближении точечных зарядов. Сравнение рассчитанных с использованием упомянутых приближений длин связей и энергий связывания с величинами, полученными в неэмпирич. расчете ССП, показало, что введенные приближения вполне оправданы, за исключением приближения точечных зарядов, к-рое приводит к неверным потенциальным кривым системы  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . Потенциальные кривые  $\text{H}_3\text{N}-\text{H}-\text{OH}$  построены по 8 точкам межъядерного расстояния  $\text{N}-\text{O}$  в районе изменения от 5,0 до 15,0 ат. ед. Проведен также анализ влияния образования  $\text{H}$ -связи на ЛМО отдельных фрагментов, что позволило сделать заключения о том, какие типы ЛМО могут переноситься без изменений при использовании развиваемого метода. А. И. Дементьев

H<sub>2</sub>O - HN, H<sub>2</sub>O - HF, H<sub>3</sub>N - HCl, 1974

H<sub>3</sub>N - HF

Kb. Mex.  
p. 18

116235c Hydrogen bonding in mixed dimer systems with water. Aldrich, Haven S.; Cusachs, L. Chopin; Gary, L. P. (Dep. Chem., Tulane Univ., New Orleans, La.). *Int. J. Quantum Chem., Quantum Biol. Symp.* 1974, 1, 55-64 (Eng). Mol. orbital calcn. were performed on a variety of closed-shell neutral dimers utilizing water as an electron donor and selected second-row diatomics as proton donors. Dimers studied in this class include the water dimer, H<sub>2</sub>O-HN, and H<sub>2</sub>O-HF. In addn., results are presented for the strong hydrogen bonding systems H<sub>3</sub>N-HCl and H<sub>3</sub>N-HF. The hydrated ammonium ion NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-(OH<sub>2</sub>) is also discussed. This selection of dimer systems facilitated studying the role of water in forming a variety of hydrogen bonds in charged and neutral environments.

(+3)

X

C.A. 1975. 82 N 18

1.3 1974  
геом. структ. ( $\text{NO}_2\text{NH}_2$ , XIII 2637

$\text{NO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$ ,  $(\text{NO}_2)_2\text{NCH}_3$ )

Бурштейн К.Я., Фундлер И.Н.,  
Изв. АН ССР, Сер хим., 1974, № 4, 892-895

Квантовомеханическое определение  
геометрической конфигурации молекул  
из  $\text{NO}_2\text{NH}_2$ ,  $\text{NO}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$  и  
 $(\text{NO}_2)_2\text{NCH}_3$ .

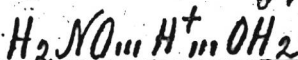
Рис. хим. 1974. 15670

10

41220.6662

Ch, Ph, TC

протон, нитрозный крив. 1974  
96200



ЖУ-7640

Kabankin, A.S., Zhidomirov G.M.

Calculations of magnetic resonance parameters for the protonated nitroxide radical. "Chem. Phys.", 1974, 6; N 1,

130-134

(англ.)

0260 ЛМК

239 240

ВИНИТИ



Parret E., M. n., Do, J (N<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, <sup>(1974)</sup>

N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, (HNO)<sub>2</sub>, (C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>NO)<sub>2</sub>, HNO, C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>NO

Leroy G., Martin P., Peeters D, XIII 2655

J. chim. phys. et phys.-chim. biol, 1974,

71, N3, 319-325 (1974)

Contribution à l'étude théorique  
de la liaison azote-azote.

Bull. Chim. Phys., 1974, 17540

10 (p)

$H_3N \cdots HOH$

1975

$H_3N \cdots HF$

$H_2O \cdots HF$

$HF \cdots HF$

$H_2O \cdots NH_2$

$\Delta H_{\text{димериз}}^{\circ}$

84: 9131k Systematic study of the nine hydrogen-bonded dimers involving ammonia, water, and hydrofluoric acid. Dill, J. D.; Allen, L. C.; Topp, W. C.; Pople, J. A. (Dep. Chem., Princeton Univ., Princeton, N. J.). *J. Am. Chem. Soc.* 1975, 97(25), 7220-6 (Eng). The 9 H-bonded dimers of  $NH_3$ ,  $OH_2$ , and  $HF$  are calcd. by ab initio MO theory at the 6-31G\* level with geometry optimization. Calcd. dimerization energies (kcal/mole) are:  $H_3N \cdots HNH_2$ , 2.9;  $H_3N \cdots HOH$ , 6.5;  $H_3N \cdots HF$ , 12.2;  $H_2O \cdots HNH_2$ , 7.3;  $H_2O \cdots HOH$ , 5.6;  $H_2O \cdots HF$ , 9.2;  $HF \cdots HNH_2$ , 2.6;  $HF \cdots HOH$ , 4.0;  $HF \cdots HF$ , 5.9. Energies and geometries are compared with available exptl. and ab initio values from the literature. The 6-31G\* results are internally consistent and of reasonable accuracy. The paucity of exptl. measurements on gas-phase dimers makes the present set of results of special significance for understanding the mechanism of hydrogen bonding, and for stimulating further exptl. work.

P.A. 1976

84 N2

(78)

☒

$H(NO_3)_2^-$

XU-8316

1975

XIII-3450

кв. мек.  
пачам

145096p Hydrogen dinitrate ion. I. Ab initio calculation of configuration and of proton potential curve. Gunde, R.; Solmajer, T.; Azman, A.; Hadzi, D. (Inst. "Boris Kidric", Univ. Ljubljana, Ljubljana, Yugoslavia). *J. Mol. Struct.* 1975, 24(2), 405-8 (Eng). Energies for various configurations of  $H(NO_3)_2^-$  were calcd. using a Slater-type orbital basis set. A double-min. hydrogen-bond potential function was found for the configuration with the lowest energy, but the energy differences between this and the other possible configuration were not large.

C.H. 1975. 82 N22

$H_2O - HN H_2$

1975

$HOH - NH_3$

Gordon Mark S.

электр.  
спросили

J. Amer. Chem Soc " 1975  
97, № 6, 1326-1333 (англ)

(cell  $(HF)_2$ ; III)

$N_2OH^+$

1975

Hindinger W., et al

J. Chem. Phys.,

1975, 62, 19, 3517-3522.

регистрация  
номер.



(see  $H_3^+$ ; III)

1975

N<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>

5 Д860. Колебательные распределения заселенностей системы N<sub>2</sub>O—N<sub>2</sub>\* в области 4,7 мк. Picard-Bersellini A., Rossetti C. Vibrational distributions of populations of the N<sub>2</sub>O—N<sub>2</sub> system in the 4.7 μ region. «Chem. Phys. Lett.», 1975, 36, № 5, 647—651 (англ.)

колебат.  
молекулы

Колебательная люминесценция возбужденных при столкновениях с активным азотом молекул N<sub>2</sub>O исследована с высоким разрешением в области 4,7 мк. Получены распределения заселенностей колебательных уровней N<sub>2</sub>O при различных расстояниях между точкой наблюдения люминесценции и точкой смешивания двух газов, соответствующих временам пролета  $t=30-1800$  мксек. Отклонения от больцмановского распределения для уровней норм. колебания  $\nu_3$  (при  $t > 170$  мксек) интерпретировано с точки зрения теории релаксации ангармонич. осцилляторов, причем последняя впервые распространена на трехатомные молекулы. Результаты свидетельствуют, что для норм. колебания  $\nu_3$  молекулы N<sub>2</sub>O колебательно-поступательная передача энергии пренебрежимо мала по сравнению с колебательно-колебательной. Обмен энергией между норм. колебаниями  $\nu_3$  и ( $\nu_2, \nu_1$ ), однако, также мал. В. С. И.

Ф. 1976, № 5.

70207.7341  
Ch, TC

Кинетика  
41197  
 $\text{HNO}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{NO}$

7976  
4897

Fifer Robert A.  
Kinetics of the reaction  $\text{OH} + \text{HNO}_2$   
 $\text{H}_2\text{O} + \text{NO}_2$  at high temperature behind  
shock waves.

"J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 25, 2717-2723  
(англ.)

0807 1976

765 768 799

ВИНИТИ

$\text{NH}_2\text{O}_2$

1976

86: 63432p A remarkably long-lived radical: the amino-  
peroxy,  $\text{NH}_2\text{O}_2$ . Giguere, Paul A.; Herman, Kazimiera (Dep.  
Chim., Univ. Laval, Quebec, Que.). *Chem. Phys. Lett.* 1976,  
44(2), 273-6 (Eng). K ozonide in liq.  $\text{NH}_3$  soln. is readily  
photolyzed, particularly by light in the region of strong absorption,  
from 400 to 550 nm. Contrary to the polycryst. solid which  
yields the superoxide, photolysis of the  $\text{NH}_3$  soln. involves the  
solvent. A yellow solute is formed, with a characteristic UV  
band centered at 350 nm. Under laser excitation 4 new Raman  
bands appear at about 1500, 980, 820 and 680  $\text{cm}^{-1}$ , the last 3  
seemingly doubled. These features are ascribed to long-lived  
aminoperoxy radicals from the reaction  $\text{KO}_3 + \text{NH}_3 - h\nu \rightarrow \text{KOH}$   
+  $\text{NH}_2\text{O}_2$ . A mechanism is postulated for that reaction in the  
solvent cage. Various explanations are considered for the  
remarkable stability of the aminoperoxy radical.

(2i)

C.A. 1977. 86. N10



$\text{HO}_2 \cdot \text{NH}_3$

1976

Hamilton E. J.

кв. мех.  
расчит

"J. Phys. Chem" 1976,  
80, v 18, 2037-2040 (aww)  
(см  $\text{HO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; III)

60405.4261

Ch, TC

$NH_3 - NO$   
41197  
 $NH_3 - O_3$

1976

4199

*реиниц*

Jayanty R.K.M.

Simonaitis R.,

Heicklen Julian. Reaction of  $NH_2$  with  
NO and  $O_2$ . "J. Phys. Chem.", 1976, 80, N 5,  
433-437 (англ.)

0593 ЛМК

*Om 37720*

566 570

5 85

1

ВИНИТИ

*Om 37720*

$\text{NH}_3\text{O}_3$

$\text{NH}_3\text{SO}_2$

$\text{N}(\text{CH}_3)_3\text{SO}_2$

to be given  
w.b. used  
fract.

C. A. 85  
N26

85: 198608a Charge-transfer complexes.  $\text{NH}_3\text{O}_3$ ,  $\text{NH}_3\text{SO}_2$ , and  $\text{N}(\text{CH}_3)_3\text{SO}_2$ . Lucchese, Robert R.; Haber, Kenneth; Schaefer, Henry F., III (Lawrence Berkeley Lab., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Am. Chem. Soc.* 1976, 98(24), 7617-20 (Eng). The donor-acceptor complex between trimethylamine and sulfur dioxide is the strongest such complex (in terms of its disocn. energy to  $\text{N}(\text{CH}_3)_3$  plus  $\text{SO}_2$ ) yet to be studied exptl. in the gas phase. Ab initio self-consistent-field theory was applied to this and 2 related complexes,  $\text{NH}_3\text{O}_3$  and  $\text{NH}_3\text{SO}_2$ . Min. basis sets were used for all 3 complexes, while for  $\text{NH}_3\text{SO}_2$  two considerably larger sets (double  $\zeta$  and double  $\zeta$  plus S  $d$  functions) were employed. The equil. structure of these complexes was predicted by an investigation of many points on the resp. potential energy surface. To a surprising degree, the  $\text{O}_3$  or  $\text{SO}_2$  mol. lies in a plane nearly perpendicular to the amine  $\text{C}_{3v}$  axis. Further, the central atom in  $\text{O}_3$  and  $\text{SO}_2$  is predicted to lie only slightly off the amine  $\text{C}_3$  axis. With these guidelines, the prediction of further structures of this type essentially reduces to a one-dimensional search for the central atom-N distance. Using a min. basis set, the 3 predicted binding energies are 2.24, 5.00, and 4.06 kcal/mol. Using the double  $\zeta$  basis set the  $\text{NH}_3\text{SO}_2$  disocn. energy is increased to 10.40 kcal/mol. When a set of sulfur  $d$  functions is added to the latter set, the binding energy becomes 9.30 kcal/mol in the absence of geometry reoptimization.

1976

(+2)

$N_2:OH$  ;  $N_2:OH^-$  ;  $N_2:OH^+$

1976

20 Б15. Расчет модельных адсорбционных комплексов молекул  $N_2$ ,  $O_2$  и  $NO$  с группами  $OH$ ,  $OH^-$ ,  $OH^+$  методом ПДП/2. Лыгин В. И., Лыгина И. А., Чернов А. Г. «Кинетика и катализ», 1976, 17, № 3, 800—802

Проведен расчет комплексов молекул  $N_2$ ,  $O_2$  и  $NO$  с группами  $OH$ ,  $OH^-$ ,  $OH^+$ . Результаты расчета комплексов молекул  $N_2$  и  $O_2$  с незаряженной  $OH$ -группой коррелируют со спектральными проявлениями взаимодействия молекул азота и кислорода с гидроксильной группой кремнезема. Расчет показал большую стабильность линейных форм комплексов молекул  $N_2$ ,  $O_2$  и  $NO$  с группами  $OH$ ,  $OH^-$ ,  $OH^+$ . Взаимодействие молекул  $O_2$  и  $NO$  с группой  $OH^+$  сопровождается переносом заряда на молекулы кислорода и окиси азота.

По резюме

X, 1976, N 20

HNNOH

оммму 5712 / 1974

Cimiraglia R. et al

Кв. мех,  
расея

Chem. Phys., 1977

Цис-транс  
конверсия

24, 251-61.

The cis-trans ● thermal and  
photochemical interconversion.


$\text{NH}_2$ ,  
p-uc  $\text{O}_2$

com. 37719

1977

Lesclaux R., Demissy M.,

Nouveau Journal de Chimie  
1977, 1, NB, 443.

On the reaction of  $\text{NH}_2$  radi-  
cal with  oxygen.

$H_2O \dots NH_3$

водородная  
связь в  
комплексах

$\Delta H$

9 Д567. Водородная связь в газовой фазе. Ч. 4. Исследование комплексов  $OH \dots N$ , образованных водой, по ИК-спектрам: моногидраты аммиака, амина и пиридина. Millen D. James, Mines Geoffrey W. Hydrogen bonding in the gas phase. Part 5. Infrared spectroscopic investigation of  $O-H \dots N$  complexes formed by water: ammonia monohydrate and amine and pyridine monohydrates. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1977, Part 2, 73, № 3, 369—377 (англ.)

По ИК-спектрам поглощения ( $3000-4000 \text{ см}^{-1}$ ) (при длине оптич. пути до 7,5 м) изучено образование комплексов (К) с водородной связью в газовой фазе между молекулами воды и аммиака (I), триметил-(II), триэтил-(III) и трет-бутил-(IV) аминов, пиридина (V), 2-метил-(VI) и 3-метил-(VII) пиридинов. Выполнено.



(F1)

$H_2O \dots NH_3 (\Delta H)$

0 1977 N9

1977  
4261

отнесение полос свободных и связанных в К молекул воды. Рассмотрены соотношения между сдвигами полос  $\bar{\Delta\nu}_1$  и  $\bar{\Delta\nu}_3$   $\text{H}_2\text{O}$  при образовании К и изменениями величин валентных силовых постоянных ОН. По эмпирич. корреляции  $\bar{\Delta\nu}$  с энтальпией образования К оценены значения  $\Delta H$  (с погрешностью  $\pm 2$  кдж/моль). Найденное значение энергии диссоциации К  $\text{H}_3\text{N} \dots \text{HOH}$  (21,5 кдж/моль) сопоставлено с результатами расчетов неэмпирич. методами; отмечено качеств. согласие полученных результатов. Библ. 21. С. Ф. Б.



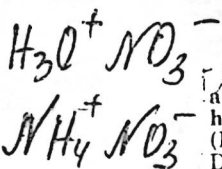
NH<sub>3</sub>O

1977

87:11927e The molecular structure of ammonia oxide (NH<sub>3</sub>O). An ab initio study. Radom, Leo; Binkley, J. Stephen; Pople, John A. (Res. Sch. Chem., Aust. Natl. Univ., Canberra, Aust.). *Aust. J. Chem.* 1977, 30(4), 699-703 (Eng). Ab initio MO theory is used to det. the mol. structure of NH<sub>3</sub>O. It is found that the N-O bond length is considerably overestd. by minimal (STO-3G), split-valence (4-31G and 6-31G) and large sp basis sets. This fault is rectified when polarization functions on nitrogen and oxygen are included in the basis (6-31G\*) leading to the best theor. value for the N-O length of 1.377 Å. Electron correlation has little effect on the calcd. bond length. Calcns. (STO-3G and 4'-31G) are also reported for Me<sub>3</sub>NO.

молекула  
структура  
параметры

C.A. 1977 87 N2



\*4-18873

1977

Ji

86: 148045q Ionic vs. molecular nature of monomeric ammonium and hydronium nitrate. Infrared spectra of hydronium nitrate ( $H_3O^+NO_3^-$ ) and ammonium nitrate ( $NH_4^+NO_3^-$ ) solvated in argon matrices. Ritzhaupt, G.; Devlin, J. P. (Dep. Chem., Oklahoma State Univ., Stillwater, Okla.). *J. Phys. Chem.* 1977, 81(6), 521-5 (Eng).  $HNO_3$  was reacted with  $NH_3$  and  $H_2O$  in an Ar matrix environment to permit study of the proton transfer process leading to the ion pairs  $H_3O^+NO_3^-$  and  $NH_4^+NO_3^-$ . For concns. of  $HNO_3$  that yielded primarily the monomer spectrum in a pure Ar matrix (i.e., matrix gas to  $HNO_3$  mole ratios of  $\sim 100$ ), only  $NH_4^+NO_3^-$  forms upon reaction with  $NH_3$ . However, reaction with  $H_2O$  under similar conditions yields primarily the  $H_2O.HNO_3$  complex; the ion pair,  $H_3O^+NO_3^-$ , is not stabilized until sufficient water of hydration is present in the matrix ( $\sim 6 \sim 10\%$ ). Since the ion pairs,  $NH_4^+NO_3^-$  and  $H_3O^+NO_3^-$ , are stable for an extensive range of  $NH_3$  or  $H_2O$  matrix concns., it was possible to observe the effect of variable extents of solvation of these cations on the



C.A. 1977, 86 N20

distortion of the  $\text{NO}_3^-$  ion by monitoring the  $\nu_3(e)$  splitting as a function of matrix compn. Regardless of the degree of solvation the cation and anion are apparently contact paired since the ions are formed in direct contact and it has been shown that, for analogous systems,  $\text{M}^+\text{NO}_3^-$  ions are paired in direct contact. The magnitude of the  $\nu_3(e)$  splitting ranges from  $20 \text{ cm}^{-1}$  for completely ammoniated  $\text{NH}_4^+\text{NO}_3^-$  and  $65 \text{ cm}^{-1}$  for completely hydrated  $\text{H}_3\text{O}^+\text{NO}_3^-$  to  $\sim 173 \text{ cm}^{-1}$  for the former in a 3%  $\text{NH}_3$ -Ar matrix and  $\sim 150 \text{ cm}^{-1}$  for the latter in a 6%  $\text{H}_2\text{O}$ -Ar matrix. These data emphasize the severe distortion produced by a bare  $\text{NH}_4^+$  or  $\text{H}_3\text{O}^+$  ion in contact with an oxyanion, a distortion believed to represent a composite of charge polarization and H bonding. Finally, work with concd.  $\text{H}_3\text{O}^+\text{NO}_3^-$  in glassy  $\text{H}_2\text{O}$  deposits shows conclusively that  $\Delta\nu_3$  increases, in such primarily ionic media, as the solvent concn. becomes insufficient for complete hydration of the cations. This observation is compared with differences noted previously between  $\text{M}^+\text{NO}_3^-$  ion pairs at high diln. in glassy matrixes and the same ion pairs in highly concd. liq. solns.

$H_3NO$

1<sup>o</sup> БЗБ. Природа (хим.) связи ХО в фосфиноксидах и родственных соединениях. Wallmeier H., Kutzelnigg W. Die natur der ХО-Bindung in Phosphoxiden und verwandten Verbindungen. «17. Hauptversammlung. Ges. Dtsch. Chem.; München, 1977». Frankfurt/M., s. a. (нем.)

Для молекул  $H_3NO$  (I),  $H_3PO$  (II),  $H_2FPO$  (III),  $H_2SO$  (IV),  $HClO$  (V),  $AgO$  (VI) и нек-рых др. родственных соединений проведены расчеты методом ССП МО ЛКАО без и с учетом поляризац. ф-ций, а также электронной корреляции. На основе анализа зарядовых заселенностей и сравнения энергий, полученных при использовании различных базисов, сделаны выводы об участии  $d$ -АО в образовании связи ХО и о ее полярности. Показано, что в II и IV связи PO и SO семиполярны, причем вклад  $d\pi$ - $p\pi$ -сопряжения значителен. Фтор-замещение у атома фосфора в III усиливает это сопряжение. Термин «двойная связь» ХО оценен как неудачный. I и V имеют не истинно семиполярную связь ХО, а скорее характеризуются переносом заряда между фрагментом  $H_3N$  или  $HCl$  и синглетным атомарным кислородом. В VI взаимодействие между атомами ван-дер-ваальсово. Для сравнения обсуждена природа аналогичной хим. связи в илидах и фосфоранах.

расчет E.

EA

Х. 1979, N 19

М. Комарова

$\text{H}_3\text{N}^+\text{H}_2\text{OH}$

number 6536 1978

Millen D. J.

Do

J. Mol. Spectrosc.

Кв. мех.  
factor

1978, 45, 1-22

Microwave Spectrosc.

1978



модель.  
смысл.

89: 118172y Polarity of hydrogen-bonded complexes: Nitric acid and carboxylic acid dimers. Odutola, J. A.; Dyke, T. R. (Dep. Chem., Univ. Oregon, Eugene, Oreg.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(12), 5663-5 (Eng). By using the mol.-beam elec.-deflection [MBED] (S. E. Novick, et al., 1973) and mass-spectrometric methods, the  $(\text{HNO}_3)_2$  dimer in the gas phase was shown to be nonpolar, probably with a H-bonded, planar, cyclic conformation of  $C_{2h}$  symmetry. In the gas phase, the  $(\text{HCO}_2\text{H})_2$  and  $(\text{HOAc})_2$  dimers were also nonpolar, probably with H-bonded cyclic conformations; however, the  $\text{HCO}_2\text{H} \cdot \text{HOAc}$  complex showed a nonzero elec. dipole moment (probably  $>0.1$  D). In MBED and mass-spectrometric studies of  $\text{HCO}_2\text{H} \cdot \text{H}_2\text{O}$  mixts., the possible gas-phase complexes detected included  $\text{HCO}_2\text{H} \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $(\text{HCO}_2\text{H})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ .



(+1)



C.A. 1978, 29, N14

minna 6743

1978

H<sub>2</sub>NOH

F<sub>2</sub>NOF

kb. ex.  
factor

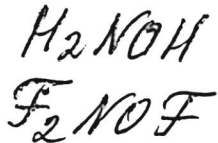
(+1) ⊗

89: 136080w Ab-initio studies of nitrogen-oxygen-fluorine compounds. Internal rotation in hydroxylamine and its fluorinated derivatives. Oisen, John F.; O'Connor, Daniel; Howell, James M. (Dep. Chem., Coll. Staten Island, Staten Island, N. Y.). *J. Fluorine Chem.* 1978, 12(3), 179-91 (Eng). Ab-initio mol. orbital theory at both the minimal and extended basis set levels was applied to the study of internal rotation in hydroxylamine and its fluorinated derivs. The computed energies were analyzed in terms of a Fourier-type expansion of the potential function. The total potential function  $V(\phi)$  was dissected into 1-fold ( $V_1$ ), 2-fold ( $V_2$ ) and 3-fold ( $V_3$ ) components and plots of these components together with  $V(\phi)$  are given for each of the mols. studied. Addnl., geometry optimizations were carried out as a function of the internal rotation angle  $\phi$  ( $\phi =$  :NOX dihedral angle) for H<sub>2</sub>NOH and F<sub>2</sub>NOF. For H<sub>2</sub>NOH, geometry optimizations are less important than for F<sub>2</sub>NOF. In general, the fluorinated hydroxylamines prefer a *trans*-conformation ( $\phi = 180^\circ$ ) while hydroxylamine itself adopts the *cis*-conformation ( $\phi = 0^\circ$ ) largely as a result of a lower dipole interaction ( $V_1$  term) in the *cis*-conformation.

C.A. 1978, 29, N16

оттисек 6743

1978



Цо, геометр  
молекула.

24 Б32. Неэмпирические исследования соединений N—O—F. Внутреннее вращение в гидроксиламине и его фторированных производных. Olsen John F., O'Connor Daniel, Howell James M. Ab-initio studies of N—O—F compounds. Internal rotation in hydroxylamine and its fluorinated derivatives. «J. Fluor. Chem.», 1978, 12, № 3, 179—191 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО с использованием миним. и расширенного базисов гауссовых орбиталей (ОСТ—3 ГФ и 4—31 ГФ) проведены расчеты барьеров внутреннего вращения в гидроксиламине и его фторированных пр-ных:  $H_2NOH$ ,  $F_2NOF$ ,  $H_2NOF$ ,  $FHNOH$ ,  $F_2NOH$ , и  $FHNOF$ . Полученные потенциальные функции аппроксимированы отрезками ряда Фурье. Для  $H_2NOH$  и  $F_2NOF$  проводилась дополнительная оптимизация геометрии, к-рая оказалась особенно существенной для  $F_2NOF$ . В этой молекуле при оптимизации геометрии высота барьера понижается от 20 до 12,5 ккал/моль, а разность энергий цис- и транс-кон-



2. 1978, № 24



формаций уменьшается с 8,5 до 5,6 ккал/моль. Проведенные расчеты свидетельствуют о том, что во фторированных гидроксиламинах наиболее стабильной является транс-конформация (угол внутреннего вращения  $\varphi=180^\circ$ ), в то время как в самом гидроксиламине наиболее стабильна цис-конформация ( $\varphi=0$ ). В случае  $F_2NOF$  соотношение между рассчитанными энергиями разных конформаций зависит от кач-ва базиса: в базисе OСТ—3 ГФ наиболее стабильной получается цис-конформация, а в базисе 4—31 ГФ наиболее стабильна транс-конформация. Для др. исследованных молекул подобной зависимости от базиса не наблюдалось.

И. Тополь

ЗНАХ  
2 В Х

$H_3NO$

1978

6 Д230. Неэлектрическое изучение нескольких соединений вида  $X_3YO$  и  $X_3YOH$ . Геометрия и электронная структура. Olsen John F., Howell James M. Ab initio studies on several species of the formula  $X_3YO$  and  $X_3YOH$ . Geometries and electronic structure. «Theor. chim. acta», 1978, 47, № 1, 39—50 (англ.)

Методом ССП Хартри—Фока—Рутана с использованием как минимального, так и расширенного базисного набора проведены расчеты равновесной геометрии и электронной структуры молекул  $H_3NO$ ,  $H_3CO^-$ ,  $H_3COH$ ,  $F_3NO$ ,  $F_3CO^-$ ,  $F_3COH$ . Из анализа результатов расчета следует, что значения структурных параметров, полученные с использованием базиса 4—31 ГФ лучше согласуются с эксперим. данными, чем величины структурных параметров, определенные из расчетов с базисом STO-3 ГФ. Для молекул  $H_3NO$ ,  $F_3NO$ ,  $F_3CO^-$  исследовано влияние включения  $d$ - $f$ -ций в базисный набор на результаты вычислений. При этом оптимизированная структура соединений, содержащих фтор, из-

расчет  
равновесной  
геометрии

(+5)

р. 1978, № 6

менилась незначительно, в то время как в молекуле  $\text{H}_3\text{NO}$  включение в базис  $d$ -орбиталей на атоме азота привело к значительному уменьшению длины связи  $\text{NO}$ . По схеме Малликена проведен анализ электронных заселенностей.

А. Обухов



$H_3NO$

1978

расчет  
геометр.  
строения

☒

10 Б26. Неэмпирические расчеты соединений состава  $X_3YO$  и  $X_3YOH$ . Геометрия и электронное строение. Olsen J. F., Howell J. M. Ab initio studies on several species of the formula  $X_3YO$  and  $X_3YOH$ . Geometries and electronic structure. «Theor. chim. acta», 1978, 47, № 1, 39—50 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП-ЛКАО-МО рассчитано электронное строение молекул и молек. ионов состава  $X_3YO$  ( $H_3NO$ ,  $H_3CO^-$ ,  $F_3NO$  и  $F_3CO^-$ ) и  $X_3YOH$

е  
СП

Х. 1978, №10

( $\text{H}_3\text{CON}$  и  $\text{F}_3\text{CON}$ ). Расчеты проведены с использованием миним. базиса ОСТ-3ГФ, а также расширенного базиса 4—31 ГФ с включением и без включения поляризац. 3d-АО на атомах N и C. Для всех систем проведена предв. оптимизация геометрии ( $C_{3v}$  или  $C_s$ ) с варьированием длин связей и валентных углов. Найдено, что инверсионные барьеры невелики и составляют 1—2 ккал/моль. Для нек-рых систем ( $\text{H}_3\text{CON}$ ) расчеты даже в миним. базисе соответствуют эксперим. данным, а для других ( $\text{F}_3\text{NO}$ ) только расширение исходного базиса приближает вычисленные геометрич. параметры к их средн. значениям в родственных системах. Отмечено, что расчеты в расширенном базисе значительно лучше воспроизводят опытные значения дипольных моментов в молекулах  $\text{F}_3\text{NO}$  и  $\text{H}_3\text{CON}$ . На основании анализа заселенностей подробно рассматривается характер связи. Получено качеств. соответствие между заселенностями перекрывания связей N—O и C—O со сдвигами колебательных частот в ИК-спектрах. Предсказана возможность существования молекул  $\text{H}_3\text{NO}$  и  $\text{CF}_3\text{OH}$ . На основании расчетов предложена качеств. схема, позволяющая описывать электронное строение родственных систем.

С. Долгин

$H_2NOH$

номер 6442 1978

Olsen Johh F et al

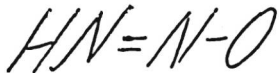
электрон.  
спектр.  
геометрия,  
E

J. Fluor. Chem. 1978, 12,  
N2, 123-136



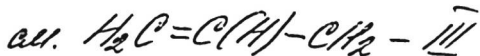
ал.  $H_2NO$  -III

1979



кб. еек  
паек  
павколев.  
ре. е. и. п. е. с.

Braid N. Colin, et al.  
J. Amer. Chem. Soc. 1979,  
101, N16, 4531-4533.



$\text{NH}_2$ ,

Am. 37 721

1979

reaksiu  
c  $\text{O}_2$

Cheskiis S.G., Sarkisov O.M.,

Chem. Phys. Lett., 1979,  
62, N1, 72-76.

Flash photolysis of  
ammonia in the presence



of oxygen.

$\text{NH}_4\text{OH}$

Lammela 86881

1979

Fisher F.H.

Kgucceg.

(Kaj)

Omacy.

no macy.

J. Solution Chem.

1979, 8 (7), 549-56

Dissociation Constants:  $\text{NH}_4\text{OH}$   
as a Standard.

$H_3N \cdots HOH$

$HNH_2 \cdots HOH$

кв. сек.

расчет,  
смайлера,  
вопросов

оммсе 7875 1979

Leroy R., et al.

J. Chim. Phys. (Fr),  
1979, 76 (2), 113-24



H<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>

Lipinski J.

1979

кв. сек.  
расчет  
символично

Adv. Mol. Relaxation  
Interact. Processes.

1979, 14(4), 297-302

(см. C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-Cl<sub>2</sub> / 10)

$\text{NO}_3^- \cdot \text{H}_2\text{O}$

$\text{NO}_2^- \cdot \text{H}_2\text{O}$

non-soluble

crystal

homogeneous

Lammela 9560

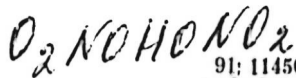
1979

Smith G. P.; et al,

J. Chem. Phys., 1980

71 (11), 4464-70

Photodissociation and photodetachment of ...



1979

91: 11450b MO calculation of the conformational energy and of the hydrogen bond potential function of the hydrogen dintrate ion. Solmajer, T.; Hadzi, D. (Pharm. Chem. Works, LEK, Ljubljana, Yugoslavia). *Vestn. Slov. Kem. Drus.* 1979, 26(1), 27-38 (Eng). The energy of the  $\text{O}_2\text{NO.H.ONO}_2$  ion as a function of 2 torsional angles (around the O---O vector, and around the O-N(O)<sub>2</sub> axis), was calcd. using the CNDO/2 and the STO-3G ab initio schemes. The energy changes upon moving the proton along the O---O vector were also calcd. and the force const. was derived. The energy of the planar conformation is at min. for  $R_{\text{O---O}} = 2.35 \text{ \AA}$ .

C.A. 1979



C.A. 1979, 61, N2

1979

$O_2NO...H...ONO_2$

12 Б58. Вычисление методом МО конформационной энергии и потенциальной функции водородной связи в Н-связанном ионе динитрата. Solmajer T., Hadži D. Mo calculation of the conformational energy and of the hydrogen bond potential function of the hydrogen dinitrate ion. «Vestn. Slov. kem. društ.», 1979, 26, № 1, 27—38 (англ.; рез. словен.)

Кв, макс.  
расчет

Полуэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в приближении ППДП/2 и неэмпирич. методом в базисе ЗГФ проведены расчеты энергии системы  $O_2NO...H...ONO_2$  (I) с Н-связью. Исследованы потенциальные профили вдоль координат углов, описывающих кручение соотв. вокруг направления  $O...O$  и оси  $O-O_2$ , и вдоль координаты, представляющей движение протона между атомами О. Оба метода дают аналогичные качественные результаты, но колич. расхождение значительно. Расчет в приближении ППДП/2, как обычно, занижает величину барьера. Вычисления показывают, что энергия I слабо изменяется при переходе от плоской конформации к скрученной. В плоской конформации минимуму энергии отвечает расстояние  $O...O$ , равное 2,35 Å. Сделана оценка силовой постоянной (0,6 мд/Å), характеризующей Н-связь в I.

ж. 1979, N 12

Э. Герман

$H_3NO$

1979

22 Б26. Природа семиполярной связи ХО. Сравнительное неэмпирическое исследование  $H_3NO$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_3PO$ ,  $\sqrt{H_2POH}$ ,  $H_2P(O)F$ ,  $\sqrt{H_2SO}$ ,  $HSOH$ ,  $\sqrt{HClO}$ ,  $\sqrt{AgO}$  и родственных молекул. Wallmeier Holger, Kutzelnigg Werner. Nature of the semipolar XO bond. Comparative ab initio study of  $H_3NO$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2POH$ ,  $H_2P(O)F$ ,  $H_2SO$ ,  $HSOH$ ,  $HClO$ ,  $AgO$ , and related molecules. «J. Amer. Chem. Soc.», 1979, 101, № 11, 2804—2814 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО рассчитано электронное строение молекул  $H_3NO$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2SO$ ,  $HClO$ ,  $AgO$ , некоторых их изомеров типа  $H_2NOH$ ,  $H_2POH$  и  $HSOH$ , фторзамещенных соединений, таких как  $H_2P(O)F$  и соотв-щих молекул без атомов О. С целью исследования роли d-АО в исследованных молекулах к базису ГФ двухэкспонентного типа добавляли поляризац. АО на атомах X (X=N, P, S, Cl, Ag). В ряде молекул ( $H_3N$ ,  $H_3P$ ,  $H_3NO$  и  $H_3PO$ ) были учтены корреляц. эф-

расчет  
электрон.  
структур

(18) A

ж. 1979, № 22



фекты в рамках методов конфигурац. взаимодействия и связанных электронных пар в базисе парных натуральных орбиталей. Для рассмотренных молекул рассчитаны энергии связей ХО, вклады *d*-орбиталей в связь, эффективные заряды; проведен анализ заселенностей МО. Для ряда молекул проведена оптимизация основных геометрич. параметров. Рассчитаны дипольные моменты. Установлено, что связь ХО во всех случаях является частично полярной типа  $X^+—O^-$ ; *d*-АО вносят определенный вклад в  $H_3PO$ ,  $H_2P(O)F$  и  $H_2SO$ , но при этом *d*-АО нельзя рассматривать как валентные, и связь в рассмотренных молекулах может быть описана в терминах канонич. *sp*-орбиталей. Изомеры  $H_2NOH$ ,  $H_2POH$  и  $HSOH$  имеют меньшую энергию, чем  $H_3NO$ ,  $H_3PO$  и  $H_2SO$ , соотв. Все оксиды стабилизируются при замещениях  $CH_3$ , F, OH или  $O^-$ .

И. А. Тополь



1979

91: 27694v Nature of the semipolar XO bond. Comparative ab initio study of  $H_3NO$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2POH$ ,  $H_2P(O)F$ ,  $H_2SO$ ,  $HSOH$ ,  $HClO$ ,  $ArO$ , and related molecules. Wallmeier, Holger; Kutzelnigg, Werner (Ruhr-Univ. Bochum, D-4630 Bochum, Fed. Rep. Ger.). *J. Am. Chem. Soc.* 1979, 101(11), 2804-14 (Eng). Ab initio calcns. with various basis sets (of double- $\zeta$  quality augmented by polarization functions) were performed on SCF level, and with the inclusion of electron correlation, for the mols.  $H_3NO$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2SO$ ,  $HClO$ , and  $ArO$ , some isomers such as  $H_2NOH$ ,  $H_2POH$ , and  $HSOH$ , some fluorine-substituted compds. such as  $H_2O(O)F$ , and the corresponding O-free mols. The results are analyzed in terms of binding energies for the XO bonds, contributions of  $d$  AO's to the bonds, effective charges, and overlap populations. The most relevant geometrical parameters are optimized and computed; dipole moments are given. Conclusions are drawn concerning the nature of the XO bond in the various compds. Although there are large differences, e.g., between  $H_3NO$  and  $H_3PO$ , all these

$H_3NO$   
 $H_3PO$   
 $H_2SO$   
 $HClO$   
 $ArO$   
 $H_2O(O)F$

(rev. seek. paper)

©. A. 1979, 91, N4

(+5)

bonds are essentially semipolar of the type  $X^+-O^-$ . The  $d$  AO's have a significant contribution in  $H_3PO$ ,  $H_2P(O)F$ , and  $H_2SO$ , but it is not justified to regard them as valence AOs. The isomers  $H_2NOH$ ,  $H_2POH$ , and  $HSO_2H$  are lower in energy than  $H_3NO$ ,  $H_3PO$ , and  $H_2SO$ , resp., although the energy difference of the pair  $H_2POH/H_3PO$  is very small. The XO bond is stabilized both by  $CH_3$  and F substitution, though the stabilization mechanisms are quite different. A comparison to bonding in phosphoranes and related compds. is also made. For  $H_3N$ ,  $H_3P$ ,  $H_3NO$ , and  $H_3PO$  correlation energy is analyzed.

НЗМО

1979

1 Д127. Природа семиполярной связи XO. Сравнительное неэмпирическое изучение  $H_3NO$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2POH$ ,  $H_2P(O)F$ ,  $H_2SO$ ,  $HSOH$ ,  $HClO$ ,  $ArO$  и родственных молекул. Nature of the semipolar XO bond. Comparative Ab initio study of  $H_3NO$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2POH$ ,  $H_2P(O)F$ ,  $H_2SO$ ,  $HSOH$ ,  $HClO$ ,  $ArO$ , and related molecules. Wallmeier Holger, Kutzelnigg Werner. «J. Amer. Chem. Soc.», 1979, 101, № 11, 2804—2814 (англ.)

С целью детального анализа элейтронной природы семиполярной связи выполнены неэмпирич. расчеты  $H_3N$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_3NO$ ,  $H_3P$ ,  $H_2POH$ ,  $H_3PO$ ,  $H_2PF$ ,  $H_2POF$ ,  $H_2S$ ,  $H_2SO$ ,  $HSOH$ ,  $HCl$ ,  $HClO$ ,  $ArO$  в приближении ССП, а для молекул  $H_3N$ ,  $H_2NOH$ ,  $H_2P$ ,  $H_2S$ ,  $HCl$  — также расчеты с включением эффектов электронной корреляции. Расчеты проводились в сжатом гауссовом базисе с различными наборами поляризующих ф-ций.

(НО) (X)

CP. 1080. NL

Табулированы значения полных энергий всех систем, энергий связи, геометрич. параметров, результатов анализа заселенностей по Малликену и по Хейнцману—Алричу (Heinzmann R. et al. «Theor. Chim. Acta», 1976, 42, 33), дипольных моментов, рассчитанных в различных базисах, энергий МО и парных корреляционных энергий. Проанализированы изменения электронной структуры молекул в рядах  $H_nX$ ,  $H_{n-1}XOH$ ,  $H_nXO$  ( $X=N, P, S, Cl$ ) и при замене атомов O на F и  $CH_3$ .

О. В. Сизова

HNNO

[ommua 9754] 1980

Baird N.C.

морской  
голубчик,  
кв. сек.  
фракт,  
E

Can. J. Chem., 1980,  
58, 733-38

(см ONO; III)

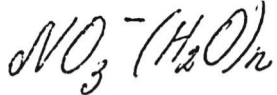
1980



nb. see  
paper

C. A. 1980  
53 N 18

93: 174166u Monte Carlo simulation of small hydrate clusters of nitrite ion. Banerjee, Ajit; Shepard, Ron; Simons, Jack (Dep. Chem., Univ. Utah, Salt Lake City, UT 84112 USA). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(4), 1814-26 (Eng). The ground-state Hartree-Fock (HF) potential for the  $\text{NO}_2:\text{H}_2\text{O}$  dimer was computed for 102 different intermol. geometrical configurations and is expressed in a computationally convenient anal. form. The main conclusion drawn from these calcns. is that the ion-solvent attraction is mainly electrostatic for intermol. distances between 6.0 and 7.0 bohr (N-to-O distance). Keeping the dipole vector of the  $\text{H}_2\text{O}$  mol. oriented toward the  $\text{NO}_2^-$  ion yields energetically favorable conformations. Rotations of the  $\text{H}_2\text{O}$  mol. which do not change the dipole orientation of the  $\text{H}_2\text{O}$  have a small barriers ( $\sim 4$  kcal/mol), whereas those that destroy proper dipole alignment encounter large ( $\sim 30$  kcal/mol) barriers. The use of such ion- $\text{H}_2\text{O}$  intermol. potentials together with the  $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}$  pair potential of E. Clementi (1973-1977) permits Monte Carlo techniques to be used to examine the nature of the inner hydration shells of  $\text{NO}_2^-$ . The results of Monte Carlo simulations of  $\text{NO}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n$ ,  $1 \leq n \leq 15$  are discussed in some detail.



1980

Бекмуратова Д.М. д-р.

Н. ф. у. химии 1980, 54,  
№1, 52-5.

расчет  
энергии  
диссоциации.





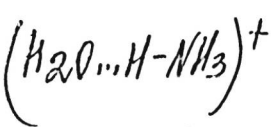
1980

 $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 

94: 38920d The infrared spectra of the hydrates of ammonia,  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $2\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  at 95°K. Bertie, John E.; Morrison, Gary M. (Dep. Chem., Univ. Alberta, Edmonton, AB Can. T6G 2G2). *J. Chem. Phys.* 1980, 73(10), 4832-7 (Eng). The monohydrate and the hemihydrate of ammonia were grown from the liq. and characterized by their x-ray powder diffraction patterns at ~100 K, which are reported. IR spectra of samples milled in liq. propane, propylene, or Freon 13 at 95 K are reported from 4000 to 400  $\text{cm}^{-1}$  and a preliminary assignment is made. The previously reported IR spectra of these compds. are not correct, undoubtedly because the method of prepn. did not yield the correct compds. The spectra are consistent with the reported structures except that limited proton-disorder may occur in the monohydrate and that the lengths of the 2 types of O-H...N bond in the hemihydrate may differ by ~0.04 Å instead of the reported 0.02 Å. The frequencies of O-H stretching vibrations in O-H...N bonds of length 2.775 to 2.84 Å at 100 K are in the range 2910 to 3125  $\text{cm}^{-1}$ .

(Di)

O.A. 1981.94, N°6

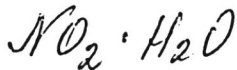


Симмонс 10098 1980.

Desmeules P.J; et al.

молекула  
концепт,  
структур  
сформов.  
комбинация

J. Chem. Phys., 1980,  
72 (9), 4737-48



1980

93: 120728k Calculation of nitrite ion monohydrates using the CNDO/2 and NDD methods. Kelm, H.; Koehler, H. J.; Volkmer, P. (Zentralinst. Kernforsch. Rossendorf, DAW, DDR-8051 Rossendorf, Ger. Dem. Rep.). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1980, 261(3), 457-63 (Ger). Stabilization energies, geometrical parameters, and charge d. distributions of  $\text{NO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  calcd. by the CNDO/2 and NDDO approxns. for 2 orientations (H-bonded and dipole) are presented.

Кв. 333,  
факт

CA 1980 93 N 12

$\nu_i$  ( $\text{HO}_2\text{NO}_2$ ,  $\text{CCl}_3\text{O}_2\text{NO}_2$ ,  $\text{CCl}_2\text{FO}_2\text{NO}_2$ ,  
 $\text{CH}_3\text{O}_2\text{NO}_2$ ) XIII-5624

Morel O., Simonaitis R., Meicklenz,  
Chem. Phys. Lett. 1980, 73, n1, 38-42 (univ)

Ultraviolet absorption spectra of  
 $\text{HO}_2\text{NO}_2$ ,  $\text{CCl}_3\text{O}_2\text{NO}_2$ ,  $\text{CCl}_2\text{FO}_2\text{NO}_2$   
and  $\text{CH}_3\text{O}_2\text{NO}_2$ .

Pu 97y, 1980, 120361

W. (P)

$H_2NO_2$

7  
электрон.  
структура

Х.1981.№10

10 В17. Расчет перекисных свободных радикалов методом взаимодействия конфигураций в приближении химически активной подсистемы. Аминоперекисный радикал  $H_2NO_2$ . Yamaguchi Kiza, Iwata Suehiko. Active reaction subsystem. CI studies of peroxy free radicals aminoperoxy radical ( $H_2NO_2$ ). «Chem. Phys Lett. 1980, 76, № 2, 375—379 (англ.)»

Метод взаимодействия конфигураций (ВК) в приближении активной р-ционной подсистемы (АРП) («Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, 563) использован для исследования электронной структуры основного и нижних возбужденных состояний аминоперекисного радикала  $H_2NO_2$ . В кач-ве АРП рассматривалась система из 4 реакц. естественных орбиталей и 5 электронов, расчет производился для плоской и перпендикулярной конфигураций  $H_2NO_2$  с натуральными орбиталями  $\pi(A'')$  и  $n(A')$ , найденными в рамках неэмпирич. метода. Показано, что наиболее стабильным состоянием является  $\pi$ -состояние плоской структуры, а низколежащими возбужденными состояниями плоской конфигурации являются состояния  $\pi\pi^*(D_1)$ ,  $\pi\pi^*(D_2)$ ,  $\pi^*\sigma^*(D_3)$ ,  $\sigma\pi^*(D_4)$  и  $n_2\pi^*(D_5)$  соотв. Обсуждены надежность и характеристики волновых ф-ций ВК АРП и отмечается необходимость дальнейшей оптимизации по

1980

геометрии молекулы для более надежных представле-  
ний о р-ционнеспособности и стабильности. С. Г. Ческис

ров  
1 а

$H_2NO_2$

1980

4 Д107. Исследование методом конфигурационного взаимодействия в модели активной реакционной подсистемы пероксильных свободных радикалов. Аминопероксильный радикал ( $H_2NO_2$ ). Active reaction subsystem CI studies of peroxy-free radicals aminoperoxy radical ( $H_2NO_2$ ). Yamaguchi Kizashi, Iwata Suehiko. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 76, № 2, 375—379 (англ.)

расчет  
радикала

Методом конфигурац. взаимодействия с использованием приближенных натуральных орбиталей (НО) и отбором конфигураций по спец. схеме (в т. наз. модели активной реакционной подсистемы см. Yamaguchi K. и др., «Chem. Phys. Lett.», 1980, 71, 563) исследовано электронное строение аминопероксильного радикала,  $H_2NO_2$  (I) в основном и возбужденных состояниях. Для построения приближенных НО использованы расчеты методом Хартри — Фока в базисе OCT-4-31ГФ. Рас-

Ф. 1981 № 4

смотрены плоская и перпендикулярная конфигурации I. Наиболее стабильным найден плоский  $\pi$ -радикал. Энергии низколежащих возбужденных состояний возрастают в ряду  $n\pi^*$ ,  $\pi\pi^*$ ,  $\pi^*\sigma^*$ ,  $\sigma\pi^*$ ,  $n_2\pi^*$ , причем при внутреннем вращении группы  $\text{NH}_2$  состояния  $\pi^*\sigma^*$  и  $\sigma\pi^*$  меняются местами. Наиболее низколежащее возбужденное состояние  $n\pi^*$  соответствует состоянию  ${}^1A_1$  (или  ${}^1B_1$ ) озона и по природе ковалентно. Состояние  $\pi\pi^*$  несколько ионно и соответствует состоянию  ${}^1B_2$  озона. Кратко обсужден электронный спектр I. В. Л. Лебедев



1980

$H_2NO_2$

94: 71821v Active reaction subsystem CI studies of peroxy free radicals aminoperoxy radical ( $H_2NO_2$ ). Yamaguchi, Kizashi; Iwata, Suehiro (Fac. Eng. Sci., Osaka Univ., Osaka, Japan 560). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 76(2), 375-9 (Eng). The multiref. CI method using the active reaction subsystem was carried out to elucidate the electronic structures of both the ground and excited states of  $H_2NO_2$  and its excitation energies. The system constructed of the 4 reaction natural orbitals and 5 electrons is regarded as an active reaction subsystem for describing both the ground and excited states of  $H_2NO_2$  in a well-balanced manner.

UB. III.  
fact

C.A. 1981.92.110

ONOH

[Ommuck 12780]

1981

reomemp.

Baird N.C., Taylor K.F.,

Chem. Phys. Lett., 1981,  
80 (1), 83-86.

$[H(NO_3)_2]^-$  Ommuck 13421 1981

| 96: 189806p Normal coordinate analysis of the two forms of the hydrogen dinitrate ion. Barlic, B.; Hadzi, D.; Orel, B. (Boris Kidric Inst. Chem., Univ. Ljubljana, Ljubljana, Yugoslavia). *Spectrochim. Acta, Part A* 1981, 37A(12), 1047-8 (Eng). Force consts. and the potential energy distributions were calcd. for the 2 geometries ( $C_2$  and  $C_{2h}$  symmetry) of the  $[H(NO_3)_2]^-$  ions. Agreement with the obsd. frequencies, including the  $^2H$  and  $^{15}N$  isotopic species, was obtained using the same set of force consts. for both forms.

chem. noct.,

Di

C.A. 1982, 96, N22

$\text{H}(\text{NO}_3)_2^+$  [Оттиск 13434 / 1981]

11 Б209. Расчет нормальных колебаний двух форм иона динитрата водорода. Barlic B., Hadži D., Orel B. Normal coordinate analysis of the two forms of the hydrogen dinitrate ion. «Spectrochim. acta», 1981, A37, № 12, 1047—1048 (англ.)

расчет см. л.  $\nu_i$   
Проведен расчет нормальных колебаний и распределение потенциальной энергии по колебательным координатам для двух геометрич. моделей иона  $\text{H}(\text{NO}_3)_2^+$  симметрии  $C_2$  и  $C_{2h}$ . Получен набор силовых коэф., хорошо описывающий колебания обеих форм, включая изотопич. модификации, содержащие дейтерий и  $^{15}\text{N}$ .  
С. С. Букалов

X. 1982, 19, N11.

$M_2N-OH$

1981

Bernardi F., et al.

Computational Theor. Org.

Chem. Proc NATO Adv.

Study Inst., Menton, June

29 - July 13, 1980. Dordrecht  
e. a., 1981, 197-231.

(see.  $HN = NH$ ; iii)

papers  
v. n.

$\text{H}_2\text{N}-\text{OH}$

Оттиск 13134

1981

8 Б57. Количественный орбитальный анализ неэмпирических расчетов методом ССП-МО. Часть II. Конформационные преимущества в  $\text{H}_2\text{N}-\text{OH}$  и  $\text{H}_2\text{N}-\text{SH}$ . Bernardi Fernando, Bottoni Andrea, Mangini Angelo, Tonachini Glauco. Quantitative orbital analysis of ab initio SCF-MO computations. Part II. Conformational preferences in  $\text{H}_2\text{N}-\text{OH}$  and  $\text{H}_2\text{N}-\text{SH}$ . «J. Mol. Struct.», 1981, 86, № 1-2, («Theochem», 1981, 3, № 1-2), 163-172 (англ.)

Электрон.  
Строение

Методом ССП МО ЛКАО в базе ОСТ-3 ГФ рассчитано электронное строение гидроксиламина (I) и тиогидроксиламина (II) в цис- и транс-конформациях. Геометрич. параметры II полностью оптимизировались для каждой конформации. Реоптимизация геометрич. параметров II проводилась также с учетом 3d-АО серы. Показано, что учет 3d-АО серы влияет на вычисленные геометрич. параметры и на относит. стабильность цис- и транс-изомеров II. Колич. анализ взаимодействий фрагментов и причин конформац. преиму-

X. 1982, 19, 48

ществ в I и II проведен с использованием локализованных МО фрагментов в рамках метода возмущенных МО. Энергии взаимодействий фрагментов представляли в виде суммы энергий стабилизации и дестабилизации, обусловленных различными несвязывающими взаимодействиями в цис- и транс-конформациях, а также энергии кулоновского взаимодействия фрагментов. Для II исследована роль энергий стабилизации, обусловленных взаимодействиями  $3d$ -АО серы, на уменьшение стабильности транс-изомера относительно цис-изомера. И. А. Тополь

$H_3ONO$

1981

196: 189894r Infrared matrix spectra, normal coordinate analysis, and valence force field of six isotopomers of methyl nitrite. Ghosh, Pradip N.; Guenthard, H. H. (Phys. Chem. Lab., ETH Zurich Zent., 8092 Zurich, Switz.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1981, 37A(12), 1055-65 (Eng). IR spectra of the isotopic species  $^{13}CH_3ONO$ ,  $Me^{18}ONO$ ,  $MeO^{15}NO$ , and  $MeON^{18}O$ , isolated in Ar matrixes, are reported. The results together with earlier data on  $MeONO$  were used to derive 22 parameter harmonic valence force fields for both the *cis* and *trans* conformers and assignments are presented for all isotopic species in the 2 conformations. The valence force field is used to propose assignments of *cis*- and *trans*- $CD_3ONO$ . A comparison of force consts. of mols. with C-O, N-O, and N=O fragments and their dependence on conformation and structure is made.

UK chemp  
&  
deampuse





1981

Gupta Abha S.P.K.,  
et al.Зелітрон.  
Строєння.Amer. Miner., 1981,  
66, N5-6, 601-609.(сер.  $Li(OH)_4^{3-}$ ; III)

$\text{NH}_3\text{OH}^+$

1981

$V_0$ ;

/95: 15308s Librational and torsional modes in hydroxylammonium,  $\text{NH}_3\text{OH}^+$ , salts studied by inelastic neutron scattering and infrared spectroscopy. Jayasooriya, Upali A.; Ludman, Clifford J.; Ratcliffe, Christopher I.; Waddington, Thomas C. (Dep. Chem., Univ. Durham, Durham, Engl. DH1 3LE). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1981, 77(2), 287-93 (Eng). The inelastic neutron scattering spectra were obtained of  $\text{NH}_3\text{OHX}$  ( $X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{F}$ ) and  $(\text{NH}_3\text{OH})_2\text{SO}_4$  along with Raman and IR spectra. The 2 librational/torsional modes of the  $\text{NH}_3\text{OH}^+$  ion about the N-O axis were identified and the external barriers to rotation calcd.

C. A. 1981, 95, N2.

$H_2NO$

[Ommuck 12618,

1981

Yingqi M., et al.,

Chem. Phys. Lett.

Chem. Phys. Lett. 1981, 84(2),  
325-332

$\text{HN}_2\text{O}^+$

Оттиск 12246

1981

· 2 Д336. Экспериментальное доказательство существования состояний  $\text{HN}_2\text{O}^+$  с различной реактивностью. Experimental evidence for the existence of states of  $\text{HN}_2\text{O}^+$  with different reactivities. Jones T. T. C., Raouf A. S. M., Birkinshaw K., Twiddy N. D. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1981, 14, № 15, 2713—2718 (англ.)

Do;  
В трубках с газовым потоком исследована реактивность  $\text{HN}_2\text{O}^+$  при комнатной т-ре. Ионы  $\text{HN}_2\text{O}^+$  получались в реакции  $\text{N}_2\text{O}^+ (X^2\Pi) + \text{H}_2 \rightarrow \text{HN}_2\text{O}^+ + \text{H}$ , и, исходя из их различной реактивности в реакциях с  $\text{CH}_4$  и  $\text{NO}$ , авторы установили, что ионы  $\text{HN}_2\text{O}^+$  образуются в виде двух различных компонент, а именно:  $\text{HN}_2\text{O}^{+0}$  и  $\text{HN}_2\text{O}^{+*}$  с соотношением 5:1. Ионы  $\text{HN}_2\text{O}^{+*}$  включают три возможные состояния: колебательно-вращательные.

№ 1982, 18, №2.

щательное, электронно-возбужденное и два изомера, в которых Н присоединен либо к N, либо к O. С использованием результатов ранее проведенных исследований установлено также, что разность внутренней энергии между  $\text{HN}_2\text{O}^{+0}$  и  $\text{HN}_2\text{O}^{+*}$  не превышает 0,76 эВ, а энергия связи протона в  $\text{HN}_2\text{O}^{+*}$  равна  $5,66 \pm 0,09$  эВ (на  $0,28 \pm 0,15$  эВ ниже, чем в  $\text{HN}_2\text{O}^{+0}$ ). И. П. Флакс

H<sub>2</sub>O...MnO<sub>3</sub>

кв. цех.  
паерѐм.

1981.

Lipinski Jozef et al.

Int. J. Quantum Chem.  
1981, 19(5), 891-900.

• (цех (H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, III).

HONO

Comma 12178 | 1981

Ogilvie J.F., et al.

морской  
рыболовства

J. Mol. Street, 1981,

М

75, 255-264.

МТИСК 11673

1981

$4\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Спектр., те., анализ

19 Б759. Исследование методами колебательной спектроскопии соединения  $4\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  в кристаллическом, стеклообразном и жидком состоянии. Подтверждение присутствия триводородтетранитрата оксония. Pham Thi M., Herzog-Cance M. H., Potier A., Potier J. Etude, par spectroscopie de vibration, du composé  $4\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  dans les états cristallisé, vitreux et liquide. Mise en évidence du trihydrogénéotétranitrates d'Oxonium. «J. Raman Spectrosc.», 1981, 11, № 2, 96—107 (франц.; рез. англ.)

Спектр

поглощения

Изучены ИК- и КР (область  $50-4000 \text{ см}^{-1}$ ) спектры поглощения смеси  $4\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (I) и его дейтерированного аналога в крист., стеклообразном ( $T \sim 90 \text{ K}$ ) и жидк. состояниях. Сравнение со спектрами  $\text{HNO}_3$  и смеси  $\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  позволило показать, что кристалл I состоит из структурных единиц  $\text{H}_3\text{O}^+ [\text{NO} \cdot 3\text{HNO}_3]^-$ , в к-рых ион оксония практически свободен  $\nu(\text{OH}) =$

Х 1981 N 19



=3480 и 3385  $\text{см}^{-1}$ ]. В стеклообразных и жидк. образ-  
 цах наряду с  $\text{H}_3\text{O}^+[\text{NO}\cdot 3\text{HNO}_3]^-$  содержатся свобод-  
 ные ассоциации молекул  $\text{H}_2\text{O}\dots\text{HONO}_2$  [ $\nu_{\text{OH}}(\text{H}_2\text{O}) =$   
 $=3550$ ,  $\nu_{\text{OH}}(\text{HNO}_3) = 2930$   $\text{см}^{-1}$ ]. свободные ионные па-  
 ры  $(\text{H}_2\text{OH})^+\dots(\text{ONO}_2)^-$  [ $\nu(\text{OH}) = 2700$ ,  $\nu_1(\text{NO}_3^-) =$   
 $=1030$   $\text{см}^{-1}$ ] и свободные молекулы  $\text{HNO}_3$  [ $\nu(\text{NOH}) =$   
 $=926$   $\text{см}^{-1}$ ]. Ионы  $\text{H}_3\text{O}^+$  определяют кислотность и  
 проводимость р-ров  $\text{HNO}_3$ .

А. В. Бобров

$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1981

17 Б250. Инфракрасный спектр гидрата аммиака: объяснение известного спектра твердой фазы аммиака. Sill G., Fink U., Ferraro J. R. The infrared spectrum of ammonia hydrate; explanation for a reported ammonia phase. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 2, 997—1000 (англ.)

И.К. спектр

С использованием фурье-спектрометра измерены ИК-спектры в области  $4000-250 \text{ см}^{-1}$  паров  $\text{NH}_3$ , осажденных из 3%-ного р-ра в  $\text{H}_2\text{O}$ , находившегося при т-ре  $0^\circ$ , на окошко из KRS-5, охлажденное до 105 К. В ИК-спектре, измеренном сразу же после конденсации паров, наблюдались полосы, характерные для гидрата аммиака  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  и чистых тв.  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2\text{O}$ . При отжиге осажденного слоя до 162 К в области т-ры 146 К характер спектра резко менялся: вместо узкого пика  $1057 \text{ см}^{-1}$ , характерного для не-связанного  $\text{NH}_3$ , появлялись две полосы 1098 и

X. 1981 N 17

1133  $\text{см}^{-1}$ , сильные изменения наблюдались в области 3300, 1600 и 840  $\text{см}^{-1}$ . При охлаждении аннелированного слоя до 95 К спектр уже не менялся. Сделан вывод, что при отжиге происходит образование гидрата, к-рый ошибочно был принят за «кубическую» фазу крист.  $\text{NH}_3$  в работе (Staats P. A., Morgan H. W., J. Chem. Phys., 1959, 31, 554). Показано, что к

различным фазам твердого  $\text{NH}_3$  м. в. отнесены только низкот-рная аморфная фаза ( $\sim 20$  К), метастабильная крист. фаза ( $\sim 80-120$  К) и стабильная кубич. фаза при т-дах выше 120 К.

А. Н. Курский

$\text{NH}_3\text{H}_2\text{O}$

10m meek 14290

1982

Rode B. M., Sagarik K.

КВ. меек.  
рачии

Chem. Phys. Lett.,

1982, 88, N 3, 337 -

341.

NH<sub>2</sub>OH

Ummuck 13557

1982

барбер  
вращенчя

Злобин А. С., Таркент О. М.,

ж. мортан. жемелл,

1982, 27, N3 565-570.

ΔEв

ΔEu

NH<sub>3</sub>/O<sub>2</sub>

1982

23 Б149. Лазерное измерение поглощения OH, NH и NH<sub>2</sub> в пламени NH<sub>3</sub>/O<sub>2</sub>. Определение силы осциллятора для NH<sub>2</sub>. Chou M. S., Dean A. M., Stern D.

Laser absorption measurements on OH, NH, and NH<sub>2</sub> in NH<sub>3</sub>/O<sub>2</sub> flames. Determination of an oscillator strength for NH<sub>2</sub>. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 11, 5334—5340 (англ.)

пламя

Для диагностики радикалов OH (I), NH (II) и NH<sub>2</sub> (III), возникающих при горении аммиака в атмосфере кислорода применялась эксперим. установка, собранная по двухлучевой схеме с использованием перестраиваемого лазера на красителе (ширина линии генерации 0,3 см<sup>-1</sup>) для исследования поглощения вблизи переходов A<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup> ← X<sup>2</sup>Π в I, A<sup>3</sup>Π ← X<sup>3</sup>Σ<sup>-</sup> в II и A<sup>2</sup>A<sub>1</sub> ← X<sup>2</sup>B<sub>1</sub> в III, соотв. Измерение абс. эф. поглощения дало соотношение между конц-ями радикалов при разных эквивалентных топливных отношениях: 1,28; 1,5<sup>л/л</sup>

X. 1982, 19, N23

1,81. Показано, что р-ция  $\text{NH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{H}_2\text{O}$  одинаково хорошо идет как на фронте пламени, так и в его центре. Определена сила осциллятора  $f_i = (2,04 \pm 0,44) \times 10^{-4}$  для  $Q_{1,7}$  колебательной полосы (переход  $(0,9,0) \leftarrow (0,0,0)$ ) в III. Проведенные в I измерения вращательной т-ры показали возможность повышения вращательной энергии на фронте пламени с эквивалентными топливными коэф. 1,28 и 1,50. А. Т. Суходольский



Hm NOHn

1982

теоретическая,  
экспериментальная  
исл

Del Bene Janet E.,  
Frisch Michael J.,  
et al.

J. Phys. Chem., 1982,  
86, N 9, 1529-1535.

●  
(сер. NH<sub>3</sub>; III)



Оммуек 15568

1982

$N_2 - H_2O$

Demontis P; Gamba A;  
et al.,

р-иш

мезинон.

нонрешукара,

ab initio

расиём

Mol. Phys., 1982,  
47, N2, 347-354.



$\text{NH}_2$ ,

Om. 37722

1982

реакция  
 $\text{CO}_2$

Hack W., Horie O., et al.,

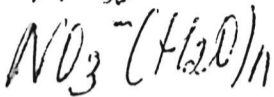
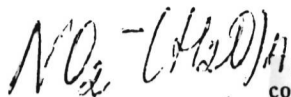
J. Phys. Chem., 1982,

86, N 5, 765-771.

(Кинети-  
ка к

термоди-  
намике)

Determination of the rate  
of the reaction  
of  $\text{NH}_2$  with  $\text{O}_2$



$$n = 1-3$$

геометрия,  
структура,  
ОЕ, расчет

Оттиск 14987 1982

2 Б85. Расчеты неэмпирическим методом самосогласованного поля кластеров  $\text{NO}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n$  и  $\text{NO}_3^-(\text{H}_2\text{O})_n$ . Ab initio self-consistent field calculations of  $\text{NO}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n$  and  $\text{NO}_3^-(\text{H}_2\text{O})_n$  clusters. Howell J. M., Sapse A. M., Singman E., Synder G. «J. Phys. Chem.», 1982, 86, № 13, 2345—2349 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6—31 ГФ выполнены расчеты электронного строения и геометрии 12 кластеров состава  $\text{NO}_2^-(\text{H}_2\text{O})_n$  и  $\text{NO}_3^-(\text{H}_2\text{O})_n$ ,  ~~$n=1-3$~~ . Во всех случаях геометрия молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  была принята экспериментальной, а расстояния  $\text{H}_2\text{O}$ —ион,  $\text{N—O}$  и углы  $\text{ONO}$  оптимизировались. Все рассмотренные структуры можно условно разделить на две категории: 1) структуры, в к-рых каждая молекула  $\text{H}_2\text{O}$  связана двумя  $\text{H}$ -связями с анионом (циклич. структуры) и 2) одной  $\text{H}$ -связью с анионом (линейные структуры). Кроме того, в случае  $\text{NO}_2^-$ -иона рассчитаны структуры, в к-рых атом кислорода молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  ориентирован прямо против атома

X, 1983, 19, n2

азота  $\text{NO}_2^-$ -иона. Для всех систем приведены оптимизированные геометрии, полные энергии, энергии связывания и заряды на атомах. Циклич. структуры найдены более стабильными по сравнению с линейными, а энергия связывания во всех структурах уменьшается с ростом числа молекул воды в гидрате. Связи N—O, участвующие в образовании H-связей, удлиняются, в то время как остальные связи укорачиваются. И. Н. Сенченя

$\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n$  Ommulck 14987 1982

$\text{NO}_3(\text{H}_2\text{O})_n$

$n \leq 3$

197: 12012w Ab initio SCF calculations of  $\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n$  and  $\text{NO}_3(\text{H}_2\text{O})_n$  clusters. Howell, J. M.; Sapse, A. M.; Singman, E.; Snyder, G. (Chem. Dep., City Univ. New York, Brooklyn, NY 11210 USA). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(13), 2345-9 (Eng). Ab initio SCF calcns. are performed on  $\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n$  and  $\text{NO}_3(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 1-3$ ) clusters. Optimized geometries, total energies, binding energies and new at. charges are presented for various structures of the clusters.

inopen.  
paciem

C.A. 1982, 97, N2.

H<sub>2</sub>O: NH<sub>3</sub>

1982

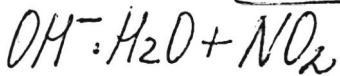
97: 171578b **Complex between water and ammonia.** Nelander, Bengt; Nord, Leif (Chem. Cent., Univ. Lund, S-220 07 Lund, Swed.). *J. Phys. Chem.* 1982, 86(22), 4375-9 (Eng). The 1:1 complex between H<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub> was studied by means of IR spectroscopy in Ar and N matrixes. Water is H (or D) bonded to ammonia. HDO seems to be exclusively D bonded. The intramol. vibrations of one of the mols. in the complex are remarkably sensitive to the isotopic compn. of the other. The complex is strongly perturbed in N as compared to Ar. In Ar, a no. of bands were obsd. in the 650-250-cm<sup>-1</sup> region. A few of these were also obsd. in N. An attempt was made to correlate the complex shifts of  $\nu_2$  of NH<sub>3</sub> with the calcd. heats of formation for a no. of NH<sub>3</sub> complexes.

uk chempr  
&  
uampuse

C.A. 1982, 97, N 20.

[Оммух 15646]

1982



Paulson J.F., Dale  
F.,

неперенос  
серьезные  
практики

J. Chem. Phys., 1982,  
77, N 8, 4006-4008

DM 15779

1982

$(\text{H}_3\text{N}^+\text{OH}_2)^+$

Scheiner J.,

ab initio  
p.c.m.

J. Chem. Phys., 1982,  
77, N 8; 4039-4050.



$H_2NO_2^-$  (ref)

1983

99:168321y Direct observation of the  $H_2NO_2^-$  ion. Bursley, Maurice M.; Cerny, Ronald L.; Pedersen, Lee G.; Gottschalk, Karen E.; Tomer, Kenneth B.; Lehman, Thomas A. (William Rand Kenan, Jr. Lab. Chem., Univ. North Carolina, Chapel Hill, NC 27514 USA). *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1983, (9), 517-18 (Eng). The structure of gaseous  $H_2NO_2$  in the neg. chem. ionization mass spectrum of  $BuNO_3$  was detd. as  $BONHO^-$  by charge-reversal chem.-activation mass spectrometry and 4-31G MO calcs.

см. рисунок

e. A. 1983, 99, N 20

ONH<sub>3</sub>

1983

99: 28265h Ab initio studies on ammonia oxide (ONH<sub>3</sub>) tri-  
fluoroamine oxide (ONF<sub>3</sub>) and trifluoromethoxide anion OCF<sub>3</sub><sup>-</sup>,  
using polarization functions and configuration interaction  
methods. Grein, Friedrich; Lawlor, Lawrence J. (Dep. Chem.,  
Univ. New Brunswick, Fredericton, NB Can. E3B 6E2). *Theor.*  
*Chim. Acta* 1983, 63(2), 161-75 (Eng). SCF geometry optimizations,  
using double-zeta basis sets with polarization functions, either as  
d-orbitals or bond functions, were performed on ONH<sub>3</sub>, ONF<sub>3</sub>, and  
OCF<sub>3</sub><sup>-</sup>. The bonding in these mols. is discussed with the help of  
orbital d. plots and Mulliken population analyses. ONF<sub>3</sub> can be  
explained as donor-acceptor product of O with NF<sub>3</sub>. For OCF<sub>3</sub><sup>-</sup>,  
diffuse functions have also been added to the basis set. The C-F  
distance is predicted to be 1.39 Å, in qual. agreement with the known  
IR spectrum. With the basis set, the NF distance of ONF<sub>3</sub> is too  
short by 0.08 Å at the SCF level. A geometry optimization by the CI  
method gives the NF distance as well as the ON distance in excellent  
agreement with exptl. results.

моп. парем

во мем. парем;

жеприм ебжепа

12

©. A. 1983, 99, N 4

ОНН<sub>3</sub>

1983

11 Д141. Неэмпирические исследования ОНН<sub>3</sub>, ОНF<sub>3</sub> и ОСF<sub>3</sub><sup>-</sup> с использованием поляризационных функций и метода конфигурационного взаимодействия. Ab initio studies on ONH<sub>3</sub>, ONF<sub>3</sub> and OCF<sub>3</sub><sup>-</sup>, using polarization functions and configuration interaction methods. Grein Friedrich, Lawlor Lawrence J. «Theor. chim. acta», 1983, 63, № 2, 161—175 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в двух-экспонентном гауссовом базисе, а также в базисах с учетом поляризационных *d*-ф-ций и ф-ций связи исследовано электронное строение ОНН<sub>3</sub> (I), ОНF<sub>3</sub> (II) и ОСF<sub>3</sub><sup>-</sup> (III). Проведена оптимизация геометрии. Учитывалось взаимодействие большого числа одно- и двукратно возбужденных конфигураций. Обнаружено, что при учете корреляции и увеличении базиса рассчитанные длины связей хорошо согласуются с эксперим. данными, причем для длин связей NF и NO хорошее согласие с эксперим. данными получается только при

геометрия,  
структура

⊗ (12)

р. 1983, 18, N 11

учете корреляции. Приведены карты электронной плотности и проведен анализ заселенностей по Малликену. Атомы O и N в I и O и F в II и III заряжены отрицательно. Заселенности связей и заряды на атомах при введении в базис  $d$ -ф-ций сильно отличаются от случая введения в базис ф-ций связи.

В. Л.



ОНН<sub>3</sub>

1983

19 Б24. Неэмпирическое исследование молекул ОНН<sub>3</sub>, ОНF<sub>3</sub>- и ОCF<sub>3</sub><sup>-</sup> с использованием поляризационных функций и метода конфигурационного взаимодействия. Ab initio studies on ОНН<sub>3</sub>, ОНF<sub>3</sub> and ОCF<sub>3</sub><sup>-</sup>, using polarization functions and configuration interaction methods. Grein Friedrich, Lawlor Lawrence J. «Theor. chim. acta», 1983, 63, № 2, 161—175 (англ.)

расчет геометр.  
структ., м.п.

Методом ССП рассчитаны основные состояния молекул ОНН<sub>3</sub>, ОНF<sub>3</sub> и ОCF<sub>3</sub><sup>-</sup>. Использованы различные варианты базисных наборов: базис 4—31 ГФ, базис (9s5p/4s2p) Хузинаги—Даннинга, базисы, дополненные d-орбиталями, и базисы, дополненные ф-циями на связях. Для расчета ОCF<sub>3</sub><sup>-</sup> в базис введены диффузные ф-ции. Оптимизированы все геометрич. параметры в рамках симметрии С<sub>3v</sub>. Приведены карты плотности для валентных МО. Проведен анализ заселенности по Малликену. Для молекулы ОНН<sub>3</sub> метод ССП с учетом поляризац. функций хорошо воспроизвел эксперим. геометрич. параметры. Для иона ОCF<sub>3</sub><sup>-</sup> предсказаны длины связей R<sub>CO</sub>=1,22 А, R<sub>CF</sub>=1,39 А, угол OCF=116,9°. Для молекулы ОНF<sub>3</sub> геометрич. параметры,

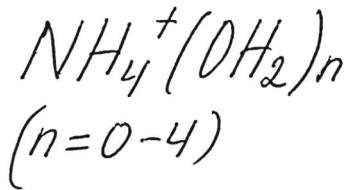
☒ (+2)

X. 1983, 19,  
N 19

согласующиеся с эксперим. данными, получены лишь при использовании метода конфигурац. взаимодействия (КВ). Расчет методом КВ проведен с помощью программы Бюнкера и Пейеримхофф в базисе 5000 конфигураций. Подробно обсуждается влияние поляризац. функций на геометрию молекул и распределение электронной плотности. Показано, что введение *d*-орбиталей и *f*-ций на связях приводит к практически совпадающим геометрич. параметрам. На основе карт плотности МО обсуждается характер связывания в рассматриваемых молекулах. Показано, что  $\text{ONF}_3$  может рассматриваться как продукт донорно-акцепторного взаимодействия O и  $\text{NF}_3$ .

А. А. Сафонов

рен  
вели



1983

Ikuta Shigeru.

номер,  
структ.,  
E, ΔH;

Chem. Phys. Lett.,  
1983, 95, N 6, 604-608.

(сер.  $\text{NH}_4^+$ ; III)

HNDH<sub>2</sub>

1983

Pople John A., Raghavachari  
Krishnan, et al.

Vo, meopem.  
pacem

J. Am. Chem. Soc. 1983,  
105 (21), 6389-99.

(с.р. HNC; III)



$H_3NO$

1983

Pople John A., Raghavachari  
Krishnan, et al.

Vo, meopem.  
paczem

J. Am. Chem. Soc. 1983,  
105(21), 6389-99.

(Ser. HNC; III)

$(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$

1983

15 Б95. Энергетика электронной реорганизации при переносе протона в  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$ . Energetics and electronic rearrangements of proton transfer in  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$ . Scheiner S. «Int. J. Quantum. Chem.», 1983, 23, № 2; 753—764 (англ.)

расчет М. П., И.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базе 4—31 ГФ исследованы профили потенциальной энергии Н-связанной системы  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$  вдоль координаты  $(r)$  мостикового протона при разных расстояниях  $R$  (N...O). Значения  $R$  варьировали в интервале от 2,664 Å (равновесное расстояние) до 3,10 Å. При  $R \leq 2,8$  Å обнаружена одна яма, соотв-щая структуре NH—O. Увеличение  $R$  приводит к появлению второй ямы, к-рая характеризует структуру N....HO. При  $R = 2,95$  Å второй минимум расположен на  $\sim 26$  ккал/моль выше первого. Исследована взаимосвязь между

перех

Х. 1983, 19, N 15

величиной барьера вдоль координаты  $r$  и отклонения от линейности Н-связи, описываемое углами  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  между линией N...O и локальными осями симметрии молекулы  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2\text{O}$ . Согласно полученным результатам, форма потенциального профиля заметно зависит от  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , причем угловая деформация приводит к увеличению соотв-щих барьеров. Путем построения карт распределения электронной плотности получена важная информация, позволяющая судить об энергетике переноса протона. Показано, что молекула-акцептор протона теряет электронную плотность при перемещении к ней мостикового атома Н. Величина теряемого заряда хорошо коррелирует с высотой энергетич. барьера вдоль  $r$ . Для связей  $\text{OH} \rightarrow \text{N}$ ,  $\text{NH} \rightarrow \text{N}$ ,  $\text{OH} \rightarrow \text{O}$  и  $\text{NH} \rightarrow \text{O}$  величина барьера, отсчитанная от более глубокого минимума, растет при переходе от первой к последней: 2,7; 11,4; 16,9 и 29,1 ккал/моль [при  $R(\text{XY}) = 2,95 \text{ \AA}$ , где X и Y — тяжелые атомы]. В том же ряду падает величина переносимого отрицат. заряда от молекулы протон-акцептора: 0,164; 0,143; 0,112 и 0,083  $e$ . Сделан вывод, что перенос электронной плотности является важным фактором в стабилизации конфигурации с более высоким минимумом. Э. Герман



от. 16636 1983

19 Б131. Изучение методом молекулярных орбиталей переноса протона в  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$ . Molecular orbital study of proton transfer in  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$ . Scheiner Steve, Harding Lawrence B. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 7, 1145—1153 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО проведены расчеты поверхности потенциальной энергии системы  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$  вдоль координаты ( $r$ ) центрального протона и расстояния ( $R$ ) между N и O. Исследованы гауссовы базисы: 4—31 ГФ и двухэкспонентный, дополненный поляризац. ф-циями (ДЭ+П). Вклад электронной корреляции учтен обобщенным методом валентных связей (ОВС) и методом поляризац. конфигурационного взаимодействия (ПКВ). Метод ОВС учитывает внутривалентную корреляцию, а ПКВ — корреляцию электронов разных пар. Потенциальные кривые вдоль  $r$  вычислены при  $R$ , равных 2,5 2,709 (равновесное расстояние), 2,95 и 3,2 А. При  $R \leq 2,709$  А кривая по  $r$  содержит один минимум; при больших значениях  $R$  профиль имеет две симметрично расположенные ямы, разделенные барьером, отвечающие локализации протона около O и

расчет  
геометр.,  
структур,  
ΔH

х. 1983, 19,  
N 19

N. Энергия конфигурации  $\text{H}_3\text{NH}\dots\text{OH}_2$  значительно ниже энергии конфигурации  $\text{H}_3\text{N}\dots\text{HOH}_2$  в соответствии с большим сродством N к протону. Расширение базиса приводит к повышению барьера вдоль  $r$ , а учет корреляции электронов — к понижению. При  $R=3,2 \text{ \AA}$  величина барьера  $\Delta E$  вдоль  $r$  при перемещении H от O к N составляет 12,2 и 16,0 ккал/моль, соответственно в базисах 4—31 и ДЭ+П. С учетом корреляции электронов (ПЭ+П/ОВС) и  $\Delta E$  становится равным 13,8 ккал/моль, а расчет методом ПКВ понижает  $\Delta E$  до 8,5 ккал/моль. Энергии образования равновесных N-комплексов и равновесные значения  $R$ , полученные в разных базисах равны: 27,6 и 2,69 (4—31), 21,2 и 2,78 (ДЭ+П), 19,4 и 2,83 (ДЭ+П)/(ОВС), 23,3 ккал/моль и 2,77  $\text{ \AA}$  (ДЭ+П)/(ПКВ). Из сопоставления энергетич. профилей при разных  $R$  сделан вывод, что в газовой фазе конфигурация  $\text{H}_3\text{N}\dots\text{HOH}_2$  не стабильна и N-комплексы находятся преимущественно в виде  $\text{H}_3\text{NH}\dots\text{OH}_2$ .

Э. Герман

$(H_3NHOH_2)^+$

[Ommuck 16636] 1983

98: 132599k Molecular orbital study of proton transfer in  $(H_3NHOH_2)^+$ . Scheiner, Steve; Harding, Lawrence B. (Dep. Chem. Biochem., South. Illinois Univ., Carbondale, IL 62901 USA). *J. Phys. Chem.* 1983, 87(7), 1145-53 (Eng). Ab initio MO methods were used to study transfer of the central  $H^+$  in the asym.  $(H_3NHOH_2)^+$  system. Calcns. were performed at the Hartree-Fock level with basis sets of split-valence (4-31G) and double- $\zeta$  plus polarization function (DZP) quality. The effects of electron correlation upon the transfer potentials were calcd. via the generalized valence bond (GVB) and polarization CI (POL-CI) techniques. The barrier to proton transfer between  $NH_3$  and  $OH_2$  is obsd. to heighten as the distance between the latter 2 mols. is increased. At the equil.  $R(NO)$  H-bond length, the transfer potential contains a single min.,  $(H_3NH...OH_2)^+$ , in

моперм-  
нарім  
барера  
переміщен  $H^+$

C. A. 1983, 98, N 16.

which the central proton is more closely assocd. with  $\text{NH}_3$ . In both the rapid and adiabatic models of proton transfer, there is no energy barrier to decay of  $(\text{H}_3\text{N}\dots\text{OH}_2)^+$  to the equil.  $(\text{H}_3\text{NH}\dots\text{OH}_2)^+$  structure. While all the calcns. agree on the above points, there are some notable quant. discrepancies between the various methods. Enlargement of the basis set at the Hartree-Fock level results in higher transfer barriers while subsequent inclusion of electron correlation (POL-CI) leads to barrier redns. The GVB procedure, with its partial treatment of correlation, produces changes in the potentials opposite to those obsd. for the more complete POL-CI treatment.



1983

(98: 96003a Energetics and electronic rearrangements of proton transfer in (hydrated ammonia  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$ ). Scheiner, Steve (Dep. Chem. Biochem., South. Illinois Univ., Carbondale, IL 62901 USA). *Int. J. Quantum Chem.* 1983, 23(2), 753-64 (Eng). Proton transfer between N and O in the hydrogen-bonded system  $(\text{H}_3\text{NHOH}_2)^+$  is studied by ab initio MO methods. Potential energy curves are calcd. at the Hartree-Fock level using the 4-31G basis set for H bond lengths  $R(\text{NO})$  varying from the equil. value of 2.664 to 3.10 Å. Short H bonds are assocd. with asym. single-well potentials in which the min. corresponds to the NH-O configuration. For longer  $R(\text{NO})$  sepns., the potential is of double-well form, including both N-HO and NH-O as min. The height of the energy barrier to proton transfer is sensitive to both stretches and bends of the hydrogen bond. Continuous changes in the electron d. are monitored at various stages of proton transfer via d. difference maps and Mulliken population analyses. The initial loss of d. from the proton-accepting mol. during the first half of the transfer is accelerated during the second half. A correlation is drawn between the energetics of transform in a no. of systems and the net charge lost by the proton-acceptor group.

meopen.

pacem

C.A. 1983, 98, N 12



$\text{OH}^* + \text{N}_2$

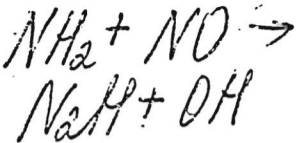
1983

Tabarés F. L., Gon-  
zález Ureña A.

константа  
тушения

J. Photochem., 1983,  
21, N4, 281-289.

●  
(ссылка:  $\text{CH} + \text{O}_2$ ; III)



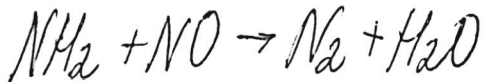
1984

4 Д224. Неэмпирическое изучение методом КВ реакции между  $\text{NH}_2$  и  $\text{NO}$ . Ab initio CI study of the reaction between  $\text{NH}_2$  and  $\text{NO}$ . Abou-Rachid Hakima, Pouchan Claude, Chaillet Max. «Chem. Phys.», 1984, 90, № 3, 243—255 (англ.)

Методом самосогласованного поля с последующим учетом электронной корреляции в приближении КВ в двухэкспонентном базисе проделаны расчеты энергетических и структурных параметров реагентов ( $\text{NH}_2$ ,  $\text{NO}$ ), продуктов ( $\text{N}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{N}_2\text{H}$ ,  $\text{OH}$ ) и ряда структур переходных состояний (для нескольких путей реакции). Получено, что образование в результате реакции молекулярного водорода является маловероятным, в то же время, с точки зрения термодинамики, реакция  $\text{NH}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2\text{H} + \text{OH}$  вполне возможна. На основании теории активированного комплекса оценена константа скорости этой реакции и определена ее температурная зависимость. Отмечено, что полученные результаты хорошо согласуются с эксперим. данными. Библ. 45.

А. И. Колесников

Ф. 1985, 18, 24.



1984

5 Б1052. Исследование реакции между  $\text{NH}_2$  и  $\text{NO}$  неэмпирическим методом КВ. Ab initio CI study of the reaction between  $\text{NH}_2$  and  $\text{NO}$ . Abou-Rachid Hakima, Pouchan Claude, Chaillet Max. «Chem. Phys.», 1984, 90, № 3, 243—255 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 4—31 ГФ с учетом КВ и варьированием всех независимых степеней свободы рассчитаны реагенты, продукты, переходные состояния р-ции  $\text{NH}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$  и возможные промежут. комплексы оксидимид  $\text{HNN-}$

X. 1985, 19, N5

in. «Mol. Phys.», 1984, 53, № 1, 257—264 (англ.)  
Из колебательных спектров молекул  $\text{CFHCl}_2$  и  $\text{CFH}(\text{CF}_3)_2$ , измеренных в диапазоне  $1200—12000 \text{ см}^{-1}$ , получены параметры модельных гамильтонианов, учитывающих ангармонич. взаимодействие валентного и двух деф. кол. группы  $\text{CH}$ , к-рое приводит к появлению в спектре полиад Ферми и Дарлинга—Деннисона. Эти гамильтонианы включают по 11 параметров и воспроизводят спектры с макс. погрешностью 4,3 и 9,8  $\text{см}^{-1}$  соотв. С использованием найденных гамильтонианов вычислена временная эволюция заселенности группы резонирующих состояний. Г. Г. Дьяченко

$\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$

Om. 19696

1984

101: 198501] An ab initio potential-energy function for aqua-ammonium and its use in the study of ionic coordination in solution. Boehm, Hans Joachim; McDonald, Ian R. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EP). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1984, 80(7), 887-98 (Eng). Ab initio quantum-mech. calcns. with a double zeta plus polarization basis set were carried out for the complex  $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$ . The calcd. dimer energies were fitted to an anal. form based on atom-atom potentials and a point-charge representation of the electrostatic interactions. The fitted potential was used in a mol.-dynamics simulation of  $[\text{NH}_4^+]_{\text{aq}}$  with results for the structure that are in fair agreement with those obtained exptl. by neutron-diffraction methods. Examin. of the atom-atom distribution functions shows that the first coordination shell of the ion contains  $\sim 13$   $\text{H}_2\text{O}$  mols.; 4 of these are tetrahedrally coordinated to the ion in a manner which resembles the packing of  $\text{H}_2\text{O}$  mols. in the pure liq.

op-usc NOMENCL.

Иеруну,

ab initio  
pacrim

C.A. 1984, 101, N 22

$\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$

От. 19696 1984

23 Б1096. Неэмпирический расчет поверхности потенциальной энергии системы  $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  и его использование для изучения координации ионов в растворе. An Ab Initio potential-energy function for  $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  and its use in the study of ionic coordination in solution. Böhm Hans-Joachim, McDonald Ian R. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 2, 1984, 80, 887—898 (англ.)

расчет по -  
верхн. потенц.  
энергии

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в сгруппированном двухэкспонентом гауссовом базисе, дополненном поляризац. функциями, проведены расчеты поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) димера  $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  вдоль координаты N—O для 5 различных ориентаций  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{H}_2\text{O}$ . Показано, что наиболее стабильной является конфигурация димера, в которой дипольный момент  $\text{H}_2\text{O}$  направлен вдоль оси  $C_3$  иона  $\text{NH}_4^+$ . Неэмпирическая ППЭ аппроксимирована аналитич. кривой (сконструированной на основе модельных

X. 1984, 19, N 23

атом—атомных ПТ и на представлении зарядовых распределений обеих молекул совокупностью точечных зарядов), параметры к-рой найдены путем подгонки. Полученная таким образом потенциальная функция использована для численного моделирования водн. р-ра аммиака в рамках метода молек. динамики. Ур-ния движения решены для системы из 125 молекул  $H_2O$  и одного иона  $NH_4^+$ , заключенных в кубе с длиной стороны 15,556А. Вычисленное значение коэф. диффузии иона и структура водн. р-ра находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Первая координац. сфера иона, определенная через расстояния N—O, содержит 13 молекул  $H_2O$ . Из них 4 расположены почти тетраэдрически, образуя Н-связи, подобные найденным у чистой воды. Ориентации др. молекул  $H_2O$  в пределах первой координац. сферы сравнительно слабо зависят от наличия иона. Э. Герман

$\text{NO}_2^- \cdot \text{H}_2\text{O}_2$

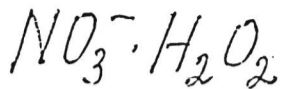
1984

Böhringer H., Fahey D.W.,  
et al.

J. Chem. Phys., 1984,  
81, n6, 2805-2810.

(see  $\text{Cl}^- \cdot \text{SO}_2$ ; III)





1984

Böhninger H., Fahey D. W.,  
et al.

J. Chem. Phys., 1984,  
81, N6, 2805-2810.

( $\text{Cu} \cdot \text{Cl}^- \cdot \text{SO}_2$ ; III)

$(\text{H}_2\text{O})_n \cdot \text{N}_2$

Om. 19037

1984

100: 145217u A theoretical study of the interaction of diatomic nitrogen with water molecules. Water  $(\text{H}_2\text{O})_n$ : diatomic nitrogen,  $n = 1-8$ . Curtiss, L. A.; Eisgruber, C. L. (Chem. Technol. Div., Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1984, 80(5), 2022-8 (Eng). An initio MO calcns. including correlation energy were carried out on the interaction of a single  $\text{H}_2\text{O}$  mol. with  $\text{N}_2$ . The potential energy surface for  $\text{H}_2\text{O}:\text{N}_2$  has a min. corresponding to a  $\text{HOH}\dots\text{N}_2$  structure with a weak ( $<2$  kcal mol $^{-1}$ ) H bond. A 2nd, less stable, configuration corresponding to a  $\text{H}_2\text{O}\dots\text{N}_2$  structure with  $\text{N}_2$  bonded side-on to the O of  $\text{H}_2\text{O}$  is either a min. or a saddle point in the potential energy surface depending on the level of calcn. The min. STO-3G basis set was used to investigate the interaction of up to eight  $\text{H}_2\text{O}$  mols. with  $\text{N}_2$ . Two types of clusters, one cong. only  $\text{HOH}\dots\text{N}_2$  interactions and the other contg. both  $\text{HOH}\dots\text{N}_2$  and  $\text{H}_2\text{O}\dots\text{N}_2$  interactions, were investigated for  $[\text{N}_2:(\text{H}_2\text{O})_n, n = 2-8]$ .

meop. paerem



C.A. 1984; 100, N18

$(\text{H}_2\text{O})_n : \text{N}_2$

$n = 1 \div 8$

геом., стр.

ср. 1984, 18, № 9

Ом. 19037

1984

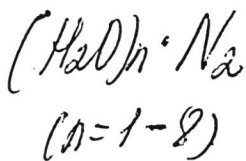
9 Д61. Теоретическое изучение взаимодействия  $\text{N}_2$  с молекулами воды.  $(\text{H}_2\text{O})_n : \text{N}_2$ ,  $n=1 \div 8$ . A theoretical study of the interaction of  $\text{N}_2$  with water molecules.  $(\text{H}_2\text{O})_n : \text{N}_2$ ,  $n=1-8$ . Curtiss L. A., Eisgruber C. L. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 5, 2022—2028 (англ.)

Методом Хартри—Фока с последующим учетом электронной корреляции методом многочастичной теории возмущений третьего порядка в варианте Меллера—Плессета рассчитана поверхность потенц. энергии (ППЭ) комплекса  $\text{H}_2\text{O} : \text{N}_2$ , а также проведена оптимизация структур кластеров  $(\text{H}_2\text{O})_n : \text{N}_2$  ( $n=2 \div 8$ ). Расчет  $\text{H}_2\text{O} : \text{N}_2$  выполнен с использованием трех базисных наборов орбиталей гауссового типа: STO-3ГФ, 4-31ГФ и 6-31ГФ\*, при этом рассчитывались две структуры,

рныл  


соответствующие разным типам взаимодействия молекулы азота с молекулой воды. Обнаружено, что на ППЭ комплекса  $\text{H}_2\text{O}:\text{N}_2$  имеется неглубокий минимум ( $< 2$  ккал/моль), соответствующий структуре  $\text{HOH}\cdots\text{N}_2$  (I) с водородной связью, а структуре  $\text{H}_2\text{O}\cdots\text{N}_2$  (II) с связью  $\text{N}_2$  с атомом O отвечает на ППЭ либо минимум (для базиса СТО-3ГФ), либо седловая точка (для базисов 4-31ГФ и 6-31ГФ\*). Оптимизированные геометрии структур I и II, найденные для комплекса  $\text{H}_2\text{O}:\text{N}_2$ , были использованы в расчетах кластеров  $(\text{H}_2\text{O})_n:\text{N}_2$ , выполненных в минимальном базисе СТО-3ГФ. Найденно, что более стабильными являются кластеры, в которых присутствуют взаимодействия, отвечающие как структуре I, так и структуре II (при  $n \leq 6$ ). Для  $n=7$  не найдено стабильного кластера, а для  $n=8$  получено, что наиболее стабильным является кластер, в котором имеются только взаимодействия с водородной связью. Сделан вывод о том, что для построения корректной модели растворения  $\text{N}_2$  в воде необходимо учитывать взаимодействия обоих типов.

А. И. Колесников



DM. 19037 1984

17 Б1121. Теоретическое изучение взаимодействия  $N_2$  с молекулами воды. Комплекс  $(H_2O)_n \cdot N_2$  ( $n=1-8$ ). A theoretical study of the interaction of  $N_2$  with water molecules.  $(H_2O)_n \cdot N_2$ ,  $n=1-8$ . Curtiss L. A., Eisgruber C. L. «J. Chem. Phys.», 1984, 80, № 5, 2022—2028 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в разных гауссовых базисах проведены расчеты поверхности потенциальной энергии, характеризующей взаимодействие между  $H_2O$  и  $N_2$ , расположенными в одной плоскости. Варьировались: расстояние  $R$  между центром (А) молекулы  $N_2$  и атомом О (от 2,5 до 5,0 А), угол  $\beta$  между линиями  $N-N$  и  $A-O$  (от 0 до  $90^\circ$ ) и угол  $\theta$  между  $AO$  и биссектрисой угла  $HOH$  (от 0 до  $90^\circ$ ). Согласно расчету в базисе ОСТ-3ГФ потенциальная Пв комплекса  $H_2O \cdot N_2$  (I) имеет два минимума, разделенные барьером  $\sim 0,3$  ккал/моль. Более глубокому минимуму (энергия стабилизации  $\Delta E = -0,87$  ккал/моль) соответ-

расчет геометрии,  
структуры,  
потенциальной поверхности

X. 1984, 19, N 17

ствуется Н-связанная структура  $\text{НОН}\dots\text{N}_2$  ( $R \sim 4 \text{ \AA}$ ,  $\beta \sim 5^\circ$ ,  $\Theta \sim 40^\circ$ ). Другая стабильная конфигурация  $\text{H}_2\text{O}\dots\text{N}_2$  характеризуется параметрами  $\Delta E = -0,7$  ккал/моль,  $R \sim 3 \text{ \AA}$ ,  $\beta \sim 80^\circ$ ,  $\Theta \sim 162^\circ$ . Согласно расчету в базисе 4—31 ГФ потенциальная Пв I имеет только один минимум ( $\Delta E = -1,74$  ккал/моль,  $R \sim 3,87 \text{ \AA}$ ,  $\beta \sim 4^\circ$ ,  $\Theta \sim 50^\circ$ ), соотв. Н-связанной структуре и одну седловую точку ( $R \sim 3,2 \text{ \AA}$ ,  $\beta \sim 90^\circ$ ,  $\Theta \sim 180^\circ$ ). Показано, что значит. вклад в  $\Delta E$  вносит энергия корреляции электронов ( $\sim 70\text{—}80\%$  в базисе 6—31 ГФ\* по теории возмущений 3-го порядка Меллера—Плессета). Исследовано влияние на  $\Delta E$  суперпозиц. ошибки базисного набора. В базисе ОСТ-3ГФ проведены расчеты кластеров  $\text{N}_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 2\text{—}8$ ) с Н-связями и со структурами, в которых  $\text{H}_2\text{O}$  ориентированы к  $\text{N}_2$  атомом О. Получена оценка энергии гидратации  $\text{N}_2$ .

Э. Герман

$\text{OH}^- \dots \text{HNO}_3$

1984

100: 162045d Molecular orbital study of atmospherically important species. Deakyne, Carol A. (Dep. Chem., Coll. Holy Cross, Worcester, MA USA). Report 1983, AFOSR-TR-83-0803; Order No. AD-A133656, 39 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1984, 84(3), 63. For the model complex  $\text{OH}^- \text{HNO}_3$  (I), ab-initio MO theory was used to calc. the optimum structure, adiabatic electron affinity, bond dissocn. energy, and charge distribution. A study of I and a series of simpler mols. and ions, which contain similar types of bonds and whose structures and adiabatic electron affinities are known, was done to find the most economical basis set that yields reliable results. The other mols. and ions considered were  $\text{OH}$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{NH}$ ,  $\text{NH}^-$ ,  $\text{NH}_2$ ,  $\text{NH}_2^-$ ,  $\text{OOH}$ ,  $\text{OOH}^-$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{OH} \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HNO}_3$ , and  $\text{HNO}_3^-$ . The accuracy of the various basis sets was assessed in calcg. energy changes for reactions involving neg. ions. Once the  $\text{HNO}_3^-$  ion is formed, it breaks down via electron detachment with dissocn. into  $\text{NO}_2^-$  and  $\text{OH}$  around interaction energies of 0.8 eV. The dissocn. of  $\text{HNO}_3^-$  into  $\text{OH}^-$  and  $\text{NO}_2$  is a less likely loss process.

номеру. номеру.  
спукупа,  
Ас, до, меор.  
рацим

C.A. 1984, 100, N20

$H_3O^+ \cdot N_2$

(DM. 20763)

1984

Jones W.H., Mariani R.D.,  
et al.,

meop.  
praerem

Chem. Phys. Lett., 1984,  
108, N6, 602-608.



O-N-OH<sub>2</sub>

1984

15 Б1095. Неэмпирический расчет протонирования азотистой кислоты и образования реагента NO<sup>+</sup>. Protonation of nitrous acid and formation of the nitrosating agent NO<sup>+</sup>: an Ab initio Study. Nguyen Minh-Tho, Hegarty Anthony F. «J. Chem. Soc. Perkin Trans.», 1984, Pt2, № 12, 2037—2041 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в гауссовых базисах OCT-3ГФ, 3-21ГФ, 4-3ГФ и 6-31ГФ проведены расчеты цис- и транс-изомеров азотистой к-ты HONO с оптимизацией всех геометрич. параметров. Найдено, что разность  $\Delta E$  энергий транс- и цис-изомеров пренебрежимо мала ( $|\Delta E| \leq 2$  ккал/моль), причем ее знак зависит от типа базиса. Учет поляризац. функций (при оптимизации геометрии в базисах OCT-3ГФ, 3-21ГФ и 4-31ГФ) приводит к большей стабильности цис-изомера. Рассмотрены 8 разных структур протонированной формы азотистой к-ты. Показано (расчеты в

геометр.,  
структура,  
Цо, До

X. 1985, 19, N 15

базисах 3—21ГФ/3—21ГФ и 6—31ГФ<sup>xx</sup>/3—21ГФ), что наибольшей стабильностью обладает плоская структура, O—N—OH<sub>2</sub> (I), в которой Н<sup>+</sup> присоединен к гидроксильному кислороду. Эта структура характеризуется необычно длинной связью N—O (1,57 Å) и больше похожа на комплекс между NO<sup>+</sup> и H<sub>2</sub>O. Барьер вращения вокруг связи N—O(H<sub>2</sub>) ≤ 1 ккал/моль. Место протонирования может быть корректно предсказано из расчета электростатич. Пт. Вычисленное значение энергии диссоциации I на NO<sup>+</sup> и H<sub>2</sub>O составляет 18,2 ккал/моль (базис 6—31ГФ<sup>xx</sup>/3—21 ГФ).

Э. Герман



$\text{NO}^+(\text{H}_2\text{O})_n$

1984

10 Д172. Неэмпирическое исследование ступенчатой гидратации  $\text{NO}^+$ . Ab initio study of the stepwise hydration of  $\text{NO}^+$ . Pullman Alberte, Ranganathan Shoba. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 107, № 2, 107—111 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в расширенном базисе гауссовых ф-ций с учетом поляризационных ф-ций и с учетом дисперсионной энергии исследовано электронное строение гидратов  $\text{NO}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ,  $n = 1-4$ . Для  $n=1$  оптимальной является структура с расстоянием  $\text{N}-\text{O}(\text{R})$  2,212 А, углом  $\text{O}-\text{N}-\text{O}$  105° и энергией связи 21,92 ккал/моль, что за вычетом энергии нулевых колебаний (1,58 ккал/моль, также рассчитанной авторами) приводит к значению 20,34, хорошо согласующемуся с эксперим. величинами (19,6 и 18,5). Перенос электронной плотности на  $\text{H}_2\text{O}$  составляет лишь 0,060. Для полигидратов рассмотрено 7 структур с расположением  $\text{H}_2\text{O}$  как в первой, так и во второй

Электронное строение

ср. 1984, 18, N 10

гидратной оболочке. Вторая молекула  $\text{H}_2\text{O}$  присоединяется, образуя структуру симметрии  $C_{2v}$  с расположением  $\text{H}_2\text{O}$  симметрично относительно связи  $\text{N}-\text{O}$ . Третья молекула  $\text{H}_2\text{O}$  присоединяется с образованием аналогичной структуры симметрии  $C_{3v}$ , а структуры с ее присоединением к одной из двух уже имеющих в комплексе молекул  $\text{H}_2\text{O}$  на 4 ккал/моль менее выгодны. В случае  $n=4$  близки по энергии структура симметрии  $C_{4v}$  (все 4 молекулы в первой гидратной оболочке) и структура с присоединением четвертой молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  к одной из имеющих в комплексе в качестве акцептора протона. Тот факт, что структура с  $n=4$  не наблюдается в эксперименте, объясняется тем, что она легко переходит в гидратированные  $\text{HNO}_2$  и  $\text{H}_3\text{O}^+$ . Библ. 28.

В. Л. Лебедев



$\text{NO}^+ - \text{H}_2\text{O}$

1984

ab initio  
paper

101:60457t Ab initio study of the stepwise hydration of nitrosyl ( $\text{NO}^+$ ). Pullman, Alberte; Ranganathan, Shoba (Lab. Biochim. Theor., Inst. Biol. Phys.-Chim., 75005 Paris, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 107(2), 107-11 (Eng). The structure of  $\text{NO}^+ - \text{H}_2\text{O}$  is detd. by ab initio calcs., in an extended polarized basis set supplemented by the dispersion energy, to be an angular adduct. The hydration energy of 21.92 kcal/mol compares well with the exptl. value cor. for zero-point energy. The structure of the successive hydrates up to  $n = 4$  are studied in an appropriate smaller basis and provide an explanation for the ease of formation of  $\text{HNO}_2$  and  $\text{H}_3\text{O}^+$  in the atm. at the tetrahydrate level.

C.A. 1984, 101, N8

HOO-NO<sub>2</sub>

1984

102: 32575g Theoretical study of electronic and geometric structure of a pernitric acid molecule. Shibaev, A. Yu.; Grigor'eva, I. V.; Puzanov, Yu. V.; Orechkina, N. B. (Gos. Inst. Prikl. Khim., Leningrad, USSR). Zh. Strukt. Khim. 1984, 25(5), 150-2 (Russ). The electronic and geometric structure of HOO-NO<sub>2</sub> were calcd. by SCF MO LCAO method by using STO-3G basis and by MINDO/3 method. The most stable configuration corresponds to HO x ON dihedral angle ~120°. The heat of formation and the rotational barrier are calcd. Analogous calcs. for similar compds. of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and HONO<sub>2</sub> are presented.

теор. расчет,

эксп. и теор.

методы,

д-р А. В. Орепкина

С. А. 1985, 102, N 4.



10 Д167. Образование кластеров между молекулами  $\text{NO}_2^-$  и азотистой кислоты: экспериментальное исследование и рассмотрение неэмпирическим методом МО. Clustering of  $\text{NO}_2^-$  with nitrous acid molecules: experimental and ab initio MO studies. Włodek S., Wincel H. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 106, № 5, 460—466 (англ.)

В масс-спектрометре высокого давления при температурах от 240 до 350 К исследовано газофазное равновесие  $\text{NO}_2^- (\text{HONO})_{n-1} + \text{HONO} \rightleftharpoons \text{NO}_2^- (\text{HONO})_n$ . Получены значения измерения энтальпии  $-31$ ,  $-21,6$  и  $-20,3$  ккал/моль для  $n=1, 2$  и  $3$  соответственно. Электронное строение  $\text{NO}_2^-$  транс HONO и их комплекса исследовано неэмпирич. методом ССП МО ЛКАО. Используются базисы гауссовых ф-ций  $7s3p/3s$ , сгруппиро-

ф. 1984, 18, N10

ванный в минимальный, и  $9s5p/4s$ , сгруппированный в двухэкспонентный, к которому добавлены диффузные  $s$ - и  $p$ -ф-ции для атома N и  $p$ -ф-ции для атома O. Оптимальной для комплекса найдена структура с линейной водородной связью  $O \dots H-O$  и трансконфигурацией обеих группировок  $O-N-O-H$ . Анализ карты молекулярного электростатич. потенциала для комплекса показал, что присоединение дополнительных молекул HONO должно происходить к атомам O фрагмента  $NO_2^-$ , а не к уже присоединившейся молекуле HONO, а затем должна образовываться вторая сольватная оболочка. Библ. 28.

В. Л. Лебедев



$\text{NH}_2\text{NO}$

Оттук 21581

1985

Abourachid H., Pou-  
Chan C.,

9. Mol. Street; 1985,

121, 299-304.

колюба  
гастомт,  
геометр,  
гиперон-  
момент  
сил-пост.

$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1985

Dyke T.R.,

Nibler J.W.

X Int. Symp. Mol.

o.n.

Beams, Cannes, June  
3-7, 1985. S.L., [1985],

VI - X1 / VI - X3.

(see.  $(\text{H}_2\text{O})_2$ ; III)

$\text{NH}_3 - \text{N}_2\text{O}$

1985

Fraser G. T.,  
Nelson D. D., Jr.,  
et al.

u. n.

J. Chem. Phys., 1985,  
82, N 6, 2535-2546.

(see  $\text{NH}_3 - \text{HCCH}$ ; III)

$N^{++} - H_2O$


1985

Bounds D. G.

Mol. Phys., 1985, 54, N 6,

расчет  
спектры -  
PL

1335-1355.

(См.   $Na^+ - H_2O$ ; III)

HO-NH<sub>2</sub>

1985

Dannenberg J. J.,  
Rayer J. C., et al.

Do;

THEOCHEM 1985, 24

(3-4), 343-59.

(see  $\bullet$  M<sub>2</sub>; III)

1985

$H_2O \cdot HNO$

$HNO \cdot H_2O$

$HON \cdot H_2O$

ab initio  
расчет  
стабильности.

104: 116409k Ab initio study on the stability and properties of dimers:  $H_2O-HNO$ ,  $HNO-H_2O$ , and  $HON-H_2O$ . Espinosa, J.; Tolosa, S.; Olivares del Valle, F. J. (Fac. Cienc., Univ. Extremadura, Badajoz, Spain). *Acta Cient. Compostelana* 1985, 22(1), 47-63 (Span). A RHF (RHF)-SCF-LCAO-MO method was used to calc. properties of dimers that can be formed with HNO and  $H_2O$  via H bonds. Stability and energetic, geometric, and charge-distribution properties were considered. The charge distribution was analyzed in terms of the variational components for the most stable dimer. A stability value of 6.46 kcal/mol was detd. for the  $H_2O-HNO$  dimer.

C. A. 1986, 104, N 14.

$\text{NH}_3 \cdot \text{N}_2\text{O}$

DM. 23920

1985

104:26305u The rotational spectrum, barrier to internal rotation, and structure of ammonia-nitrous oxide complex. Fraser, G. T.; Nelson, D. D., Jr.; Gerfen, G. J.; Klemperer, W. (Dep. Chem., Harvard Univ., Cambridge, MA 02138 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(11), 5442-9 (Eng). The rotational spectrum of  $\text{NH}_3\text{-N}_2\text{O}$  was obsd. by the mol. beam elec. resonance method. The spectrum is characteristic of a T-shaped complex in which the N of the  $\text{NH}_3$  subunit is directed toward the  $\text{N}_2\text{O}$  subunit. The  $\text{NH}_3$  unit exhibits nearly free internal rotation about its  $C_3$  axis. The A internal rotor state transitions were fit to Watson's asym. top Hamiltonian and the following spectroscopic consts. were detd.:  $A$  (MHz) = 12,722.5(5),  $\delta_K$  (MHz) = 0.22(2),  $B$  (MHz) = 4083.5(2),  $\delta_J$  (MHz) = 0.007(1),  $C$  (MHz) = 3070.8(2),  $\Delta_K$  (MHz) = -0.3(2),  $\Delta_J$  (MHz) = 0.016(9),  $\Delta_{JK}$  (MHz) = 0.32(3),  $\mu_a$ (D) = 1.514(9),  $\mu_b$ (D) = 0.09(9). For the E internal rotor state, the rotational consts.  $A$  [12,743(64) MHz],  $B$  [4077.1(12) MHz], and  $C$  [3069.9(9) MHz] were detd., as well as the height of the barrier to internal rotation,  $V_3$  [12.5(25)  $\text{cm}^{-1}$ ]. The distance between the N of the  $\text{NH}_3$  to the center of mass of  $\text{N}_2\text{O}$  is 3.088 Å. The angle between the  $C_3$  axis of  $\text{NH}_3$  and the line joining the centers of mass of the  $\text{NH}_3$  and  $\text{N}_2\text{O}$  subunits is  $13^\circ$ . The  $C_3$  axis of  $\text{NH}_3$  is pointed towards the N end of the  $\text{N}_2\text{O}$  subunit.

Грав. спектр,  
м.п., спектр-  
мура

C.A. 1986, 104, N 4

$\text{NH}_3-\text{N}_2\text{O}$

[OM. 31135]

1985

Fraser G.T., Nelson D.D., et al.,  
J. Chem. Phys. 1985, 82,  
No. 6, 2535-2546.

Microwave and infrared  
characterization of several  
weakly bound  $\text{NH}_3$  complexes.



$\text{NH}_4\text{NO}_3$

1985

9 Б1025. Квантово-химический анализ некоторых моделей пероксинитрата аммония  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ , синтезированного при низких температурах. Глоризов И. П., Ягодковская Т. В., Хаджи-Оглы М. Р., Некрасов Л. И. «Тез. докл. 3 Всес. науч. совещ. по химии низк. температур, Москва, 18—20 дек., 1985». М., 1985, 3—5

Проведено изучение условий синтеза пероксинитрата аммония. Для установления возможности существования молекулы  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ , определения ее оптим. геометрич. параметров и теплоты образования — проведен квантовохим. расчет методом МЧПДП/3 с полной оптимизацией всех валентных углов и связей, а также двугранных углов по градиентному методу. На основании анализа характера ИК-спектров поглощения тв. конденсата и используемых теорет. расчетов предположено, что при низких т-рах возможно существование молекулы  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  с ионным характером связи фрагментов  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{NO}_3^-$ . Стабилизации молекулы способствуют, помимо низкой т-ры, внутримолек. Н-связи.

Из резюме

кв. мех. расчет

Х. 1986, 19, № 9

$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1985

№ 11 Л187. Вращательные спектры и структура комплексов аммиак—вода. Rotational spectra and structure of the ammonia—water complex. Herbine P., Dyke T. R. «J. Chem. Phys.», 1985, 93, № 8, 3678—3774 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом резонансной спектроскопии молекулярного пучка в электрич. поле исследован микроволновый и РЧ-спектры комплекса  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  и его дейтерированного аналога. Определены вращательные постоянные и структурные параметры этих комплексов. Напр., для расстояния  $R_{\text{NH}}$  связи  $\text{N} \cdots \text{H} - \text{O}$  получено значение 2,983 Å, а для расстояния  $R_{\text{ND}}$  связи  $\text{N} \cdots \text{D} - \text{O}$  получено значение 2,979 Å. Показано, что комплексы образованы водородной связью  $\text{N} \cdots \text{H}(\text{D})$ , причем ось симметрии молекулы  $\text{NH}_3$  повернута на угол  $23,1^\circ$  относительно прямой, соединяющей атомы N и O. Обсуждается сходство и различие строения исследуемых комплек-

Вращат.  
спектры и  
структура.

ср. 1987, 18, N 11

сов с комплексами молекул воды. Отмечается, что нет оснований полагать, что комплекс  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  является ионным или что протон молекулы воды частично смещен.

В. А. Морозов

$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1985

/ 103: 169020n Rotational spectra and structure of the ammonia-water complex. Herbine, P.; Dyke, T. R. (Dep. Chem., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(8), 3768-74 (Eng). Microwave and radio frequency spectra for  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  and deuterated analogs were obsd. by mol. beam elec. resonance spectroscopy. Rotational const., Stark effect, and N quadrupole coupling interaction data were obtained. This complex has a linear, H-bonded structure with water as the proton donor. The  $\text{NH}_3$  monomer symmetry axis has a vibrationally averaged displacement of  $23.1^\circ$  from the N...O axis. No evidence for transfer of a proton from  $\text{H}_2\text{O}$  to the  $\text{NH}_3$  was obsd.

(Уб спектры  
спин-спин  
параметры)

C. A. 1985, 103, v20

$\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$

1985

11 Д120. О связывании молекулы воды с ионом аммония. Взаимодействие эффектов улучшенного базисного набора, дисперсионной энергии и энергии нулевого уровня. On the binding of water to the ammonium ion: the interplay of an improved basis set. Dispersion and zero-point energy. Puliman Alberte, Claverie Pierre, Cluzan Marie-Caroline. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 5, 419—423 (англ.)

Строение комплекса  $\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$  рассчитано методом ССП с ~~последующим~~ учетом дисперсионной составляющей энергии по теории возмущений. В расчетах использован расширенный базис сгруппированных гауссовых ф-ций  $((11s7p2d)/[4s3p2d])$  для О и N. Рассмотрены структуры с расположением молекулы воды на оси симметрии  $C_2$  или  $C_3$  иона  $\text{NH}_4^+$ ; деформация фрагментов комплекса не учитывалась. Показано, что наиболее стабильна структура с расположением  $\text{H}_2\text{O}$

структура,

E

ф. 1985, 18, № 11

на оси  $C_3$  со стороны атома Н аммония. Энергия связи комплекса с учетом изменения энергии нулевого колебательного уровня при комплексообразовании на 3,1 ккал/моль равна 18,1 ккал/моль; дисперсионная энергия составляет 2,85 ккал/моль. Обнаруженная частичная взаимная компенсация дисперсионного понижения энергии и повышения энергии нулевого уровня в комплексе наблюдалась и для других систем с водородной связью. Библ. 30. А. В. Зайцевский

1985

 $\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$ 

20 Б1128. О связывании молекулы воды и иона аммония. Взаимное влияние улучшенного базисного набора, дисперсионной энергии и энергии нулевых колебаний. On the binding of water to the ammonium ion: the interplay of an improved basis set. Dispersion and zero-point energy. Pullman A., Claverie P., Cluzan M. - С. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 5, 419—423 (англ.)

Рассчитаны энергии трех конфигураций комплекса  $\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$ , отвечающим минимумам гиперповерхности потенциальной энергии. Расчет проведен методом ССП в расширенном базисе, включающем поляризац. ф-ции. С помощью теории возмущений определена дисперсионная энергия; учтены изменения энергии нулевых колебаний  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{NH}_4^+$ . А. А. Сафонов

X. 1985, 19, N 20

$\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$

1985

103: 93167t On the binding of water to the ammonium ion: the interplay of an improved basis set. Dispersion and zero-point energy. Pullman, Alberte; Claverie, Pierre; Cluzan, Marie Caroline (Lab. Biochim. Theor., Inst. Biol. Phys.-Chim., 75005 Paris, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 117(5), 419-23 (Eng). The binding energy of the  $\text{NH}_4^+ - \text{H}_2\text{O}$  complex, obtained in Hartree-Fock calcns. with an extended polarized basis set and supplemented by a perturbation calcn. of the dispersion contribution and inclusion for the zero-point energy, agreed satisfactorily with the existing exptl. heat of assocn. in the gas phase.

Журнал  
физ. хим.,  
теор. физика

C. A. 1985, 103, N 12



$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1985

10 Б1333. Вращательные спектры и структура комплекса аммиак—вода. Rotational spectra and structure of the ammonia—water complex. Herbine P., Dyke T. R. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 8, 3768—3774 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методом эл. резонанса в молек. пучке в обл. частот 2—30 МГц с ширинами линий около 3 кГц и обл. частот 10—25 ГГц с ширинами линий около 20 кГц измерены вращат. спектры комплексов  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (I),  $\text{NH}_3 \cdot \text{DOH}$  (II),  $\text{NH}_3 \cdot \text{HOD}$  или  $\text{NH}_2\text{D} \cdot \text{H}_2\text{O}$  (III) и  $\text{ND}_3 \cdot \text{D}_2\text{O}$  (IV) в основном колебат. состоянии. Анализ спектров выполнен с учетом центробежного искажения и квадрупольного взаимодействия. Вращат. постоянные I, II, III и IV соотв. равны  $(B+C)/2 = 6142,652(3)$ ,  $6136,14(10)$ ,  $5879,99(2)$  и  $5194,288(9)$  МГц. Для I и IV определены дипольные моменты  $\mu_a = 2,9766(8)$  и  $2,9928(24)$  D и для I структурные параметры  $r(\text{N} \dots \text{H}-\text{O}) = 2,983$  А,  $\angle (\text{NH}_3 \cdot \text{H}-\text{O}) = 23,1(2)^\circ$ .

М.П.

(+2)  $\Delta$  X

С. Н. Мурзин

X. 1987, 19, N 10

1)  $\text{NH}_3 \cdot \text{DOH}$ ,  $\text{NH}_3 \cdot \text{HOD}$ ,  $\text{NH}_2\text{D} \cdot \text{H}_2\text{O}$

4)  $\text{ND}_3 \cdot \text{D}_2\text{O}$

123,6

$\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$

(Dm. 23868)

1985

103: 147514z Ab initio SCF and CI study of the ammonium-water ( $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) complex. Welti, Martin; Ha, Tae Kyu; Pretsch, Erno (Dep. Org. Chem., Swiss Fed. Inst. Technol., CH-8092 Zurich, Switz.). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(6), 2959-64 (Eng). Interaction energies between a  $\text{H}_2\text{O}$  mol. and an  $\text{NH}_4^+$  cation in the gas phase were computed by means of ab initio SCF and CI calcns. The influence of basis set, geometry optimization, and of electron correlation effects on the  $\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  interaction energy is discussed.

meep. pa. erem

@. A. 1985, 103, N18

$\text{HN}_2\text{O}^+$

1986

20 Б1186. Спектроскопическое обнаружение протонированного  $\text{N}_2\text{O}$ . Spectroscopic detection of protonated  $\text{N}_2\text{O}$ . Атапо Т. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 127, № 2, 101—104 (англ.)

С использованием разностно-частотного лазерного спектрометра с высоким разрешением измерены ИК-спектры протонированного  $\text{N}_2\text{O}$  в обл. полосы  $\nu_1$  ( $3310 \text{ см}^{-1}$ ). Ионы  $\text{HN}_2\text{O}^+$  генерировали в разряде в полом катоде через проточную смесь  $\text{N}_2\text{O}$  ( $\sim 15$  млТорр) и  $\text{H}_2$  ( $\sim 250$  млТорр). Измерены положения около 430 линий в  $P$ -,  $Q$ - и  $R$ -ветвях ( $K_A \leq 3$ ). Выполнен анализ вращат. структуры полосы и рассчитаны молек. постоянные в основном состоянии:  $A$  625953,7 (89) МГц,  $B$  11301,48 (18) МГц,  $C$  11084,63 (17) МГц,  $\Delta_J = 5,15$  (29) кгц,  $\Delta_{JK} = 705$  (22) кгц,  $\Delta_K = 242,8$  (18) МГц. Получены также нек-рые значения эфф. постоянных для состояния  $\nu = 1$  ( $K_a = 0, 1, 2, 3$ ). С. Б. Осин

$\nu_1, \text{M. A.}$

X. 1986, 19, N 20

№ 0-0H<sub>2</sub>

1986

Барановский В.И., Сузо-  
ва О.В. и др.,

Исследование структуры и  
ab initio энергетике молекул.

расчет алеввузовский сборник науч-  
ных трудов Ивановского хими-  
ко-технол. институту,  
Иваново, 1986,

34-39 (есть в картотеке) 39

НО.ОН-

1986

Барачовский В.И., Ризо-  
ва О.В. и др.,

Исследование структуры и  
энергетики молекул.

ав. инт.  
патент

Межвузовский сборник научных  
трудов Ивановского химико-  
технологического института,  
Иваново, 1986,

34-39. (есть в картотеке) 4-39

$\text{HN}_2\text{O}^+$

1986

106:10684x The millimeter wave spectrum of protonated nitrous oxide. Bogey, M.; Demuynck, C.; Destombes, J. L.; McKellar, A. R. W. (Lab. Spectrosc. Hertzienne, Univ. Lille I, F-59655 Villeneuve d'Ascq, Fr.). *Astron. Astrophys.* 1986, 167(2), L13-L14 (Eng). By using a magnetically confined neg. glow discharge, the mm wave spectrum of  $\text{HN}_2\text{O}^+$  was investigated at 130-290 GHz. Accurate mol. consts. were derived, which are in agreement with recent IR results. Predictions of transitions of astrophys. interest are presented.

(MMA CRKPP)

e.A. 1987, 106, N 2

Am. 25507

1986

$(\text{H}_2\text{O})_n(\text{NH}_3)\text{H}^+$  Deakye C.A.,

преми  
гелл,  
непр.  
рацем

J. Phys. Chem., 1986,  
90, N 25, 6625-6632.



$\text{NH}_2\text{NO}$

1986

№ 1 Л186. Строение и колебательные частоты  $\text{NH}_2\text{NO}$ .  
The structure and vibrational frequencies of  $\text{NH}_2\text{NO}$ .  
Harrison John A., MacLagan Robert G. A. R., Whyte Andrew R. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 1—2, 90—102 (англ.)

Проведен теоретич. расчет параметров равновесной структуры молекул  $\text{NH}_2\text{NO}$  (I). Определены значения частот колебаний и длин связей в I. Установлено, что плоская конформация I является неустойчивой. Сопоставлены значения колебательных частот двух конформеров I, полученных при вращении функциональных групп вокруг связи NN. Найдены частоты гармонич. колебаний для четырех конформеров I. Рассчитаны величины потенц. барьеров внутреннего вращения в I. Показано, что при использовании поляризационных ф-ций данные расчета частот колебаний удовлетворительно согласуются с эксперим. значениями частот колебаний в спектрах I.

И. В. А.

(М.П.)

ср. 1987, 18, № 1

NH<sub>2</sub>NO

Doc. 24910 1986

105:197476a The structure and vibrational frequencies of nitrosanide (NH<sub>2</sub>NO). Harrison, John A.; MacLagan, Robert G. A.; Whyte, Andrew R. (Dep. Chem., Univ. Canterbury, Christchurch, N. Z.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 130(1-2), 98-102 (Eng). The geometry of NH<sub>2</sub>NO was optimized at the Hartree-Fock (HF) level of theory with basis sets ranging from STO-3G to 6-31G\*\*. The lowest energy structure is not planar as previously predicted. The geometry of NH<sub>2</sub>NO was optimized at the (2nd-order Moeller-Plesset perturbation theory)/6-31G\*\* level. The geometry of the planar structure was also optimized with various basis sets. The optimized structures and HF energies are reported for 2 conformers of NH<sub>2</sub>NO resulting from rotation about the NN bond. Harmonic vibrational frequencies for the 4 conformers are reported, and scaled frequencies for the lowest-energy structure given.

смыкнута,  
Di, meop. pac-  
ren

C.A. 1986, 105, N 22

$N_2OH^+$

8 Б1064. Изучение методом молекулярных орбиталей протонированной  $N_2O$ . A molecular orbital study of protonated  $N_2O$ . Yamashita Koichi, Morokuma Keiji. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 131, № 3, 237—242 (англ.)

Методом Хартри — Фока с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера — Плесета (МП) 2-го порядка (МП2) найдено основное состояние молекулы  $N_2O$  в базе 6-31\* ГФ. В рамках МП4 в базе 6-311\* ГФ изучена энергетика и геометрия O- и N-протонированных форм  $N_2O$ . Найдено, что O-форма на 7,1 ккал/моль стабильнее N-формы. Рассчитаны колебат. частоты протонированных и дейтерированных форм. Изучена р-ция изомеризации O- и N-форм и найдены энергии нек-рых бирадикальных интермедиатов в низших синглетных и триплетных состояниях. Найдено, что такие интермедиаты имеют энергию, лежащую на ~80 ккал/моль выше N-формы  $N_2O$ . Такие высокие барьеры предполагают возможность эксперим. обнаружения обеих форм, однако теорет. расчет вращат. постоянных и частот вал. кол. OH свидетельствуют о том, что в ИК-спектрах высокого разрешения обнаружена только O-форма  $N_2O$ .

М.П.

Х. 1987, 19, N 8

С. П. Долин

1986

$\text{NH}_3\text{D}^+$

1986

6 Л1459. Разностно-частотная лазерная спектроскопия  $\nu_4$  фундаментальной полосы  $\text{NH}_3\text{D}^+$ . Difference-frequency laser spectroscopy of the  $\nu_4$  fundamental band of  $\text{NH}_3\text{D}^+$ . Nakagawa T., Amano T. «Can. J. Phys.», 1986, 64, № 10, 1356—1358 (англ. рез. фр.)

С высоким разрешением исследован спектр поглощения  $\nu_4$  фундаментальной полосы иона  $\text{NH}_3\text{D}^+$  в диапазоне 3200—3400  $\text{cm}^{-1}$ . Измерения проведены в электрич. разряде с использованием лазерного спектрометра, в котором рабочий диапазон частот обеспечивался вычитанием частот излучения одномодового Ar-ионного лазера и перестраиваемого лазера на красителе при смещении в кристалле  $\text{LiNbO}_3$ . Измерены частоты и идентифицировано  $\sim 60$  переходов. Определен ряд молекулярных постоянных. В частности, равновесная длина NH-связи составила  $1,021 \pm 0,003$  А. Проведено сравнение полученных результатов с вычисленными теоретически и показано их хорошее согласие. М. Ю. Н.

М.П.

фр. 1987, 18, № 6

$H_2NNO$

(Dm. 25896)

1986

$HNNOH$

Reynolds Ch.A., Thomson C.,

теорет-  
расчет  
(относит.  
стабильн.)

Theor. chim. acta,  
1986, 70, N6, 421-427.

$\text{NNOH}^+$   
 $\text{ONNH}^+$

1986

№5 Б1045. Молекулярная структура и ИК-спектр протонированного нитрооксида. Molecular structure and infrared spectrum of protonated nitrous oxide. Rice Julia E., Lee Timothy J., Schaefer III Henry F. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 4, 333—336 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) с использованием двухэкспонентных базисных наборов, дополненных поляризац. АО, рассчитаны равновесные геометрич. конфигурации, энергии и основные частоты колебаний молекулы  $\text{NNO}$  и двух изомеров протонированной формы  $\text{NNOH}^+$  и  $\text{ONNH}^+$ . Сопоставление рассчитанных вращат. постоянных с найденными экспериментально позволяет уверенно соотнести с образцом, изучаемым в эксперименте, форму  $\text{NNOH}^+$ . Этой же конфигурации отвечает минимум энергии. Тем не менее, вычисл. частота колебаний  $\nu_1$  ( $3729 \text{ см}^{-1}$ ) существенно отличается от эксперим.  $3331 \text{ см}^{-1}$ . Дальнейшее улучшение базиса за счет введения поляризац. ф-ций уменьшает рассчитанную частоту всего на  $20 \text{ см}^{-1}$ .

А. В. Немухин

Х. 1987, 19, №5

М.А.

$\text{HNO}^+$

1986

2 Д48. Молекулярная структура и инфракрасный спектр протонированной закиси азота. Molecular structure and infrared spectrum of protonated nitrous oxide. Rice Julia E., Lee Timothy J., Schaefer Henry F. III. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 4, 333—336 (англ.)

Неэмпирическим методом МО рассчитаны параметры  $\text{HNNO}^+$  и  $\text{NNOH}^+$ : полная энергия, дипольный момент, вращательные постоянные, основные частоты колебаний. В расчетах использовался метод самосогласованного поля (ССП) с двухэкспонентным базисом с поляризацией с учетом и без учета корреляций электронов. В любом из рассмотренных приближений ССП энергия структуры  $\text{NNOH}^+$  оказалась ниже, чем энергия  $\text{HNNO}^+$ . Результаты расчетов вращательных постоянных  $\text{NNOH}^+$  находятся в хорошем согласии с эксперим. данными по спектроскопии высокого разрешения молекулы  $\text{N}_2\text{OH}^+$  (Аmano Т. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 127, 101). Так, напр., для постоянной  $A$  получено значение 627 900 МГц, что всего на 0,3% выше результата Аmano. Абс. погрешности для констант  $B$  и  $C$  не превышают 100 МГц. С другой стороны, расчет параметров  $\text{HNNO}^+$  не дал удовлетворительного согласия с экспериментом.

(И. С. В.)

ср. 1987, 18, № 2

И. С. В.

$\text{HNNO}^+$   
 $\text{NNOH}^+$

(Im. 24771)

1986

106: 38710b Molecular structure and infrared spectrum of protonated nitrous oxide. Rice, Julia F.; Lee, Timothy J.; Schaefer, Henry F., III (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 130(4), 333-6 (Eng). For the  $\text{N}_2\text{O}$  protonated isomes  $\text{HNNO}^+$  and  $\text{NNOH}^+$ , the mol. structure, total energy, rotational consts., dipole moment, and vibrational frequencies were obtained in ab-initio-MO calcns. The results for  $\text{NNOH}^+$  only agreed with the high-precision IR measurements done by T. Amano (1986).

(ab initio,  
UK chemps)

C.A. 1987, 106, N 6



$\text{HO}_2\text{NO}_2$

1986

2 Б1286. Микроволновой спектр и конформация молекулы пероксиазотной кислоты  $\text{HOONO}_2$ . The microwave spectrum and molecular conformation of peroxyntic acid ( $\text{HOONO}_2$ ). Suenram R. D., Lovas F. J., Pickett H. M. «J. Mol. Spectros.», 1986, 116, № 2, 406—421 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

В области 40-120 ГГц измерены вращат. спектры газ.  $\text{HOONO}_2$  (I). Сделано отнесение переходов  $a$  и  $b$ -типа для  $v=0$  и 1 туннельных состояний основного колебат. состояния и 1-го возбужденного крутильного состояния  $\text{NO}_2$ -группы и  $C$ -полос между  $v=0$  и  $v=1$  туннельными состояниями основного крутильного  $\text{HOO}$  и  $\text{NO}_2$  кол. Спектроскопич. константы в основном состоянии и первом возбужденном  $\text{NO}_2$  крут. кол. соотв. равны  $A_0=11994,4997$ ,  $B_0=4665,2445$ ,  $C_0=3397,1888$  МГц;  $D_{I_0}=1,4255$ ,  $D_{IK_0}=5,365$ ,  $D_{K_0}=5,695$ ,  $\delta_{I_0}=0,3616$ ,  $\delta_{K_0}=4,334$  кГц,  $F_{01}=21,058$  МГц,  $A_1=11994,3029$ ,  $B_1=$

М.П.

X. 1987, 19, № 2

$=4665,0080$ ,  $C_1=3397,1563$  МГц;  $D_{I1}=1,4138$ ,  $D_{IK1}=\$   
 $=5,396$ ,  $D_{K1}=5,606$ ,  $\delta_{I1}=0,3540$ ,  $\delta_{K1}=4,130$  кГц;  $E_1=\$   
 $=1782,636$  МГц. I имеет анти-клинальную конформа-  
цию, в которой все тяжелые атомы лежат в одной плос-  
кости, а Н выходит из плоскости под углом  $\sim 106^\circ$ .

Н. Л. Ариюткина



$\text{HOONO}_2$

1986

~ 12 Л172. Микроволновый спектр и молекулярная конформация пароксинитрильной кислоты ( $\text{HOONO}_2$ ). The microwave spectrum and molecular conformation of peroxynitric ( $\text{HOONO}_2$ ). Суепгам Р. Д., Ловас Ф. Дж., Пикетт Н. М. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 2, 406—421 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

В диапазоне  $40 \div 120$  ГГц исследован МВ-спектр молекулы  $\text{HOONO}_2$ . Идентифицированы линии вращательных переходов с  $J < 22$  в основном колебательном состоянии и в первом возбужденном состоянии торсионного колебания  $\text{NO}_2$ -группы ( $145 \text{ см}^{-1}$ ), а также расщепление линий, обусловленное туннелированием ОН-группы через плоскость симметрии молекулы. Наблюдаемый спектр соответствует конформации молекулы  $\text{HOONO}_2$  с двугранным углом между плоскостями НОО и  $\text{NO}_2$  равным  $102,9^\circ$ , и двугранным углом между плоскостями  $\text{N}_4\text{O}_3\text{O}_2$   $\text{O}_6\text{N}_4\text{O}_5$ , равным  $23,9^\circ$ . Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных и дипольного момента. М. Р. Алиев

(М. Р.)

сп. 1986, 18, N 12.

H O O N O 2

1986

104: 158478n The microwave spectrum and molecular conformation of peroxyntic acid (H O O N O 2). Suenram, R. D.; Lovas, F. J.; Pickett, H. M. (Mol. Spectrosc. Div., Natl. Bur. Stand., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116(2), 406-21 (Eng). The rotational spectrum of peroxyntic acid was investigated at 40-120-GHz. The spectrum of the ground state is complicated by tunneling of the OH group, which causes a doubling of the asym. rotor spectrum. The magnitude of the tunneling splitting is such that it causes Coriolis interactions between the energy levels of the 2 tunneling states which lead to perturbations in the rotational spectrum. A combined anal. of the a- and b-type pure rotational transitions with the c-type tunneling transitions allows a perturbation-free detn. of the rotational consts. for the ground state. A similar anal. of the low-lying N O 2 torsional vibration at 145(6)  $\text{cm}^{-1}$  was also carried out. The dipole moments for each state were detd. by anal. of the 2nd-order Stark effect. The mol. structure anal. indicates that all the heavy atoms are planar and only the H atom is out of the heavy atom plane. The preferred orientation of the H atom with respect to the plane of the heavy atoms is at an angle of  $\sim 106^\circ$  with respect to the cis conformation.

(118 cxxxix)

C. A. 1986, 104, N 18.

$N_2OH^+$

1986

(ab initio)

(106: 38709h A theoretical study of protonated nitrous oxide. Vincent, Mark; Hillier, Ian H. (Chem. Dep., Univ. Manchester, Manchester, UK M13 9PL). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 130(4), 330-2 (Eng). Ab-initio-MO calcs. predicted the preferred site of protonation of  $N_2O$  to be at the O atom and gave a structure of  $N_2OH^+$  and protonation energies in agreement with existing exptl. data.

C.A. 1987, 106, N 6

$\text{HN}_2\text{O}^+$

1986

У5 Б1044. Теоретическое исследование протонированной [молекулы]  $\text{N}_2\text{O}$ . A theoretical study of protonated  $\text{N}_2\text{O}$ . Vincent Mark, Hillier Ian H. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 4, 330—332 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия с использованием базисов 6—31 ГФ\*\* рассчитаны равновесные геометрич. параметры и энергии возможных изомеров  $\text{HN}_2\text{O}^+$ . Найдено, что минимуму энергии отвечает структура с присоединением протона к кислородному концу молекулы  $\text{N}_2\text{O}$ . С учетом поправок на энергию нулевых колебаний и на конечную т-ру (300 К) сродство к протону оценено в 142,1 ккал/моль. Тогда как для др. изомера с присоединением протона к концевому атому азота сродство на 7,2 ккал/моль меньше, что хорошо коррелирует с эксперим. оценкой разницы энергий этих изомеров  $6,5 \pm 3,5$  ккал/моль. Рассчитанные вращат. постоянные катиона  $\text{HN}_2\text{O}^+$  удовлетворительно согласуются с эксперим. спектральными данными.

А. В. Немухин

(М-П)

Х. 1987, 19, № 5

$\text{HN}_2\text{O}^+$

1986

2 Д47. Теоретическое исследование протонированной молекулы  $\text{N}_2\text{O}$ . A theoretical study of protonated  $\text{N}_2\text{O}$ . Vincent Mark, Hillier Ian H. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 130, № 4, 330—332 (англ.)

Имеющиеся в настоящее время эксперим. данные о молекуле  $\text{HN}_2\text{O}^+$  не позволяют однозначно определить, к какому атому присоединен протон  $\text{H}^+$ . Представлены результаты неэмпирич. расчетов длин связей и углов между ними, вращательных постоянных и энергетич. параметров  $\text{HN}_2\text{O}^+$  для всех возможных случаев расположения  $\text{H}^+$ . Расчеты проводились методом самосогласованного поля с учетом конфигурац. взаимодействия. Результаты для случая присоединения  $\text{H}^+$  к атому кислорода оказались в хорошем согласии с эксперим. данными о структуре молекулы  $\text{HN}_2\text{O}^+$  и ее сродстве к протону. И. С. В.

(М.П.)

ср. 1987, 18, № 2

N<sub>2</sub>OH

1986

3 Д114. Изучение методом молекулярных орбиталей протонированной молекулы N<sub>2</sub>O. A molecular orbital study of protonated N<sub>2</sub>O. Yamashita Koichi, Morokuma Keiji. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 131, № 3, 237—242 (англ.)

Ограниченным методом Хартри—Фока с последующим учетом электронной корреляции методом многочастичной теории возмущений четвертого порядка в варианте Меллера—Плессета выполнены расчеты молекулярной системы N<sub>2</sub>O+протон, причем рассмотрены все возможные случаи присоединения протона: как к атому кислорода, так и к любому из атомов азота. Найдено, что наиболее стабильной системой является изомер, в котором протон присоединен к O. Энергия этого изомера на 7,1 ккал/моль меньше энергии изомера с протонированным концевым азотом. При этом получено, что энергии бирадикальных, промежуточных

М.Л.

ср. 1987, 18, №3



между О- и N-протонированными изомерами продуктов лежат примерно на 80 ккал/моль выше энергии N-протонированного изомера. Сделан вывод, что оба изомера должны наблюдаться в эксперименте. Сравнение рассчитанных величин вращательных постоянных и частоты, соответствующей растяжению связи О—Н, и эксперим. данными показало, что пока удалось наблюдать только О-протонированный изомер.

А. И. К.



HONN

1987

Brown R. E., Mendenhall  
G. D., et al.

u. n. Int. J. Quantum Chem.:  
Quantum Chem. Symp.,  
1987, N21, 603-612.

(see. ● HONNOM; III)

$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

1987

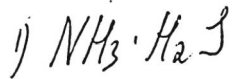
108: 46115t Structure determination of weakly bound complexes. Dyke, T. R. (Dep. Chem., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). NATO ASI Ser., Ser. C 1987, 212(Struct. Dyn. Weakly Bonded Mol. Complexes), 43-56 (Eng). Radiofrequency and microwave spectra were obtained for H bonded complexes such as  $(\text{H}_2\text{O})_2$ ,  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{S}$  with the mol. beam elec. resonance method. The purpose of these expts. is to understand the structural factors influencing the formation of hydrogen bonds and to provide accurate data for models and ab initio calcs. of H bonding. The information available from this work includes rotational and centrifugal distortion consts., elec. dipole moments, and nuclear spin-spin and quadrupole coupling hyperfine consts. The geometries of these complexes were calcd. principally from the rotational consts. with some angular information from the hyperfine interaction results. Substitution data is useful for increasing the no. of structural parameters which can be detd. The large amplitude vibrational motions of the monomers in weakly bound complexes complicate this procedure in 2 ways. Interchange of indistinguishable nuclei by tunneling processes can lead to large splittings in the rotational spectra, as obsd. for  $(\text{H}_2\text{O})_2$ , and to more subtle effects such as the absence of K-doubling and resulting linear Stark effects in  $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{S}$ . Even if these effects are absent or were accounted for, the spectroscopic consts. used in a structure calcn. reflect vibrational avs., typically for several isotopically distinct species.

УФ спектры,  
спектры  
параметры

⊗ (12)

C.A. 1988, 108, N 6

HA 05



$\text{NH}_4\text{NO}_4$

1987

Г 1 Д58. Квантово-химический расчет структуры молекулы пероксинитрата аммония  $\text{NH}_4\text{NO}_4$ . Глоринзов И. П., Ягодковская Т. В., Некрасов Л. И. «Ж. физ. химии», 1987, 61, № 8, 2061—2065

Квантово-химическим методом MINDO/3 получены данные, указывающие на принципиальную возможность существования соли надзотной кислоты — пероксинитрата аммония  $\text{NH}_4\text{NO}_4$ . Установлена ее геометрия, определена теплота образования. Показано, что связь фрагментов  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{NO}_4^-$  в молекуле носит в основном ионный характер, стабилизации молекулы способствует образование внутримолекулярных водородных связей.

Резюме

М.Л.

ср. 1988, 18, N1



1987

/ 106: 202105f Structure and stability of clusters of hydride ion with ammonia  $\text{H}^-(\text{NH}_3)$  and  $\text{H}^-(\text{NH}_3)_2$ . Hirao, K.; Kawai, E. (Coll. Gen. Educ., Nagoya Univ., Nagoya, Japan). *THEOCHEM* 1987, 34(3-4), 391-4 (Eng). The structure and energy of the title clusters were ab initio MO calcd. Apparently,  $\text{NH}_4^-$  can be considered as an  $\text{H}^-$  ion solvated by  $\text{NH}_3$ . Two possible structures were deduced for  $\text{H}^-(\text{NH}_3)_2$ .

теорет.  
расчет  
структур  
и стабилн.

с. А. 1987, 106, N 24

$\text{NH}_4\text{NO}_3$

DM 27656

1987

107: 184043y Quantum-chemical calculation of the molecular structure of ammonium peroxyxynitrate ( $\text{NH}_4\text{NO}_3$ ). Gloriov, I. P.; Yagodovskaya, T. V.; Nekrasov, L. I. (Mosk. Gos. Univ., Moscow, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1987, 61(8), 2061-5 (Russ). The possible existence of  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  is demonstrated by quantum chem. calcs. The mol. structure and heat of formation of  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  were calcd. by the MINDO/3 method. The bond between  $\text{NM}_4^+$  and  $\text{NO}_2^-$  fragments is basically ionic, the mol. is stabilized by intramol. bonds.

□  
(Δ+H, empty)  
meop. porem

(A)



$\text{NH}_4\text{NO}_3$  (Δ+H)

C. A. 1987, 107, N20

$\text{NH}_4\text{NO}_4$

От 27656

1987

№ 6 Б1076. Квантово-химический расчет структуры молекулы пероксинитрата аммония  $\text{NH}_4\text{NO}_4$ . Глорнозов И. П., Ягодковская Т. В., Некрасов Л. И. «Ж. физ. химии», 1987, 61, № 8, 2061—2065

Методом МЧПДП/3 получены данные, указывающие на принципиальную возможность существования соли надазотной к-ты — пероксинитрата аммония  $\text{NH}_4\text{NO}_4$ . Установлена ее геометрия, определена теплота образования. Показано, что связь фрагментов  $\text{NH}_4^+$  и  $\text{NO}_4^-$  в молекуле носит, в основном, ионный характер, стабилизации молекулы способствует образование внутримолек. Н-связей.

Резюме

М.П.

Х. 1988, 19, № 6



$N_2H_2O$

(OM-28752)

1987

Harrison J.A., MacLagan R.G.  
et al.

структура

J. Phys. Chem., 1987,

91, N27, 6683-6686.

Structures, ● Energies, and

Vibrational Frequencies of  
Intermediates and Transition  
States in the Reaction of  
 $\text{NH}_2$  and  $\text{NO}$ .

$H_3N-HOH$

1987

Latajka Zdzisław,  
Scheiner Steve.

meop.  
paciim.

J. Comput. Chem. 1987,  
8 (5), 674-82.

(see  $H_3N \cdot HF$ ; III)

NONH<sub>2</sub>.

[Om. 26740]

1987

Phillips L.F.,

срелмр  
ноуоуер.

J. Photochem., 1987, 38,  
35-41.

$\text{HNaD}^+$

[omn. 26576]

1987

Sears T. J.,

Судебно-эксперт.  
исследов.

J. Chem. Soc. Faraday  
Trans., 1987, Pt 2, 83,  
N1, 111-126.



X. 1987, 19, N 11.

$\text{NH}_2\text{OH}$  (Om. 26879)

1987

Taubmann B., Jones H.,

дисон.  
лазерн.  
спектр

J. Mol. Spectrosc.,  
1987, 123, 366-381.

$\text{HON}_2^+$

DM 29388

1988

17 B1318. Спектроскопия протонированной и дейтерированной закиси азота в миллиметровой и субмиллиметровой области. Millimeter and submillimeter wave spectroscopy of protonated and deuterated nitrous oxide. Bogey M., Demuynck C., Destombes J.-Luc. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 4, 2108—2111 (англ.)

В области 267—290 и 330—406 ГГц измерены вращат. спектры *a*- и *b*-типов ионов  $\text{HON}_2^+$  и  $\text{DON}_2^+$  (протонированная и дейтерированная запись азота) образующихся в разрядном источнике, содержащем смесь  $\text{H}_2(\text{D}_2)/\text{N}_2\text{O}/\text{Ar}$  (давл. 0,007; 0,002 и 0,009 мм) помещенном в магнитное поле (250 Гс). Рассчитаны след. значения вращат. постоянных (*A*, *B*, *C* в МГц) и параметров *S* — приведенного гамильтониана Ватсона в *J'* представлении описывающих центробежное искажение (*D<sub>J</sub>*, *D<sub>JK</sub>*, *d<sub>1</sub>*, *d<sub>2</sub>* в кГц и более высоких порядков):  $\text{HON}_2^+$  — 625957,716; 11301,5628; 11084,2800;

Француз.  
спектры,  
М.П.

X. 1988, 19, N 77.  $\text{DON}_2^+$



$5,3651; 725,48; -0,0950; -0,0180; H_{KJ}=228$  Гц,  $L_{KJ}=$   
 $=84,5$  Гц ( $H_{JK}$  и  $S_{KJ}$  приняты равными 0);  $DN_2^+ -$   
 $349107,385; 10747,3540; 20406,9485; 4,5490; 514,89;$   
 $-0,1423; -0,0383; H_{JK}=1,69$  Гц,  $H_{KJ}=-516$  Гц,  
 $L_{KJ}=2,66$  Гц,  $S_{KJ}=-0,128$  Гц. При анализе исполь-  
 зованы значения  $D_K$ , найденные из ИК-спектров, соотв.  
 $242,8$  и  $69,967$  МГц. Результаты (A, B, C) сопостав-  
 ляются с данными неэмпирич. расчетов выполненных  
 в различных базисах для различных протонированных  
 форм  $N_2O$  (через атомы O и N). В. М. Ковба



3H<sub>2</sub>O·N<sub>2</sub>

OM. 31407

1988

ab initio  
парем UK  
чекрпа,  
спрыкпа,  
жепенмк

(+2) ~~12~~

110: 65954y. Ab initio molecular orbital calculations of the infrared spectra of interacting water molecules. Part 1. Complexes of water with nitrogen, neon and argon. Brasler, M. J.; Carr, V. C. E.; Gerazounis, M. G.; Jugga, N. R.; Yeo, G. A.; Ford, T. A. (Dep. Chem., Univ. Witwatersrand, Johannesburg, 2050 S. Afr.). *THEOCHEM* 1988, 49, 241-65 (Eng). The IR spectra of 3 H<sub>2</sub>O-N<sub>2</sub>, 2 N<sub>2</sub>O-Ne, and 2 H<sub>2</sub>O-Ar complexes were predicted using the GAUSSIAN-76 ab initio MO computer program package. The wavenos. were compared with those of the H<sub>2</sub>O monomer, calcd. earlier, and with exptl. data, where they were available. The intensities were compared with those of the monomer, and were interpreted in terms of the derived at. polar tensors. The structures, interaction energies (including the effects of basis set superposition error) and bonding properties of the complexes are discussed.

C.A. 1989, 110, N 8

$\text{NH}_4^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$

сер. 29182

1988

Брижнук А.А.,

Воитыук А.А.

7. Мел. Street. Theo-

chem., 1988, 164, N3-4,

343-349.

мел.  
серии

Ko. u. u. k. e. H<sub>2</sub>O. AH<sub>n</sub>

H<sub>2</sub>O. NH<sub>n</sub> 1988

c AH<sub>n</sub>

A = N, O, F, P, S, Cl

(meop. p. a. r. e. m.)

⊗ (F)

c. A. 1988, 108, N 24

OM. 29982

108: 210454a Ab initio molecular orbital study of the structures and energies of neutral and charged bimolecular complexes of water with the hydrides AH<sub>n</sub> (A = nitrogen, oxygen, fluorine, phosphorus, sulfur, and chlorine). Del Bene, Janet E. (Dep. Chem., Youngstown State Univ., Youngstown, OH 44555 USA). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(10), 2874-80 (Eng), Hartree-Fock 6-31G(d) structures were detd. for the neutral, pos. ion, and neg. ion bimol. complexes of H<sub>2</sub>O with the first- and second-row hydrides AH<sub>n</sub> (AH<sub>n</sub> = NH<sub>3</sub>, OH<sub>2</sub>, FH, PH<sub>3</sub>, SH<sub>2</sub>, and ClH). All of the neutral complexes, the pos. ion complexes of OH<sub>3</sub><sup>+</sup> with the hydrogen halides HF and HCl, and the first-row neg. ion complexes exhibit conventional H-bonded structures with essentially linear H bonds and directed lone pairs of electrons. The pos. ion complexes of NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, OH<sub>3</sub><sup>+</sup>, PH<sub>4</sub><sup>+</sup>, and SH<sub>3</sub><sup>+</sup> with H<sub>2</sub>O have linear H bonds, but the H<sub>2</sub>O mol. is oriented so that its dipole moment vector lies along the intermol. line, forming a directed-ion-dipole H bond. The complexes of PH<sub>2</sub><sup>-</sup>, SH<sup>-</sup>, and Cl<sup>-</sup> with H<sub>2</sub>O have nonlinear H bonds. First-row complexes have greater stabilization energies and shorter intermol. distances than the corresponding complexes of the second row. The neutral complexes of H<sub>2</sub>O with PH<sub>3</sub> and SH<sub>2</sub> have nonassociative H bonds. Basis set and correlation effects on the computed H bond

energies of these complexes were also evaluated. The addn. of diffuse functions on non-hydrogen atoms to the valence double-split plus polarization basis set [6-31G(d,p) lowers stabilization energies and is usually the single most important enhancement of the basis set. Splitting d polarization functions usually destabilizes these complexes, whereas splitting p polarization functions leads to stabilization. Electron correlation stabilizes all of these complexes. The second-order Moller-Plesset correlation term is the largest term and always has a stabilizing effect, whereas the third- and fourth-order terms are smaller and often of opposite sign. The recommended level of theory for calcn. of the stabilization energies of these complexes is MP2/6-31+G(2d,2p), although MP2/6-31+G(d,p) may be appropriate for the neg. ion complexes of the first row.




Комплекс  
 $H_2O \cdot NH_3$   
и цонок

1988

21 Б1107. Изучение неэмпирическим методом ССП МО структур и энергий нейтральных и заряженных бимолекулярных комплексов  $H_2O$  с гидридами  $AH_n$  ( $A=N, O, F, P, S$  и  $Cl$ ). Ab initio molecular orbital study of the structures and energies of neutral and charged bimolecular complexes of  $H_2O$  with the hydrides  $AH_n$  ( $A=N, O, F, P, S,$  and  $Cl$ ). Del Bene J. E. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 10, 2874—2880 (англ.)

Рассчитаны энергии и структуры молек. комплексов  $H_2O$  с гидридами  $AH_n$  ( $NH_3, OH_2, FH, PH_3, SH_2$  и  $ClH$ ), их положит.  $AH_{n+1}^+$  и отриц. ионами  $AH_{n-1}^-$ . Расчеты проведены в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций 6-31ГФ. Для всех нейтр. комплексов, положит. комплексов  $H_3O^+$  с  $HF$  и  $HCl$ , безбарьерно образующихся при взаимодействии  $H_2O$  с  $H_2F^+$  и  $H_2Cl^+$  и отриц. комплексов гидридов элементов 2-го периода равновесные структуры отвечают образованию станд.

М.П.

(45) 

Х. 1988, 19, N 21

линейных Н-связей и направленных неподеленных пар. Комплексы  $\text{NA}_4^+$ ,  $\text{OH}_3^+$ ,  $\text{PH}_4^+$  и  $\text{SH}_3^+$  с  $\text{H}_2\text{O}$  имеют линейные Н-связи, но молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  ориентированы осью симметрии вдоль этой связи, образуя направленные ион-дипольные Н-связи. Комплексы  $\text{PH}_2^-$ ,  $\text{SH}^-$  и  $\text{Cl}^-$  с  $\text{H}_2\text{O}$  имеют нелинейные Н-связи. Энергия образования комплексов больше для гидридов 2-го периода, чем для гидридов 3-го периода. Исследовано влияние учета корреляц. эффектов и расширения базиса на стабильность комплексов. А. А. Сафонов



MON<sub>2</sub><sup>+</sup> (OM-29200) 1988  
Destombes J. L.,  
Demeyne C., et al.

д. н.  
(обзор) Phil Trans. Roy. Soc.  
London, 1988, A324,  
N 1578, 147-162.

(Cell. ● H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>; III)



HNO - H<sub>2</sub>O

1988

109:156124w Ab initio calculations of the nitrosyl hydride (HNO)-water dimer. Espinosa Garcia, J.; Tolosa, S.; Olivares del Valle, F. J.; Requena, A. (Dep. Phys. Chem., Univ. Extremadura, Badajoz, Spain). *An. Quim., Ser. A* 1988, 84(1), 23-34 (Eng). Theor. ab initio study of the HNO-H<sub>2</sub>O system is carried out. An estn. of the superposition error for the counterpoise method is realized. The H bond energy, the electron population, and the one-electron properties, sep'd. in electrostatic, exchange-repulsion, polarization, and charge transfer contributions, as well as the effect of the basis set superposition error in the charge transfer component is analyzed.

nopep. parep

C. A. 1988, 109, N18.

$\text{HON}_2^+$

От 29388

1988

8 Л171. Миллиметровая и субмиллиметровая спектроскопия протонированной и дейтерированной закиси азота. Millimeter and submillimeter wave spectroscopy of protonated and deuterated nitrous oxide. Bogy Marcel, Demuynck Claire, Destombes Jean-Luc. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, №.4, 2108—2111 (англ.)

В миллиметровой (134—290 ГГц) и субмиллиметровой (до 405 ГГц) областях спектра исследованы вращательные спектры переходов  $a$ - и  $b$ -типов молекул  $\text{HON}_2^+$  и  $\text{DON}_2^+$ . Определены вращательные постоянные  $A$ ,  $B$  и  $C$ , и постоянные центробежного искажения до 6-го порядка включительно. Из сравнения полученных значений параметров со значениями результатов неэмпирич. квантовохимич. расчетов сделан вывод, что изучаемые ионы имеют  $O$ -протонированную форму.

В. А. Морозов

М.П.

(4) 

ф. 1988, 18, № 8

$\text{HNO}-\text{H}_2\text{O}$

1988

21 Б1108. Неэмпирические расчеты димера  $\text{HNO}-\text{H}_2\text{O}$ . Ab initio calculations of the  $\text{HNO}-\text{H}_2\text{O}$  dimer. Espinosa Garcia J., Tolosa S., Olivares del Valle F. J., Requena A. «An. quim. Real soc. esp. quim.», 1988, A 84, № 1, 28—34 (англ.; рез. исп.)

Неэмпирическим методом ССП в базисе МИНИ-4 Хузинаги рассчитаны компоненты энергии (электростатич., обменная кулоновская, поляризац., электронной делокализации (перенос заряда), дисперсионная) и электронная заселенность Н-связи в димере  $\text{HNO}-\text{H}_2\text{O}$  (акцептор протона) и дан анализ влияния ошибки ба-

М-Л.

Х. 1988, 19, № 21

зиса (ОБ) на расчетные св-ва. Оценка ОБ выполнена с учетом ранее введенных корректирующих факторов. Стабильность системы  $\text{HNO}-\text{H}_2\text{O}$  найдена сравнимой со стабильностью димера  $\text{H}_2\text{O}$  несмотря на меньшее равновесное расстояние ( $R_p$ ). Основной вклад в энергию Н-связи вносит электростатич. компонента; для малых длин Н-связи О—N существенной становится компонента с переносом заряда. За счет эффекта ОБ, найденного значительно большим для  $\text{H}_2\text{O}$ , чем для  $\text{HNO}$ , происходит увеличение  $R_p$  и уменьшение глубины потенциального минимума. Показано, что основной вклад ОБ дает в компоненту с переносом заряда, и ее учет приводит к заметному снижению электронной заселенности Н-связи между атомами О и Н, уменьшению электр. Пт на этих атомах и дипольного момента, индуцируемого при сближении  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{HNO}$ . А. Н. И.

$\text{NaH}_4 + \text{O}_3$  (DM. 29097) 1988

Lascola R., Withnall  
R. et al.

ИК спектры  
в  
жидкой фазе

Inorg. Chem., 1988,  
27, N4, 642-648.

HO-NO

1988

Toro-Labbé Alejandro.

J. Mol. Struct. Theochem.

1988. 180, p. 209-221.

Vep.

(see ● CHD-SH; III)