

NCEO

1912

Brinner E., Pylkoff Z.,

Испавува

A. 2.

J. chim. phys. et phys. chim.
bid., 1912, 10, 640

N 203



ΔH_f° (NO₂, 2)

1924
Trautz H., Schleuter H.,

Муравина
А. П.

Z. anorgan. und allgem.
chem., 1924, 136; 1

N 206

ΔH_f° (NOCl₂)

NOCl (V; LONCE)

10 2618 1934

Bailey C.R., Cassie A.B.D.

Proc. Roy. Soc. (London) 1934, A 145, 336-Y

" Infrared region of the spectrum.
Asymmetrical molecule nitrosyl chloride,
NOCl."

10

C.A., 1935, 17117

2784-111

ClNO ($\angle \text{Cl-O}$; $\angle \text{Cl-N}$; $\angle \text{N-O}$; $\angle \text{ClNO}$) 1937

BrNO ($\angle \text{Br-O}$; $\angle \text{Br-N}$; $\angle \text{N-O}$; $\angle \text{BrNO}$)

Ketelaar J.A.A., Palmer K.J.

J. Am. Chem. Soc., 1937, 59.

2629-33

"Electron diffraction investigation
of nitrosyl chloride and nitrosyl
bromide"

G.A., 1938, 1537³

NOCl (2_{Cl-N} ; 2_{Cl-O} ; 2_{N-O}) 2831-III 1938
NOBr₂ (2_{Br-N} ; 2_{Br-O} ; 2_{N-O})

Ketelaar J. A. A.

Atti X^o Congr. intern. chim. 1938, 2, 301-3

" NO_2 molecular structure of NOCl
and NOBr₂ "

10

C.A., 1939, 7635 ^{1, 2}

NOce C.F. Goodeve. S. Katz 1939

мануск. ^{со ртутно.} Proc. Roy. Soc. A, 172, 1939₂
стр 432

↓↑ Видман и Блукон уФ. ебн.
 $NO + O_2$

6431 A° - 1970 Å. И новое

переход в отсечивающиеся
состояния, поведен. кривая
которых не имеет мини-
мумов

NOCE W. CPzice. Simpson 1941

Trans. Far. Soc 37, 106 (1941)

Счетчик попомы. NOCE

Передатчик не дает сигнала.

Обл. вакуумного ультрафиолета

с макс при 1900 Å. Скорость

с 1550-1850 Å системами NO2

и 2300-1800 Å.

NOCE (2 v.o., I_A)

853-III

1950

Bernstein H. J.

J. Chem. Phys., 1950, 18, 1514

Structure of nitryl chloride from
the microwave absorption spectrum

10



C.A. 951, 1424g

2

Noce
Noce
U.K. chempp

W. E. Burns R. J. Bernstein

1950

J. Ch. Ph. 18, 1669 - 73

U.K. chempp Noce u Noce

Kace(1) nameu Noce

$$\nu_1 = 1832 \text{ cm}^{-1}$$

$$\nu_2 = 633 \text{ cm}^{-1}$$

$$\nu_3 = 932 \text{ cm}^{-1}$$

$$J_A = 9.05 \cdot 10^{-40} \text{ cm}^2; J_B = 147.7 \cdot 10^{-40} \text{ cm}^2$$

$$J_C = 156.7 \cdot 10^{-40} \text{ cm}^2$$

20.848.2 (ON) = 1.14 ± 0.02 A
(4)



$$z(\text{Noce}) = 1.95 \pm 0.01 \leq 0.012 \pm 0.002$$

Выводимые факторы казгем аниовые погорянные:
 $v_1 = 1799$ (~~1799~~) $f(N_0) = 13,27 \cdot 10^5$
 $v_2 = 592$ $f(N_0) = 1,92 \cdot 10^5$
 $v_3 = 332$ $f(Cl_0) = 1,30 \cdot 10^5$

NOBr. $N-Br = 2,14 \pm 0,02^\circ$, $N-O = 1,15 \pm 0,01$ $\angle ONBr = 117^\circ \pm 3^\circ$
 $v_1 = 1801$ $f(N_0) = 14,0 \cdot 10^5$
 $v_2 = 542$ $f(N-Br) = 2,18 \cdot 10^5$
 $v_3 = 265$ $f(Br-O) = 0,832$

Эксперимент, см/г/м
 $\Sigma_{298} 62,4 \pm 0,1$ NO
 $65,3 \pm 0,1$ $NOBr$
 Насл.
 $\Sigma_{298} 63,0 \pm 0,3$
 $65,2 \pm 0,3$

864-III

1950

CERO (cymosa)

Pietenpol W. J., Rogers J. D., Williams D.

Phys. Rev., 1950, 77, 741

microwave spectrum of nitrotyl chloride

2

10

C. A., 1951, 6052e

868-III

1950

Noel (vi)

Wise J.H., Elmer J.T.

J. Chem. Phys., 1950, 18, 1411

The infrared spectrum of nitrosyl
chloride.

CA, 1950, 44, 10304d

865-III

1951

NOCl ($v_i, \Delta S$)

Pulford A. G., Walsh A.

Trans. Faraday Soc., 1951, 47, 347-53Infrared spectrum and thermodynamic
constants of nitrosyl chloride

E. G. P. 1951

10

C.A., 1951, 8888 b ϕ

866-III

1951

NOCE (No. Co., Co.)

Rogers J. D., Pietenpol W. J., Williams D.

Phys. Rev., 1951, 83, 431-4

Microwave absorption spectrum of
nitrosyl chloride, NOCE

2

10

C.A., 1951, 8892f

1953

NOE

Ann. Rev. Phys. Chem.

1. Спектроскопия (основные
постоянн.)
2. Структура молекул.
3. Фотопиз.
- 4) Микроволновое изучение
молекулярной структуры
таблицы значений NOE.

858-III

1954

CH_3NHNO , $\text{C}_2\text{H}_5\text{NHNO}$
 NOCl , ~~CH_3NHNO , $\text{C}_2\text{H}_5\text{NHNO}$~~ (vi)

Hasseldine R. N., Jander J.

J. Chem. Soc., 1954, 691-5

Spectroscopy. VI. Ultraviolet and infrared
spectra of nitrosoamines, nitrites, and related
compounds

1 + 1

10

C.A., 1954, 5046i

1956

Woolley H.W.

Дорофеева

J. Res. Nat. Bur. Stand., 1956, 56, 105

107

сено (раз)



Терм. пункт.

1960

III-859

с. 10

ИК-спектр

ЗВ158. Инфракрасный спектр и потенциальная функция хлористого нитрозила. Landau L., Fletcher W. H. The infrared spectrum and potential function of nitrosyl chloride. «J. Molec. Spectrosc.», 1960, 4, № 3, 276—283 (англ.).—В области $6000—300\text{ см}^{-1}$ получен ИК-спектр ClN^{15}O и ClN^{14}O . Проведена интерпретация спектра, определены основные частоты и постоянные ангармоничности для обеих молекул ($\nu_1 = 1769,0; 1800,0; \nu_2 = 589,7; 604,7; \nu_3 = 330,6; 332,4\text{ см}^{-1}$ для ClN^{15}O и ClN^{14}O соответственно). В предположении, что между атомами Cl и O имеются Ван-дер-Ваальсовы силы отталкивания с постоянной $A = 0,014\text{ мдн} \cdot \text{\AA}^{-1}$, рассчитаны силовые постоянные $K_{\text{NO}} = 14,12$ и $K_{\text{NCl}} = 1,70\text{ мдн} \cdot \text{\AA}^{-1}$ и $K_\gamma = 0,827 \cdot 10^{-11}\text{ эрг} \cdot \text{радиан}^{-2}$. Эти постоянные мало меняются, если предположить, что имеется только взаимодействие, вызванное изменением орбитальной гибридизации. Вычислены основные частоты для изотопов $\text{Cl}^{35}\text{N}^{14}\text{O}^{18}$ и $\text{Cl}^{37}\text{N}^{14}\text{O}^{16}$.
О. Гири

р 1961-3

ClNO

III - 859

1960

) The infrared spectrum and potential function of nitrosyl chloride. L. Landau and W. H. Fletcher (Oak Ridge Natl. Lab., Oak Ridge, Tenn.). *J. Mol. Spectroscopy* 4, 276-83(1960); cf. Eberhardt and Burke, *CA* 46, 8964f.—Prism infrared spectrometric data for ClN^{15}O and ClN^{14}O have yielded information for the detn. of a satisfactory potential field and for providing data for the calcn. of fractionation factors in *isotope sepn. processes*. Observed bands are listed and the harmonic frequencies and anharmonic consts. are calcd. The potential field could be described by using a van der Waals repulsion term between the Cl and O atoms, or by assuming that the only interaction was one due to change in orbital hybridization which coupled the bending with the N-Cl stretch. Force consts. for both cases are given.
Robert A. Bleidt

C.A. 1961, 55, 17.
16142, h

NOCE

Бор - 5257-III

1960

Maier W.

(M)

Обзор:

"Microwave spectroscopy"

Noc

1960

2 Low-frequency vibration rotation bands of ND_3 , NOCl , and CH_3CCH . Walter W. Brim (Ohio State Univ., Columbus). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.), *L.C. Card* No. Mic 60-4063, 152 pp.; *Dissertation Abstr.* 21, 769 (1960). P. M. B.

+ 2 copy-

C.A. 1961.55.9.8038h

(X)

1961

NOCl
gassing

+) Vibrationally excited nitric oxide produced in the flash photolysis of nitrosyl chloride. N. Basco and R. G. W. Norrish (Univ. Cambridge, Engl.). *Nature* 189, 455-6 (1961).—The isothermal flash photolysis of NOCl in the presence of excess inert gas has shown that very highly vibrationally excited NO is produced in the primary photolytic process. Most of the absorbed energy in excess of the energy required to dissociate the mol. can appear as vibrational energy in the products. H. Gesser

C.A. 1961.55.13.1202ad

1961

NOF, NOCl, NOBr, NO₂F, NO₂Cl

(силовые постоянные)

NO₂F (γ_i)

Devlin J.P., Hisatsune I.C.

Spectrochim. acta, 1961, 17, N 2,
206-217 (англ.)

Силовые постоянные Юри-Бредли
для молекул нитрозил - и нитрилгалогенидов

РХ., 1961, 246131

Wose
m

III - 862 - ВР

1961

12В263. Микроволновый спектр, структура и константы ядерного квадрупольного взаимодействия нитрозилхлорида. Millen D. J., Pannell J. The microwave spectrum, structure, and nuclear quadrupole coupling coefficients of nitrosyl chloride. «J. Chem. Soc.», 1961, March, 1322—1328 (англ.).—В диапазоне 10—32 кМгц изучены микроволн. спектры изотопич. комбинаций нитрозилхлорида. Определены спектральные константы, рассчитана структура молекулы. Расстояния NCl и NO найдены равными (в Å): $1,975 \pm 0,005$ и $1,139 \pm 0,012$. Угол ONCl составил $113^{\circ}20' \pm 40$. Константы квадрупольной связи eQq_{aa} для $\text{NO}^{18}\text{Cl}^{35}$ и $\text{NO}^{18}\text{Cl}^{37}$ равны (в Мгц) —48,7 и —38,4. Параметры асимметрии η составили в обоих случаях 0,207. Н. Померанцев

III
ВР-5250-III

ф. 1961.12

Noce

III-862-BP

1961

The microwave spectrum, structure, and nuclear quadrupole coupling coefficients of nitrosyl chloride. D. J. Millen and J. Pannell (Univ. Coll., London). *J. Chem. Soc.* 1961, 1322-8.—NOCl, enriched in O^{18} , was prepd. and, from its microwave spectrum, rotational consts. were evaluated. These were combined with those of Cl^{35} and Cl^{37} of normal nitrosyl chloride to yield the mol. consts. r_{N-Cl} 1.975 Å., r_{N-O} 1.139 Å., and $\angle ONCl$ $113^{\circ}20'$. From the hyperfine structure of the spectra, Cl nuclear quadrupole coupling parameters $eQ\partial^2 V/\partial a^2$ -48.7, $eQ\partial^2 V/\partial b^2$ 29.4, $eQ\partial^2 V/\partial c^2$ 19.3 Mc./sec. were found for $NO^{16}Cl^{35}$ and $eQ\partial^2 V/\partial a^2$ -38.4, $eQ\partial^2 V/\partial b^2$ 23.2, and $eQ\partial^2 V/\partial c^2$ 15.2 Mc/sec. for $NO^{16}Cl^{37}$. The coupling parameters were interpreted in terms of bond properties, compared with nitryl chloride; the N-Cl bond was more ionic and had more double-bond character.

Elizabeth Bosted

III
BP-5250-III

C.A. 1961. 55. 18
17230 ef

NOCl
м.в.

ВФ-5250-III

1961

175107. Микроволновый спектр, структура и постоянные ядерного квадрупольного взаимодействия хлористого нитрозила. Millen D. J., Pannell J. The microwave spectrum, structure, and nuclear quadrupole coupling coefficients of nitrosyl chloride. «J. Chem. Soc.», 1961, March, 1322—1328 (англ.).—В диапазоне 10—32 кМгц исследован вращательный спектр молекул $\text{NO}^{16}\text{Cl}^{35}$, $\text{NO}^{16}\text{Cl}^{37}$, $\text{NO}^{18}\text{Cl}^{35}$. Разрешена сверхтонкая структура, обусловленная ядрами хлора. Определены вращательные постоянные и моменты инерции, по изменению которых при изотопич. замещении вычислены длины связей (в А): N—Cl , 1,975; N—O 1,139 и угол ONCl $113^\circ 20'$. Анализ квадрупольного взаимодействия показывает, что связь N—Cl в молекуле NOCl имеет большую ионность и двоевязность, чем в молекуле NO_2Cl . Описан метод обогащения кислорода изотопом O^{18} .

Г. Шипуло

ж. 1962. 17

Носе
структура

БФ - 10 - 5317

1961

18Б111. Структура нитрозилхлорида. Rogers John D., Williams Dudley. Nitrosyl chloride structure. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 6, 2195—2196 (англ.).—На основании спектроскопич. вращательных констант NOCl определена мол. структура: $r(\text{N} - \text{Cl}) = 1,95 \pm 0,06$, $r(\text{N} - \text{O}) = 1,17 \pm 0,06$, $r(\text{O} - \text{Cl}) = 2,65 \pm 0,03 \text{ \AA}$; $\angle \text{ONCl} = 114^\circ \pm 3^\circ$. Эти данные хорошо согласуются с более ранними измерениями (Ketelaar J. A. A., Palmer K. J. «J. Amer. Chem. Soc.», 1937, 59, 2629).
В. Быховский

108-11-69

ГОСХ (К.)НОВ (К.)ИК спектр

11 Б90. Влияние окружения на инфракрасные спектры твердых NOCl и NOBr. Hisatsune I. C., Miller Paul, Jr. Environmental effects on infrared spectra of NOCl and NOBr solids. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962». S. 1., s. a., A306/1—A306/4 (англ.)

В ИК-спектре поглощения твердого NOCl (I) при 80° К обнаружены дополнительные полосы, появляющиеся в тех случаях, когда: а) I получали в избытке Cl₂, р-цию NO с Cl₂ проводили в твердой фазе при пониженных т-рах, б) I конденсировали вместе с Br₂. Возникновение этих полос объясняют образованием комплексов I с галогенами. Аналогичные явления наблюдали и в случае NOBr.

В. Юнгман

X-1963-11

21 Б52. Спектр трехатомной асимметричной молекулы в миллиметровой области. Хлористый нитрозил. Mirri A. M., Favero P., Guarnieri A., Semeraro G. Spettro millimetrico di molecole triatomiche asimmetriche. Cloruro di nitrosile. «Boll. scient. Fac. chim. industr. Bologna», 1962, 20, № 3-4, 110—114 (итал.; рез. англ.)

Предлагается метод корреляции данных, полученных из ИК- и микроволновых спектров при вычислении силовых констант. С этой целью исследован вращательный спектр в микроволновой области хлористого нитрозила, для которого уже имелись данные по ИК-спектрам. Из измерений по переходам $J = 7 \rightarrow 8$, $J = 8 \rightarrow 9$, $J = 9 \rightarrow 10$, $J = 10 \rightarrow 11$ определены константы центробежного растяжения, которые равны для соответствующих изотопных молекул: NOCl^{35} $D_J = 6,42$, $D_{JK} = -58,3$, $\delta_J = 0,384$; NOCl^{37} $D_J = 5,31$, $D_{JK} = -56,2$, $\delta_J = 0,871$ кгц. Проведено сравнение между эксперим. значениями полученных констант и теоретическими, вычисленными по методу Вилсона. В. М.

X-1963-21

1962

B91-2683-11

NOCl

BP-2683-III

1962

вкладыш,
но не журнал

Millimeter spectrum of asymmetric triatomic nitrosyl chloride molecules. A. M. Mirri, P. Favero, A. Guarnieri, and G. Semerano (Univ. Padua, Italy). *Boll. Sci. Fac. Chim. Ind. Bologna* 20, 110-14(1962). The "a" type transitions corresponding to $J = 7 \rightarrow 8$, $8 \rightarrow 9$, $9 \rightarrow 10$, and $10 \rightarrow 11$ of NO^{35}Cl and NO^{37}Cl were studied in the frequency region 80-120 kMc. The centrifugal distortion consts. were $D_J = 6.42$, $D_{JK} = -58.3$, $\delta_J = 0.384$, $R_6 = 0.044$, and $R_{10} = -173$ for NO^{35}Cl , and $D_J = 5.31$, $D_{JK} = -56.2$, $\delta_J = 0.871$, and $R_{10} = -410$ for NO^{37}Cl . Comparison with values obtained by calcn. showed a discrepancy in the case of D_{JK} . 16 references.

Catriona Crawford

C.A. 1963. 5B. 12
12091 h

ВФ - 4297 - III 1963

ONCl

Durig J., Lord R.

вращат. спектр Spectrochim. acta, 1963, 19,
N 2, 421-429

Чисто вращат. спектр по-
мощения ONF и ONCl в
области 80-250 μ .

(см. ONF)
III

3 Б101. Эффект окружения в инфракрасных спектрах NOCl и NOBr в твердом состоянии. Hisatsune I. C., Miller Paul, Jr. Environmental effects on the infrared spectra of NOCl and NOBr solids. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 1, 49—54 (англ.)

Исследованы ИК-спектры твердых NOCl и NOBr при т-ре 80—90° К. NOCl и NOBr получены при взаимодействии NO с Cl₂ и Br₂ соответственно в газовой фазе с последующим охлаждением. Полосы нормальных колебаний в спектре NOCl в твердом состоянии ($\nu_1=1944-1954$, $\nu_2=462-492$ см⁻¹) сильно смещены по сравнению со спектром этого в-ва в газообразном состоянии ($\nu_1=1800$, $\nu_2=596$ см⁻¹). Аналогичные смещения наблюдаются и в спектрах NOBr в твердой фазе $\nu_1=1888$, $\nu_2=487$ см⁻¹, в газе $\nu_1=1801$, $\nu_2=542$ см⁻¹. В спектрах твердых в-в положение полос, их форма и характер дополнительных полос зависят от состава твердой фазы: избытка NO или галогена в смеси. Эти спектры изменяются также при прогревании образцов до т-ры —148° С. Исследованы также ИК-спектры смеси твердых NO и Cl₂, а также NO и Br₂ при низких т-рах. Между компонентами этих смесей происходит р-ция, причем спектры продуктов ее

1963

III

5097-111

69-5097-111

см.

нр.б.

NOCl

NOBr

(16)

И. К. Мещеряков

Бр-23/88-1

X. 1964.3

аналогичны спектрам NOCl и NOBr в присутствии избытка соответствующего галогена. В твердом состоянии молекулы NOX имеют в значительной мере ионный характер (структура NO^+X^-). Вследствие этого полоса колебания ν_1 смещается в коротковолновую область, а ν_2 — в длинноволновую область. Образование дополнительных полос в области поглощения колебаний ν_1 и ν_2 объясняется авторами как следствие образования молекулярных комплексов между молекулами нитрозилгалогенида и галогена.

Ю. Киссин

носе

(86.)

И. К. Шеня

11-8/52-68

ф. 1963. 118

11 Д295. Эффекты окружения в ИК-спектрах твердых NOCl и NOBr. Hisatsune I. C., Miller Paul, Jr. Environmental effects on the infrared spectra of NOCl and NOBr solids. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 1, 49—54 (англ.)

Впервые исследованы ИК-спектры NOCl и NOBr в твердом состоянии при низких т-рах. Твердые нитрозилы галогенидов получены непосредственным соединением паров галогенов с окисью азота с их последующим охлаждением. При этом возможны соединения с избытком NO, избытком Cl₂ или Br₂. ИК-спектры твердых NOCl и NOBr в общем похожи на спектры соответствующих газов. Наблюдались две основные полосы ν_1 и ν_2 , связанные с вал. кол.. Положение полос и их форма сильно зависят от избытка NO, Cl₂ или Br₂ в соединении. Частоты ν_1 и ν_2 твердых NOCl и NOBr значительно смещены по сравнению с газами NOCl и NOBr. Другой особенностью является наличие вблизи основных колебаний ν_1 и ν_2 слабых полос — сателлитов, что может быть обусловлено образованием молекулярных комплексов между галогенами и нитрозилами галогенидов.

А. Карамян

1963

11-8/52-68

NOCE

(ср-па)

| 30-5251-III | 1963

Mirri A. M.
Favero P. ugr.

p. 110-114

(с.м.а.к.)

НОС

ВФ-4199-III

1965

ЗД357. Константы квадрупольной связи азота в NOCl и NOBr. Guarnieri A., Favero P. G. Quadrupole coupling constants of nitrogen in NOCl and NOBr. «Nuovo cimento», 1965, 39, № 1, 76—83 (англ.; рез. итал.)

При помощи микроволн. спектрометра с высокой разрешающей способностью для переходов $1_{11} \rightarrow 2_{12}$ и $1_{10} \rightarrow 2_{11}$ измерены константы квадрупольной связи в молекулах NOCl и NOBr. Определены также вращательные постоянные B и C .

ф. 1966. 3Д

Д

NOCl
NOBr

B9p-4199-III

1965

Quadrupole coupling constants of nitrogen in NOCl and NO-Br. A. Guarnieri and P. G. Favero (Univ. Bologna, Italy). *Nuovo Cimento* 39(1), 76-83(1965)(Eng). The frequencies of the $1_{11} \rightarrow 2_{12}$ and $1_{10} \rightarrow 2_{11}$ rotational lines of NO^{35}Cl , NO^{37}Cl , NO^{79}Br , and NO^{81}Br were measured at dry ice temp., by using a high-resolution microwave spectrometer, and the title consts. were detd. The values of these consts. are consistent with the presence of a single electron pair located along a direction near that of the b axis, as predicted from an sp^2 -type hybridization of N in NOCl and NOBr.

BGIN

C.A. 1965.63.11

14051e

ON ¹⁴CC 35

Venkateswarlu K., 1965

ON ¹⁴CC 35

Marium S.

Indian J. Pure and Appl.

u. u.

Phys., 3, 14, 117-119.

Monographische chemische
reihe: unorganische mo-
lekulare Chemie X 92.



(in H₂O)

III

¹⁵ NOce

¹⁴ NOce

Venkateswarlu K., 1965
Mariam S.

Proc. Indian Acad. Sci.,
Sect. A, 61, N4, 260

Средние амплитуды ко-
лебаний. Нелинейное
молекулы типа XYZ.

(см. HDO) III

roce

XIII - 1701 - B9D

1966

Millimeter wave spectra of NOCl and NOBr and force constant determination. Anna M. Mirri and E. Mazzariol (Univ. Bologna, Italy). *Spectrochim. Acta* 22(5), 785-92(1966)(Eng). First-order centrifugal distortion consts. of NO^{35}Cl and NO^{37}Cl and of NO^{79}Br have been obtained from mm. wave rotational spectra. Their values in kc./sec. are: $D_J = 6.35 \pm 0.2$, $D_{JK} = -58.5 \pm 2$ for NO^{35}Cl ; $D_J = 6.01 \pm 0.2$, $D_{JK} = -57.4 \pm 2$ for NO^{37}Cl ; $D_J = 3.05 \pm 0.1$, $D_{JK} = -54.8 \pm 2$ for NO^{79}Br . By using microwave and ir data all the force consts. of the general force field have been detd. for both mols. RCSQ

C.A. 1966. 65.2
1623e



NO³⁵Cl
NO³⁷Cl

(м.п.;
силовые
пост.;)

XIII - 1-й сер. - 157

1966

2 Д260. Спектр NOCl и NOBr в области миллиметровых длин волн и определение силовых постоянных. Mirri Anna M., Mazzariol E. Millimeter wave spectra of NOCl and NOBr and force constant determination. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 5, 785—792 (англ.)

Исследован вращательный спектр NO³⁵Cl (I), NO³⁷Cl (II) и NO⁷⁹Br (III) в области миллиметровых длин волн. Определены постоянные центробежной дисторсии первого порядка (в кгц): $D_J = 6,35 \pm 0,2$, $D_{JK} = -58,5 \pm 2$ для I, $D_J = 6,01 \pm 0,2$, $D_{JK} = -57,4 \pm 2$ для II и $D_J = 3,05 \pm 0,1$, $D_{JK} = -54,8 \pm 2$ для III. На основании данных микроволн. и ИК-спектров определены силовые постоянные для модели обобщенного силового поля.

И. Милевская

ф. 1967. 220

Д

NOCl

миллр

NOCl³⁵

NOCl³⁷

XIII - 1701-ВР

1966

6 Б225. Спектр NOCl и NOBr в области миллиметровых волн и определение силовых постоянных. Mirri Anna M., Mazzariol E. Millimeter wave spectra of NOCl and NOBr and force constant determination. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 5, 785—792 (англ.)

Исследованы вращательные спектры NOCl³⁵ (I), NOCl³⁷ (II) и NOBr⁷⁹ (III) в области миллиметровых волн. Определены центробежные постоянные 1-го порядка (в кгц): для I — $D_J = 6,35 \pm 0,2$, $D_{JK} = -58,5 \pm 2$; для II $D_J = 6,01 \pm 0,2$, $D_{JK} = -57,4 \pm 2$; для III $D_J = 3,05 \pm 0,1$, $D_{JK} = -54,8 \pm 2$. На основании микроволновых данных и

ИК-спектров определены силовые постоянные для модели обобщенного силового поля. И. Милевская

а. 1967.6

18

НОСЕ

1966

9 Б39. Электронные конфигурации, поляризуемости, средние амплитуды колебаний и термодинамические функции некоторых нелинейных асимметричных трехатомных молекул. Nagarajan G. Electronic configurations, molecular polarizabilities, mean amplitudes of vibration and thermodynamic functions of some non-linear asymmetrical triatomic molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1966, 4, № 6, 244—250 (англ.)

С помощью правила октетов Льюиса — Лэнгмюра, модифицированного Линнеттом (РЖХим, 1962, 8Б5), определены электронные конфигурации ряда нитрозилгалогенидов, NOCl и NSF. Найденные электронные конфигурации хорошо согласуются с имеющимися структурными данными. Поляризуемости связей и моле-

744

XIII

☒

Электрон.
конфигурация

(Т.ф.)

х. 1967. 9

кул в целом рассчитаны методом Липпинкотта — Штутмана с использованием δ -образной модели хим. связи Липпинкотта — Шредера. В рамках модели молекул, основанной на допущении жесткого вращения и гармонич. колебаний, рассчитаны все термодинамич. функции в диапазоне т-р $100-6000^\circ \text{K}$; все рассчитанные функции представлены в таблице. Результаты сопоставлены с имеющимися эксперим. данными и данными др. авторов.

В. Быховский

No 102

1966

Electronic configurations, molecular polarizabilities, mean amplitudes of vibration, and thermodynamic functions of some nonlinear asymmetrical triatomic molecules. G. Nagarajan (Univ. of Maryland, College Park). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 4(6), 244-50(1966)(Eng). The nonlinear asym. triat. mols. of nitrosyl halides NOF, $^{14}\text{N}^{16}\text{O}^{35}\text{Cl}$, $^{14}\text{N}^{16}\text{O}^{37}\text{Cl}$, $^{14}\text{N}^{18}\text{O}^{35}\text{Cl}$, $^{15}\text{N}^{16}\text{O}^{35}\text{Cl}$, NOBr, hydrogen oxychloride (HOCl) and DOCl and nitrogen sulfofluoride(NSF) were subjected to the following detns. Electronic configurations were detd. by using the Lewis-Langmuir octet rule as modified by Linnett. Mol. polarizabilities were evaluated by the semiempirical method of Lippincott and Stutman. The mean amplitudes of vibration for the bonded and nonbonded atom pairs were calcd. by using the secular equation of Cyvin. Thermodynamic functions such as heat content, free energy, entropy, and heat capacity were calcd. in the temp. range 100-6000°K. on the basis of a rigid rotator, harmonic oscillator model. The org. mols. assoc. in the liquid state and not in the vapor state.

V. S. Ramachandran

+11

C.A. 1966

65.11

16258 g

7/1/66 - 11/1/66

☒

NOCl

Welge K. H.

1966

fluorogenic.

J. Chem. Phys., 45(4), 1113

Electronically excited
NO by photodissociation of
NO₂ and NOCl.

(see NO₂)

NOCl

XIII - 364 - ВР

1974

12 Б830. Фотодиссоциация NOCl и NO_2 в вакуумной ультрафиолетовой области. Leipzi M., Okabe H. Photodissociation of NOCl and NO_2 in the vacuum ultraviolet. «Internat. Conf. Photochem., München, 1967. Part 1. Preprints». Mulheim/Ruhr, 1967, 126—148 (англ.)

Исследована фотодиссоциация (ФД) NOCl и NO_2 в вакуумной УФ-области (водородная лампа) с образованием электронно-возбужденных молекул NO . Получены спектры флуоресценции (Фл) NO , лежащие в области λ 2200—4000 Å, измерены выходы и интенсивность Фл NO как ф-ция λ падающего света. Сравнивают спектры Фл со спектрами поглощения. Измерены коэф. поглощения NOCl в области 1100—2200 Å. При ФД

X. 1968. 12

12

NOCl спектр поглощения NO в интервале 1100—1700 Å может быть разбит на 3 области, соответствующие переходам с образованием $\text{NO}(A^2\Sigma^+)$, $\text{NO}(C^2\Pi, D^2\Sigma^+)$ и $\text{NO}(B^1\ ^2\Delta, E^2\Sigma^+)$. В случае ФД NO_2 в интервале 1100—1450 Å обнаружены переходы с образованием $\text{NO}(A^2\Sigma^+, B^2\Pi)$, $\text{NO}(C^2\Pi, D^2\Sigma)$ и $\text{NO}(B^1\ ^2\Delta, \Sigma^2\Sigma^+)$ ниже соответствующего порога энергии. Пороговая энергия кванта света, приводящая к образованию $\text{NO}(A^2\Sigma^+, B^2\Pi)$, дает верхний предел энергии диссоциации, D , равный, соответственно, для NOCl и NO₂ $\leq 1,77 \pm 0,05$ и $\leq 3,22 \pm 0,05$ эв, что, соответственно, на 0,17 и 0,10 эв выше значений D , получаемых из данных по теплоте образования.

Резюме

NOCl

XIII - 304 - ВД

1967

7-Д812. Фотодиссоциация NOCl и NO₂ в вакуумной УФ-области. Lenzi M., Okabe H. Photodissociation of NOCl and NO₂ in the vacuum ultraviolet. «Internat. Conf. Photochem., München, 1967, Part 1. Preprints». Mulheim/Ruhr, 1967, 126—148 (англ.)

Изучена фотодиссоциация (ФД) NOCl (I) и NO₂ (II) в вакуумной УФ-области с образованием электронно-возбужденных молекул NO (III). Получены спектры флуоресценции (Фл) III в области λ 2200—4000 Å, измерены выходы и интенсивность Фл III как ф-ция λ падающего света. Спектры Фл сравнены со спектрами поглощения. Измерены коэф. поглощения I в области 1100—2200 Å. Спектр поглощения I в интервале 1100—1700 Å может быть разбит на 3 области, соответствующие переходам: NO A²Σ⁺, (NO C²Π, D²Σ⁺) и (NO B'²Δ, E²Σ⁺).

9. 1968. 7D

1D

В случае ФД II в интервале 1100—1450 Å имеют место переходы ($\text{NO } A^2\Sigma^+, B^3\Pi$), ($\text{NO } C^2\Pi, D^2\Sigma$) и ($\text{NO } B'^2\Delta, E^2\Sigma^+$), ниже соответствующего порога энергии. Пороговая энергия кванта света, приводящая к образованию $\text{NO } A^2\Sigma^+, B^2\Pi$ определяет верхний предел энергии диссоциации (D), равный соответственно для I и II $\leq 1,77 \pm \pm 0,05$ и $\leq 3,22 \pm 0,05$ эв, что соответственно на 0,17 и 0,10 эв выше значений D , получаемых из данных по теплоте образования.

А. Шведчиков

ONF, ONCl, ONBr, NSF, NSF₃, OPF₃, 1964
FClO₃, BF₃, BCl₃, BBr₃, B₂F₃ (cum. noes)

Sawodny W., Fadini A., V 6+10

Ball ein K., Can. Dep. Energy
Mines Resour., Mines Br., In-
form. Circ., 1967, № 197, 17pp.

10 (CP)

6 papers
6. box 5 bears

~~(y, 0.1100)~~

XIII - 314

1968

{81929} Vibrational spectra and force constants for isotopic species of nitrosyl chloride. Jones, Llewellyn H.; Ryan, Robert R.; Asprey, Larned B. (Los Alamos Sci. Lab., Los Alamos, N. Mex.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(2), 581-5 (Eng). From ir absorption studies in the gaseous phase, fundamental harmonic vibrational frequencies have been detd. for $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$, $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$, $^{18}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$, and $^{18}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$. With the aid of centrifugal distortion data from the literature, a unique general quadratic valence-force-const. soln. was obtained. The resulting values are: $F_{\text{NO}} = 15.26$ millidynes/A., $F_{\text{NCl}} = 1.27$ millidyne/A., $F_{\alpha} = 1.32$ millidyne/A. radian², $F_{\text{NO.NCl}} = 1.53$ millidyne/A., $F_{\text{NO},\alpha} = 0.1$ millidyne/radian, $F_{\text{NCl},\alpha} = 0.12$ millidyne/radian.

RCJQ

C.A. 1968. 09-20

ONCl

XIII - 314

1968

7 Б183. Колебательные спектры и силовые постоянные изотопических разновидностей нитрозилхлорида. Jones Llewellyn H., Ryan Robert R., Asprey Larned B. Vibrational spectra and force constants for isotopic species of nitrosyl chloride. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 2, 581—585 (англ.)

Исследованы ИК-спектры изотопич. разновидностей $O^{16}N^{14}Cl^{35}$, $O^{16}N^{15}Cl^{35}$, $O^{18}N^{14}Cl^{35}$ и $O^{18}N^{15}Cl^{35}$ молекулы ONCl. Идентифицированы полосы основных колебаний, обертонов и составных тонов. Определены значения нулевых частот ω_0^l и постоянных ангармонич. x_{ij} . Из ω_0^l и

м.и.;
см.ч.;
строение

X. 1969. 7

лит. данных по постоянным центробежного искажения методом наименьших квадратов вычислены силовые постоянные наиболее общего силового поля $ONCl$, $F_{No} 15,26$, $F_{NCl} = 1,27$ $F_{No, NCl} = 1,53$ $мдн/А$, $F_{\alpha} = 1,32$ $мдн/Арад^2$, $F_{No, \alpha} = 0,1$ и $F_{NCl, \alpha} = 0,12$ $мдн/рад$. Из этих значений, силовых постоянных вычислены средние-квадратичные амплитуды колебаний, постоянные кориолисового взаимодействия, дефект инерции, распределение потенциальной энергии по внутренним колебательным координатам и внутренние смещения атомов при нормальных колебаниях.

М. Р. Алиев

ONCl

XIII - 34

1968

спектр,

м.и.

di

3 Д160. Колебательный спектр и силовые постоянные изотопных модификаций нитрозилхлорида. Jones Llewellyn H., Ryan Robert R., Asprey Langed B. Vibrational spectra and force constants for isotopic species of nitrosyl chloride. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 2, 581—585 (англ.)

Заново измерен спектр четырех изотопных модификаций молекулы $\text{ONCl} : \text{O}^{16}\text{N}^{14}\text{Cl}^{35}, \text{O}^{18}\text{N}^{14}\text{Cl}^{35}, \text{O}^{16}\text{N}^{15}\text{Cl}^{35}, \text{O}^{18}\text{N}^{15}\text{Cl}^{35}$. С большой точностью определены центры фундаментальных комбинационных полос. На основе этого вычислены постоянные ангармоничности. С помощью известных значений постоянных центробежного искажения определены шесть силовых постоянных валентно-силового поля по методу наименьших квадратов. С использованием полученного силового поля вычисле-

09.1969.

3D



ны все гармонич. частоты и постоянные центробежного искажения, а также кориолисовы постоянные, средние амплитуды и дефекты инерции. Полученное силовое поле сравнивается с полями, вычисленными с использованием одних только частот. Молекулярные постоянные, вычисленные из каждого силового поля, сравниваются с экспериментальными. Лучшее совпадение наблюдается для силового поля. Результаты сравниваются с результатами, полученными ранее для молекулы ONF. Обсуждаются различные характерные особенности силового поля молекулы ONCl. Утверждается, что использование данных о кориолисовых постоянных, дефектах инерции и постоянных центробежного искажения полезно для нахождения правильного силового поля, чего нельзя сказать пока о средних амплитудах.

Е. И. Креденцер

NOCl

ВГ - XII - 368

1968

NO₂

Зарядки

2 Б1076. Фотодиссоциация NOCl и NO₂ в вакуумной ультрафиолетовой области. Lenzi M., Okabe H. Photodissociation of NOCl and NO₂ in the vacuum ultraviolet.

«Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1968, 72, № 2, 168—173
(англ.)
См. РЖХим, 1968, 12Б830

+ 1 мб

х. 1969. 2



NOce
(D No-ce)

NO₂
(D No-o)

фотодиссоциация

ВГУ- XIII 368

1968

2 Д929. Фотодиссоциация NOCl и NO₂ в вакуумной УФ-области спектра. Lenzi M., Okabe H. Photodissociation of NOCl and NO₂ in the vacuum ultraviolet. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1968, 72, № 2, 1168—1173 (англ.)

Фотодиссоциация NOCl и NO₂ под воздействием УФ-излучения в вакуумной области приводит к образованию молекул NO в возбужденном состоянии, флуоресцирующих в ближней УФ-области спектра. Спектр флуоресценции смещается в область выше 220 нм с уменьшением частоты возбуждающего излучения, что объясняется образованием при облучении NO C²Π, D²Σ⁺, B'²Δ, E²Σ⁺ одновременно с NO A²Σ⁺, B²Π. Найдено, что спектр возбуждения флуоресценции коррелирует со спектром погло-

(Линд)

09. 1969. 27

щения системы. Спектр поглощения измерен в области 110—220 нм. Электронный спектр поглощения NOCl при 110—1170 нм можно разделить на три области, отвечающие переходам NO $A^2\Sigma^+$, NO $C^2\Pi$, $D^2\Sigma^+$ и NO $B'^2\Delta$, $E^2\Sigma^+$. Энергия перехода NO $A^2\Sigma^+$, $B^2\Pi$ отвечает верхнему пределу энергии диссоциации связи. В соответствии с этим найдены энергии диссоциации: $D(\text{NO}-\text{Cl}) \leq 1,77 \pm 0,05$ эв и $D(\text{NO}-\text{O}) \leq 3,22 \pm 0,05$ эв. Полученные значения выше тех, что определялись из теплоты образования на 0,17 и 0,10 эв соответственно.

Резюме

13

XII. 358

1969

Cur. n., Vi. n. n. (ONBr) ONCE; ONF
 Laane F., Jones L. H., Ryan R. R.,
 Asprey L. B.

J. molec. Spectrosc., 1969, 80, 23, 489-492
 (aug)

Vibrational spectra and force constants
 for isotopic species of nitrosyl bromi-
 de.

Puckner, 1970, 25184

10

4



NSF, NSC, ONF, ONCE, ONBr 1. 1969
(cur. uses.) 13 XIII 498

Peacock C. J., Heidborn U., Müller A.
J. Mol. Spectrosc., 1969, 30(2), 338-44.

~~Properties of the eigen vector~~
~~matrix $\frac{1}{2} C \frac{1}{2} H$ in the~~ theory of g
molecular vibrations.

10



CA, 1969, 70, 522, 997218

NOce

XIII-862

1970

4 Д182. Решение обратной вековой задачи методом Монте-Карло. Špirko V., Morávek J. Solution of the inverse secular problem by «Monte Carlo» method. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 33, № 2, 368—374 (англ.)

Метод Монте-Карло применен к восстановлению квадратной матрицы H по ее спектру. Этим методом определяются случайные оценки в физически разумных пределах, а затем эти оценки используются как исходное приближение к итерационной процедуре. Метод использован для расчета параметров спектра ЯМР винильных протонов акрилонитрила и силовых постоянных поля Юри—Бредли молекул $^{14}\text{NOCl}$ и $^{15}\text{NOCl}$. В приложении рассмотрено применение метода Монте-Карло к решению операторных ур-ний.

М. Р. Алиев

Сем. И.

метод

Ф. 1871. 48

(+1) метод

ⓧ

NOCE

Enoleman R. J.,
Reese P. E.

1971

promises
to work for

J. Biol. Spectrosc.,

1971, 37, 2, 240.

(See NO 11)

NOCE

1971

5 Б22. Применение метода ПДП/2 к исследованию электронного строения хлористого нитрозила. Rajzmann Michel, Pouzard Guy, Bouscasse Luc.

Application de la méthode CNDO/2 à la détermination de la structure électronique du chlorure de nitrosyle. «C. r. Acad. sci.», 1971, C273, № 9, 595—597 (франц.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ПДП/2 с учетом конфигурац. взаимодействия в варианте Дель Бене и Джаффе (J. Chem. Phys., 1968, 48, 1307) исследовано электронное строение хлористого нитрозила. Энергии синглет-синглетных $n-\pi^*$ - и $\pi-\pi^*$ -переходов хорошо согласуются с опытными данными. Рассчитаны распределения зарядов и дипольный момент (1,9 D; опытные данные/1,3—1,8 D). В. И. Лебедев

расчет
Ei

X. 1972. 5

1971

NOCl

155097j Electronic structure of nitrosyl chloride determined by application of the CNDO/2 [complete neglect of differential overlap] method. Rajzmann, Michel; Pouzard, Guy; Bouscasse, Luc (Dep. Chim. Org., Univ. Provence, Marseilles, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Ser. C* 1971, 273(9), 595-7 (Fr). Calcns., with the CNDO/2 method modified by J. Del Bene and H. H. Jaffe (1968), of the electronic structure of NOCl gave a dipole moment (1.90 D) and energies for the $n \rightarrow \pi^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$, and $\pi \rightarrow \pi_*$ (sic) singlet-singlet transitions (2.01, 6.36, and 8.22 eV, resp.) that agree with expt. Configuration interaction was limited to singly-excited states.

(Te)

ub. mex.

pawet

C. A. 1971. 75. 26

ВФ-ХИ-1472 1971

ONCl

2 Б215. Молекулярные константы некоторых азотистогалоидных соединений. II. Нитрозил хлорид и нитрозил бромид. Ramaswamy K., Namasivayam R. Molecular constants of some nitrogen halogen compounds II Nitrosyl chloride and nitrosyl bromide. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1971, 247, № 1—2, 8—12 (англ.)

Di

Методом Эрранца и Кастаньо вычислены силовые постоянные, средние амплитуды колебаний, вращательные постоянные и кориолисовы константы связи для ONCl (I) и ONBr (II). Показано, что указанный метод применим для расчета молек. констант I и II. Вал. силовые постоянные N—Cl в I, N—Br в II и N—O в I и II, а также деформац. силовые постоянные завышены по сравнению со значениями, полученными другими методами. Высокие значения недиагонального коэф. связь—угол указывают на значит. смещение форм различных колебаний.

М.Н.

Е. Разумова

(H)

X. 1972.2



NOCl

BP-XIII 1472

1971

(53171n) Molecular constants of some nitrogen-halogen compounds. II. Nitrosyl chloride and nitrosyl bromide. Ramaswamy, K.; Namasivayam, R. (Dep. Phys., Annamalai Univ., Annamalai Nagar, India). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1971, 247(1-2), 8-12 (Eng). The potential energy consts., vibrational mean amplitudes, rotational distortion consts., and Coriolis coupling consts. for NOCl and NOBr mols. were calcd. by Herzanz method which is suitable for these mols. to det. the exact force field. Friedrich Epstein

Cl-N-O

+1

C.A. 1971. 45. 8



NOCl

1972

17 Б1111. Спектры продуктов фотодиссоциации трехатомных молекул. III. Фотодиссоциация NOCl. Busch George E., Wilson Kent R. Triatomic photofragment spectra. III. NOCl photodissociation. «J. Chem. Phys.», 1972, 56, № 7, 3655—3664 (англ.)

Изучено распределение энергии между осколочными продуктами фотодиссоциации (ФД) NOCl при действии поляризованного света лазера с $\lambda 3471$ Å. Найдено, что ~70% всей энергии приходится на долю энергии поступательного движения осколков. Хотя энергетически возможно образование NO в состояниях с $v=1, 2, 3$, проведенные расчеты показывают, что основная доля колебательно возбужденных молекул находится в состоянии с $v=0$ и почти вся внутренняя энергия идет на возбуждение вращательного движения NO. Измере-

Фотодиссоциация

X.1972.14

но угловое распределение (УР) продуктов ФД. Показано, что УР имеет максимум в направлении, параллельном вектору электрич. поля E и близко к нулю в направлении, перпендикулярном E . Это указывает, что переходный дипольный момент лежит в плоскости молекулы и параллелен связи $N-Cl$. Сделан вывод, что при облучении светом с $\lambda 3471 \text{ Å}$ происходит возбуждение $NOCl$ в состояние с симметрией A' . Показано, что средн. время жизни возбужденного состояния мало по сравнению с периодом вращения $NOCl$ и равно $8 \cdot 10^{-14}$ сек. Сообщ. II сем. пред. реферат. Из резюме

1972

NOCl

119864u Triatomic photofragment spectra. III. Nitrosyl chloride photodissociation. Busch, George E.; Wilson, Kent R. (Dep. Chem., Univ. California, La Jolla, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1972, 56(7), 3655-64 (Eng). The photofragment spectrum was obtained of NOCl in the near uv at $28,810\text{ cm}^{-1}$ by crossing a molecular beam of NOCl with brief pulses of polarized laser light and then measuring the distributions of speed and direction of recoil of the photodissocn. fragments. Approx. 70% of the energy in excess of that required to break the ON-Cl bond goes into translational energy of the recoiling fragments. Although vibrational excitation of the NO fragment with $v = 1, 2$, or possibly 3 is energetically allowed, and up to $\sim 1000\text{ cm}^{-1}$ may be present in electronic excitation of the NO and Cl, the results are closely matched by a simple modified impulsive model which predicts that $v = 0$ and almost all of the internal energy goes into rotational motion of the NO. The exptl. angular distribution

photo-
guccayman

C.A. 1972.76.20

peaks along E, the elec. vector of the polarized light, and is nearly zero in the plane perpendicular to E, indicating that the transition moment lines in the mol. plane, probably close to the N-Cl bond. This means that the predominant transition at $28,810\text{ cm}^{-1}$ is to a state of A' symmetry. The very high angular anisotropy also shows that the av. lifetime in the excited state before disocn. is short compared to the rotational period of the mol. being at most $\sim 8 \times 10^{-14}$ sec.

H_2O ; $NOCl$; HPO_3^{2-} ; $P_2O_6^{4-}$ (см. ност.) 1972

Klíma P., Hajek B.,

XIII 2186

Sb. VŠCHT Praha, 1972, B15, 15-21
(англ.)

Computer programmes for the
force constants calculation.

Рис. 100, 1973, 165205

10

7

XIII - 2/20

1972

ONE, ONCE, ON BR (cccc. n, u. n.)
Ramaswamy R., Namasivayam R.
Acta Phys. Pol., 1972, A 41, N 2,
129-40 (anul.)

суд. и осм. (FCH_3 ; ClCH_3 ; BrCH_3 ; ICH_3 ; HCF_3 ; HCCl_3 ; HCB_3 ; HCl_3 ; HSiF_3 ; HSiCl_3 ; HSiBr_3 ; HSiI_3 ; ONF_3 ; OCH_2 ; OCCl_2 ; ONF ; ONCl ; ONBr) 1973

Schmidt K.H., Müller A., XVIII 249

J. Mol. Struct., 1973, 18, N1, 135-151 (англ.)

Pseudo-exact force constants by the high and low frequency separation method.

Рос. хим. 1974, 8580 10 4/14 6/20/1974

СВНО

XIII - 2804

1974

(18 Б177) Спектр поглощения ClNO в ультрафиолетовой и видимой областях. Ballash N. M., Armstrong D. A. On the ultraviolet and visible absorption spectrum of ClNO . «Spectrochim. acta», 1974, A30, № 4, 941—944 (англ.)

Измерен спектр поглощения хлористого нитрозила в области 1850—5400 Å при $t = 298 \pm 2^\circ \text{K}$. С целью исключения побочных эффектов использовался ClNO , приготовленный двумя различными способами. Обнаружены четыре полосы поглощения при 4720, 4360, 3380 и 1960 Å. Для первых трех полос коэф. экстинкции (ϵ) определены равными 7,18; 6,09 и 39,3 л. · моль⁻¹ · см⁻¹, соотв. и согласуются с имеющимися в лит-ре данными. Для полосы при 1960 Å $\epsilon = 20,960$ л. · моль⁻¹ · см⁻¹ и отличается от известных ранее значений, что, по мнению авторов, может быть связано с частичным фотолизом ClNO при регистрации спектра ниже 3000 Å.

Р. Г. М.

X. 1974. N 18

(+) Емилу

СЕЛО

XIII - 2807

1974

спектр

8 Д459. О спектре поглощения ClNO в видимой и УФ-области. Ballash N. M., Armstrong D. A. On the ultraviolet and visible absorption spectrum of ClNO. «Spectrochim. acta», 1974, А30, № 4, 941—944 (англ.)

Получены спектры поглощения ClNO в области 1850—5400 Å с ярко выраженными максимумами при 4720, 4360, 3300 и 1960 Å. Приведена таблица значений коэф. поглощения в зависимости от длины волны излучения в указанном спектральном диапазоне. Различие в величине поглощения вблизи 2000 Å для разных образцов приписано фотолизу ClNO во время измерений под воздействием излучения короче 3000 Å. Библ. 13. В. А.

Ф. 1974. №8

arce

1974

Muller A., Mohan N., Rai N.,
J. Chem. Phys., 1974,
60, N10, 3958-62.

$\Delta v_{\text{vib.}}$, расчет

(дефект инерции)

(см. H_2O ; III)

1974

С.Н.О.

Отчет по научно-иссл.
работе ИВТРАН, отдела №8

„Периодикализм св-ва
азота водорода и их соеди-
нений“

м.п.

NOF, NOCE (di) ^{1974.} XIII-3281

Shamir Y., Yellin D.,
Claassen H. H.

Isr. J. Chem., 1974, 12 (6),
1015-21.

Laser Raman spectra and
structure of halogen nitrates
(nitroxy-fluoride and nitroxy-
chloride).

C. A. 1975. 83 n 24. 199777a

10

(2)

ONCl

45-10070

1975

87809f Rotational spectrum of nitrosyl chloride in the (0,0,1) and (0,1,0) vibrational states and b type spectrum in the ground state. Comparison of force field obtained by different combinations of experimental data. Cazzoli, G.; Cervellati, R.; Mirri, A. M. (Lab. Spettrosc. Molecolare, Cons. Naz. Ric., Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 56(3), 422-31 (Eng). From the rotational spectrum of ONCl in the (0,0,1) and (0,1,0) excited vibrational states, the inertia defects in these states were detd. The b-type rotational spectrum in the ground state also was measured allowing the detn. of Δ^0 and of all the 1st-order centrifugal distortion consts. By using differences of inertia defects Δ_2 and Δ_3 together with centrifugal distortion consts. which do not involve the planarity relations and with harmonic vibrational frequencies of 2 isotopic species, the harmonic vibrational frequencies of 2 other isotopic species can be satisfactorily predicted. By using only inertia defects differences Δ_2 and Δ_3 as extra data, a definite choice can be made among the 3 sets of force consts. which equally well reproduce the harmonic frequencies of 4 isotopic species.

(u.n.)
bp. c.n.r.p.

C.A. 1975, 83 n 10

2602-111K
XIII-3092

#15-10070

1975

ONCl

М.П.

4 Б317. Вращательный спектр молекулы ONCl в колебательных состояниях $(0,0,1)$ и $(0,1,0)$ и переходы «b»-типа в основном состоянии. Сравнение силовых постоянных, полученных из различных комбинаций экспериментальных данных. Cazzoli G., Cervellati R., Mirri A. M. Rotational spectrum of ONCl in the $(0,0,1)$ and $(0,1,0)$ vibrational states and «b» type spectrum in the ground state. Comparison of force field obtained by different combinations of experimental data. «J. Mol. Spectrosc», 1975, 56, № 3, 422—431 (англ.)

В диапазоне 8—40 Гц измерен МВ-спектр молекулы ONCl³⁵. Идентифицированы линии вращательных переходов в основном колебательном состоянии и в первых возбужденных состояниях колебаний ν_2 и ν_3 .

XIII - 3092

X. 1976. N 4

Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных. Из значений частот колебаний изотопозамещенных $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$, $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$, $^{18}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ и $^{18}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ и дефектов инерции и квартичных центробежных постоянных $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ вычислены силовые постоянные ONCl. Расчет выполнен с использованием различных комбинаций эксперим. данных. При использовании всех данных получены два набора силовых постоянных, в к-рых силовые постоянные взаимодействия $f(\text{NO}-\text{NCl})$ и $f(\text{NO}-\alpha)$ отличаются друг от друга знаком.

М. Р. Алиев

ОКСЕ

(м.к.)

XIII-3092

① Ембю!

X 1976 N3

3 Д454. Вращательный спектр молекулы ONCl в колебательных состояниях (0,0,1) и (0,1,0) и переходы b-типа в основном состоянии. Сравнение силовых постоянных полученных из различных комбинаций экспериментальных данных. Cazzoli G., Cervellati R., Mirri A. M. Rotational spectrum of ONCl in the (0,0,1) and (0,1,0) vibrational states and «b» type spectrum in the ground state. Comparison of force field obtained by different combinations of experimental data. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 3, 422—431 (англ.)

В диапазоне 8—40 Гц измерен микроволн. спектр молекулы ON³⁵Cl. Идентифицированы линии вращательных переходов в основном колебательном состоянии и в первых возбужденных состояниях колебаний ν_2 и ν_3 . Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных. Из значений частот колебаний изотопозамещенных ¹⁶O¹⁴N³⁵Cl, ¹⁶O¹⁵N³⁵Cl, ¹⁸O¹⁴N³⁵Cl и ¹⁸O¹⁵N³⁵Cl и дефектов инерции и квартичных центробежных постоянных ¹⁶O¹⁴N³⁵Cl вычислены силовые постоянные ONCl. Расчет выполнен с использованием различных комбинаций эксперим. данных. При использовании всех данных получены два набора силовых постоянных, в которых силовые постоянные взаимодействия $f(\text{NO—NCl})$ и $f(\text{NO—}\alpha)$ отличаются друг от друга знаком.

М. Р. Алиев

1975

04.001-10040

XIII 2929

1975

NOCN, NOCl (м. н. спектроскоп. гр-ция)

Dornó E., Buelow L.

J. Chem. Phys., 1975, 62(5) 1869-72

ЕОТБ ОПРОСН

10 (4)

51118.6617

Ch, Ph, TC

CLNO 96601

протоз. снхр *

1975

4-10554

(сч. FNO; III)
Frost D.C., Lee S.T., McDowell C.A.,
Westwood N.P.C. Photoelectron spectro-
scopic studies of some nitrosyl and
nitryl halides and nitric acid. "J. Ele-
ctron Spectrosc. and Relat. Phenom.",
1975, 7, N 4, 331-347 (англ.)

XIII-3213

464 470

5

0503

БЭИ

ВИНИТИ

50711.6611

Ch, TC

50701
с. № 910211111975
4155

Quack M., Troe J. Unimolecular processes IV: product state distributions after dissociation. "Ber. Bunsenges. phys. Chem.", 1975, 79, 858-869, 875

(англ., рез. нем.)

0408 г.м.к.

370 372 0 0 0

ВИНИТИ

50703.7564

Ch, Ph, TC

41125

ONCL

1975

*4-9272

Spirko V., Speirs G.K. The application
of the Monte Carlo method to anharmonic
force constant calculations. The anhar-
monic potential functions of ONF, ONCl,
ONBr. "J. Mol. Spectrosc.", 1975, 55,
N 1-3, 151-162

0401

сущ. ONF III
ПОНОВЛ. У III

377 378

0393

ВИНИТИ

41125-1111

51212.8322
TC, Ph, Ch

96201

1975

ONCL

* 4-10578

Stögård Ase.

Molecular orbital interpretation of X-ray
emission spectra of ClCN and ONCl.

"Chem. Phys. Lett.", 1975, 36, N 3, 357-360
(англ.)

0508

487 489

501

ВИНИТИ

СВМО

* У-13909

1976

11 Д362. Фотоэлектронный спектр нитрозилхлорида. Abbas Muniem I., Dyke John M., Morris Alan. Photoelectron spectrum of nitrosyl chloride. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 4, 814—819 (англ.)

Изучены HeI и HeII фотоэлектронные спектры нитрозилхлорида ClNO (I). Вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) равны (в эв): 11,53; 16,16; 17,14; 19,00; 22,04. Спектр I интерпретирован при помощи полуэмпирич. и неэмпирич. расчетов энергий МО. Первая полоса с колебательной структурой $\nu_2=540 \text{ см}^{-1}$ связана с удалением электронов из трех МО $13a'$, $12a'$, $3a''$, локализованных в основном на $3p$ АО Cl. Остальные ПИ I связаны с удалением электронов из МО типа $11a'$, $2a''$, $10a'$, $9a'$. Библ. 20. Ю. В. Чижов

примеч.
список
ф. 411

Ф. 1976 NH

④ 4. с.



сено

* У-13909

1976

21 Б104. Фотоэлектронный спектр хлористого нитрозила. Abbas Muniem I., Dyke John M., Morris Alan. Photoelectron spectrum of nitrosyl chloride. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 4, 814—819 (англ.)

фот. эл.
спектр.

Измерены He-I и He-II фотоэлектронные спектры (ФЭС) ClNO . В He-I ФЭС присутствует четыре широкие полосы с разрешенной колебательной структурой. Полосы идентифицированы на основе анализа колебательной структуры, а также данных расчетов неэмпирич. и полуэмпирич. методами ССП МО ЛКАО (базис ОСТ-6ГФ и приближение ППДП). Из ФЭС определены вертикальные и адиабатич. потенциалы ионизации (ПИ) различных орбиталей (пять первых ПИ), которые сопоставлены с ПИ, полученными с помощью теоремы Купманса из данных расчетов. Е. Николаев

X 1976 n21

NOCl

#4-13909

1976

84: 171883d Photoelectron spectrum of nitrosyl chloride
Abbas, Muncem I.; Dyke, John M.; Morris, Alan (Dep. Chem.,
Univ. Southampton, Southampton, Engl.). *J. Chem. Soc.,
Faraday Trans. 2* 1976, 72(4), 814-19 (Eng). He I and He II
photoelectron spectra of NOCl were recorded and assigned using
CNDO/2 calcs. of orbital energies which were related to
ionization potentials by Koopmans' theorem. The 1st band
consists of 3 components which are not resolved exptl. Ionizations
from the 7 highest filled valence MO's were obsd.

(open to
cnc 107p, 7)

C.A. 1976 84 N24

NOCL

1976

Bohlig Keiuz.

(corr. wct.)

Z. Chem. 1976, 16,
N11, 430-5.



(cu. H₂O, III)

60417.9080

Ph, Ch, TC, MGU

Деловая переписка
196200

1976

NOCl (7) # 3-12614

Gilberg E., Schätzl W., Schrenk H.W.

On the electronic structure of CNCl
and NOCl. "Chem. Phys.", 1976, 13, N 2
115-120 (англ.)

(см. CCN; 14)

0555 1976

XIII - 34703

579 580

ВИНИТИ

NOCl

1976

NO₂Cl

86: 48803s Gas phase ultraviolet photoabsorption cross sections for nitrosyl chloride and nitryl chloride. Illies, A. J.; Takacs, G. A. (Dep. Chem., Rochester Inst. Technol., Rochester, N. Y.). *J. Photochem.* 1976, 6(1), 35-42 (Eng). The photoabsorption cross-sections for gaseous NOCl and NO₂Cl were detd. from 190 to 400 nm at room temp. The results for NOCl differ from the work of C. F. Goodeve and S. Katz (1939), esp. at the shorter wavelengths, indicating that NOCl is less of a Cl atom sink in the stratosphere than previously thought. The NO₂Cl varies from 2.1×10^{-21} at 400 nm to 2.7×10^{-17} cm² mol⁻¹ at 190 nm. No absorption for NO₂Cl (cross-sections less than 2×10^{-21}) was obsd. from 400 to 750 nm.

correct
now.

C. A. 1977. 86 n 8



1976

СЕМО
СЕМО₂

спектры
поглощ.

Х. 1977
N 9

9 Б134. Сечения фотопоглощения газообразных хлористого нитролиза и хлористого нитрила в УФ-области. *Ellies A. J., Takacs G. A. Gas phase ultra-violet photoabsorption cross-sections for nitrosyl chloride and nitryl chloride. «J. Photochem.», 1976, 6, № 1, 35—42 (англ.)*

Измерены спектры поглощения газообразных ClNO ($p=0,72-52$ мм) и ClNO_2 ($p=0,77-95$ мм) в области 185—400 нм при 20°. Рассчитаны сечения фотопоглощения $\sigma = \ln(I_0/I)/([M]L)$ ($[M]$ — число молекул ClNO и ClNO_2 в см^3 , L — оптич. длина погл. слоя). В обоих случаях соблюдается закон Бера. В спектре ClNO наблюдаются две полосы с максимума при 195 и 340 нм. Для ClNO_2 предполагается наличие, по крайней мере, трех возбужденных состояний в этой области. В интервале 400—750 нм хлористый нитрил не поглощает. Рассматриваются энергетически возможные стадии диссоциации типа $\text{ClNO}_2 + h\nu \rightarrow \text{Cl}(^2P_{3/2}, ^2P_{1/2}) + \text{NO}_2(^2A_1, ^2B_1)$, $\text{ClNO}_2 + h\nu \rightarrow \text{O}(^3P, ^1D) + \text{ClNO}$, $\text{ClNO}_2 + h\nu \rightarrow \text{O}(^3P, ^1D) + \text{Cl}(^2P_{3/2}, ^2P_{1/2}) + \text{NO}(^2\Pi)$.
В. М. Ковба.

1976

СЕМО

✓ 4 Д362. Сечения УФ-поглощения нитрозил хлорида и нитрил хлорида в газовой фазе. Illies A. J. Takacs G. A. Gas phase ultra-violet photoabsorption cross-sections for nitrosyl chloride and nitril chloride «J. Photochem.», 1976, 6, №1, 35—42 (англ.)

СЕМО₂

В спектральной области 190—400 нм измерено сечение фотопоглощения нитрозил хлорида ClNO в газовой фазе. Результаты существенно отличаются от полученных ранее. В коротковолн. области спектра измеренные значения сечения поглощения почти на порядок превосходят значения Гудива и Катца. Спектр поглощения нитрил хлорида ClNO_2 исследован в области 190—750 нм. От 400 до 750 нм не обнаружено никакого поглощения (сечение меньше $2 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$). В более коротковолн. области наблюдалось непрерывное поглощение, соответствующее переходам по крайней мере в трех различных электронных состояниях молекулы. Поглощение ClNO_2 подчиняется закону Бэра. Сечение поглощения меняется от $2,1 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$ при 400 нм до $2,7 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ при 190 нм. Библ. 22.

спектр
поглощ.

(+)

Ф. 1977
N4

60721. 7897

Ch, TC

37026

ANCL (суд.
порт)

1976

4496

Jones Llewellyn H., Swanson Basil I.

Interpretation of potential constants: application to study of bonding forces in metal cyanide complexes and metal carbonyls.

"Accounts Chem. Res.", 1976, 9, N 4, 128-134 (англ.)

0670 гин

649 650 6 6 2

1

ВНИИТИ

ONCE

1976

Müller A., et al

(cont. noel)

J. Mol. Spect., 1976, 30,
N 2, 297-310.

(all ONF)

111

ОНС

Отпуск 16032

1976

Соломошкин В. Г., Бобкова
В. А.

см.

исей. Журн. преем. дел, 1976, 24, вып. 5, 898-903.

60811.72 18
Ch, Ph, TC

Кв. мех. раск. 1976
ONCE 96201

1976
4394

Stogard Ase.

(см. СССН; III)

Ab initio calculations on ClCN and
OCN1.

"Chem. Phys. Lett.", 1976, 40, N 3, 429-432
(англ.)

0681 пик

649 650 673

ВИНИТИ

70601. 8864

Ex-C, Ch, Ph, TC

NOCl 29848

1977

Резерв. кл. (П.У.)

*15-18357

Bergmann Helge, Elbel Susanne,
Demuth Reinhard.

Photoelectron spectra of the nitrosome-
thane, trifluoronitrosomethane, nitrosyl
fluoride, and nitrosyl chloride.

"J. Chem. Soc. Dalton Trans.", 1977, N 5,

401-406

(англ.)

0889 пнк.

Резерв. кл. (П.У.)

841 845 380.

ВИНИТИ

Мосс

оттиски 5521

1974

3 Б1201. Перенос колебательной энергии в NOCl.
Hartford Allen, Jr. Vibrational energy transfer in
NOCl. «Chem. Phys. Lett.», 1977, 50, № 1, 85—88
(англ.)

перенос энергии

(Di)

Пары NOCl при давл. 0,595 мм и т-ре $295 \pm 2^\circ \text{K}$ возбуждали импульсами света 10,6 мкм лазера на CO_2 (длительность 200 нсек, частота следования 5 гц, поглощаемая энергия ~ 7 мкдж/см²), соотв-щего комбинац. полосе $\nu_2 + \nu_3$ NOCl при 928 см^{-1} с возбуждением уровня (011). После возбуждения наблюдали флуоресценцию с уровня (100) при 1800 см^{-1} . Константа скорости нарастания флуоресценции в результате колебательно-колебательного переноса энергии в NOCl найдена равной $1,39 \pm 0,35 \text{ мксек}^{-1} \cdot \text{мм}^{-1}$, что соответствует 4 газокинетич. столкновениям. Константы скорости спада флуоресценции в результате колебательно-поступательного (и вращательного) переноса энергии с NOCl (100) на NOCl или Ag равны соотв. $0,181 \pm 0,02$ и $0,013 \pm 0,003 \text{ мксек}^{-1} \cdot \text{мм}^{-1}$, что соответствует 32 и 490

2, 1978, N3

газокинетич. столкновениям. Быстрота переноса энергии с уровня (011) на (100) должна ухудшать рабочие характеристики лазера на NOCl при 16,7 мкм на переходе между уровнями $\nu_2 + \nu_3$ и ν_3 . По-видимому, процесс переноса близок к резонансному. В нем могут участвовать след. р-ции: $\text{NOCl}(011) + \text{NOCl}(011) \rightleftharpoons \text{NOCl}(100) + \text{NOCl}(000) + 47 \text{ см}^{-1}$; $\text{NOCl}(011) + \text{NOCl}(011) \rightleftharpoons \text{NOCl}(022) + \text{NOCl}(000) + 4 \text{ см}^{-1}$ и $\text{NOCl}(022) + \text{NOCl}(000) \rightleftharpoons \text{NOCl}(000) + \text{NOCl}(100) + 43 \text{ см}^{-1}$. Менее вероятен процесс с участием уровня ν_2 типа $\text{NOCl}(030) + \text{NOCl}(000) \rightleftharpoons \text{NOCl}(000) + \text{NOCl}(100) - 17 \text{ см}^{-1}$.

В. Е. Скурат

сте.
инги

CE NO (см. отчет 3363а
в журнале) 1977

Parr C.A., et al.

(динамика
выгоримой
обложки жерн.) J. Chem. Phys., 1977,
66, N 7, 2914-31.

(см. H₂O; тв)

ONCE

[XIII - 4301]

1977

Ramaswamy K., Karunanithi S.,

M.N.

Pramana J. Phys. 1977, 9, N6,
579-585.

On the calculations of force
constants using ●

Моск

оттиски 5390

1974

23 Б1361. Исследование кинетики и энергетики диссоциации нитрозилхлорида в переменном электриче-

ском поле. Savall André, Bes René. Etude cinétique et énergétique de la dissociation du chlorure de nitrosyle dans un champ électrique alternatif. «J. chim. phys. et phys.-chim. biol.», 1977, 74, № 3, 277—281 (франц., рез. англ.)

(До) Исследовано разл. NOCl в электрич. разряде в устройстве типа озонатора в области изменения приведенного электрич. поля $E/N = (1-5) \cdot 10^{-15}$ в·см²·молекула⁻¹. Эффективная энергия диссоциации достигает миним. значения $\epsilon = 1,6 \pm 0,5$ эв·молекула⁻¹ при $E/N = 2,8 \cdot 10^{-15}$ в·см²·молекула⁻¹.
Ю. А. Иванов

5665-3995
XIII - 3995

Х. 1974. № 23

ONCE

ommuu 5792

1977

matunga
Ji-

Shimanechi T.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 903-172.

ONCL

number 6646

1978

Gazquez J. L., et al.

cul.
noes.

Theor. chim. acta

1978, 49, 1-11

ONCE

1948

Feuerhahn M. et al.

V_i

U.K. Chem. Soc.

Spectrochim. Acta., Part. A.,
1948, 34 A (II), 1065-6.

●
(see. ONY; III)

Виталии 6555

ONCl

ONBr

сил. пост.

(+1) 12

2. 1979, N1

1 Б315. Анггармоническое силовое поле ONCl и ONBr, полученное при сочетании инфракрасных и микроволновых данных. Mirri A. M., Cervellati R., Cazzoli G. Anharmonic force field of ONCl and ONBr by combination of infrared and microwave data. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 71, № 1—3, 386—398 (англ.)

Из анализа МВ-спектров ON³⁵Cl и ON⁸¹Br в возбужденных колебательных состояниях определены колебательно-вращательные постоянные, соотв-щие колебательным формам ν_2 и ν_3 обеих молекул. Чтобы извлечь информацию, касающуюся ангармоничности силового поля, из этих эксперим. данных и констант ангармоничности, полученных др. авторами, была использована полуэмпирич. потенциальная функция, предложенная Пливой. Методом наименьших квадратов с использованием параметров Пливы a_{nx} , b_{nx} , c_{nx} , b_{no} , c_{no} , b_{ϕ} и c_{ϕ} для различных величин a_{no} достигнуто хорошее согласие между эксперим. и вычисленными молек. константами для обоих соединений. Получены кубич. и квартич. силовые постоянные во внутренних координатах. Проведено сравнение кубич. констант с соотв-щими величинами, полученными при использовании обобщенного валентно-силового поля с рядом ограничений.

Резюме

1978

12.69
XIII - 12.69

ОНСс

ОНВг

Ссылка

Д. И. М.

(+1)

А

ф. 1978, N 12

Виттис 6555

1978

XIII - 4262

12 Д522. Ангармоническое силовое поле ONCl и ONBr по данным инфракрасной и микроволновой спектроскопии. Mirri A. M., Cervellati R., Cazzoli G. Anharmonic force field of ONCl and ONBr by combination of infrared and microwave data. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 71, № 1-3, 386—398 (англ.)

В диапазоне 8—40 Гц измерены микроволн. спектры поглощения молекул ONCl (I) и ONBr (II) в основном и нескольких возбужденных колебательных состояниях при т-ре образцов — 60° С. Определены молекуляр-

ные колебательно-вращательные постоянные, соответствующие ν_2 и ν_3 колебательным модам. Для определения ангармонизма силового поля молекул I и II использовались константа ангармонизма χ_{ij} и полуэмпирич. ф-ция, предложенная Плива (Pliva J., «Coll. Czech. Chem. Commun.», 1958, 23, 777). Получены силовые константы 3-го и 4-го порядка. Библ. 18.

В. В. Строганов

ONCE

1978

Ramaswamy R. et al

Curr. Sci. (India), 1978, 47 no. 2,
849-850.

paucum
numerus.
freepus

(cur. ONF; III)

NOCl

[ammun 8912]

1979

Arnold. J. H., et al.

J. Mol. Spectrosc. 1979,
78(2), 267-76.

см. посм.
в. max.
рассм.

см. SO₂ - III

NOCl

summary 7505

1979

и. в. сукер,
список
на правах

(90) 143714e Microwave spectrum and structure of nitrosyl chloride. Endo, Kunihiko; Shimada, Sadao; Morita, Shigeki; Kamura, Yuichi (Coll. Sci. Eng., Aoyama Gakuin Univ., Tokyo, Japan). *Nippon Kagaku Kaishi* 1979, (1), 1-4 (Japan). The microwave spectra of ^{15}N isotopic species of $^{15}\text{NO}^{35}\text{Cl}$ and $^{15}\text{NO}^{37}\text{Cl}$ were assigned between 8 and 26 GHz, and the following rotational consts. were obtained: $A = 81600$ MHz, $B = 5693.80$ MHz, and $C = 5322.44$ MHz for $^{15}\text{NO}^{35}\text{Cl}$; $A = 71520$ MHz, $B = 5556.07$ MHz, and $C = 5201.56$ MHz for $^{15}\text{NO}^{37}\text{Cl}$. An anal. of both the rotational consts. obtained in this study and the consts. by D.J. Millen et al. (1961) gave the bond lengths and angle as the complete r_s structural parameters of NOCl. They are $r(\text{N} - \text{O}) = 1.143 \pm 0.006$ Å, $r(\text{N} - \text{Cl}) = 1.973 \pm 0.003$ Å, and $\angle \text{ONCl} = 113.2^\circ \pm 0.5^\circ$. The nuclear quadrupole coupling consts. in the N-Cl bond axis system of $^{15}\text{NO}^{35}\text{Cl}$ are $\chi_{zz} = -57.8$ MHz and $\eta = -0.311$.

©, A 1979, N18, 90

Моск

М. В. Скляр
госгосстр

ж. 1979, N 14

14 Б236. Микроволновый спектр и структура нитро-
зилхлорида. Endo Kunihiro, Shimada Sadao,
Morita Shigeki. Kamura Yuichi. «Нихон ка-
гаку кайси, Nippon kagaku kaishi, J. Chem. Soc. Jap.,
Chem. and Ind. Chem.», 1979, № 1, 1—4 (япон., рез.
англ.)

исследованы в области частот от 8 до 26 ГГц МВ-спект-
ры нитрозилхлоридов $^{15}\text{NO}^{35}\text{Cl}$ (I) и $^{15}\text{NO}^{37}\text{Cl}$ (II) в
основном колебательном состоянии. В приближении
двух волчка определены вращательные постоянные
моментов (в Мгц): $A=81\,600$ и $81\,520$, $B=5693,80(7)$
и $5690,07(5)$, $C=5322,44(7)$ и $5201,56(5)$ и постоянные
ядерного квадрупольного взаимодействия $\chi_{aa}=-49,3(7)$
и $-38,6(6)$ и $23,4(8)$, $\chi_{cc}=19,9(6)$ и $15,3(1,4)$. На основании полученных данных и известных МВ-
измерений для других изотопич. нитрозилхлорида вы-
числены координаты атомов и определена полная
 r_s -структура молекулы: $r(\text{N}-\text{O})=1,143(6)$ А, $r(\text{N}-\text{Cl})=$
 $=1,973(3)$ А, $\angle\text{ONCl}=113,2(5)^\circ$. Полученные величины
структурных параметров согласуются со структурными
данными для родственных молекул HNO , FNO и BrNO .
Постоянная ядерного квадрупольного взаимодействия
в системе оси вдоль $\text{N}-\text{Cl}$ связи равна $\chi_{zz}=-57,8$
(1,6) Мгц и параметр равен $\eta=-0,311(86)$.

С. Н. Мурзин

1979

7505

с. 45

NOCL(2)

номер 7945

1979.

Kalbandkeri R.B.
etal.

U. K. Cicerip.

Z. anorg. allg. Chem.

1979, 450, 103-106.

ONCL

Sharma D.K.

1979

Perma U.P., India.

расчет
часовых
потери.

Z. phys. Chem. (DDR), 1979,
260, №2, 209-13.

сч. ONF-III

ОНСЕ

Виттисек 10064

1980

12 Д419. Определение колебательных частот с использованием ангармонической полуэмпирической функции потенциальной энергии: нитрозилхлорид. Vibrational frequencies from anharmonic ab initio/empirical potential energy functions: nitrosyl chloride. Botschwina Peter, Haertner Heinz, Sawodny Wolfgang. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 74, № 1, 156—159 (англ.)

М.П.

Построена полуэмпирическая ф-ция потенц. энергии (см. Botschwina P. «Chem. Phys.», 1979, 40, 33) молекулы ONCl, с использованием которой рассчитаны положения центров колебательных полос для пяти изотопич. молекул ONCl.

Ф. 1980 N 12

ONCE

Отмечен 10067

1980

23 Б72. Колебательные частоты из ангармонических функций для потенциальной энергии, полученные неэмпирическим и эмпирическим методами: нитрозилхлорид. Botschwina Peter, Haertner Heinz, Sawodny Wolfgang. Vibrational frequencies from anharmonic ab initio/empirical potential energy functions: nitrosyl chloride. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 74, № 1, 156—159 (англ.)

Построена ангармонич. функция потенциальной энергии нитрозилхлорида вблизи положения равновесия. Расчет потенциальной функции сделан 2 методами: чисто эмпирическим на основе эксперим. геометрии и колебательных частот для $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ и неэмпирич. методом на основе эксперим. данных и данных неэмпирич. расчетов методом ССП МО ЛКАО в большом гауссовом базисе. С этой потенциальной функцией рассчитаны колебательные частоты для $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$, $^{18}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ и $^{18}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$. Получено очень хорошее согласие с экспериментом, ошибка расчета составляет около 10 см^{-1} . Предсказаны колебательные частоты для $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{37}\text{Cl}$.

К. Я. Бурштейн

В.
расчет
потенциальной
функции

Х. 1980 ~ 23

ONCl

ommu 10067

✓ 93: 158394m Vibrational frequencies from anharmonic ab initio/empirical potential energy functions: nitrosyl chloride. Botschwina, Peter; Haertner, Heinz; Sawodny, Wolfgang (Fachber. Chem., Univ. Kaiserslautern, D-6750 Kaiserslautern, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 74(1), 156-9 (Eng). An ab initio/empirical potential energy function was constructed for ONCl from ab initio SCF/gradient calcs. and little exptl. information (equil. geometry and fundamentals for $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$). A larger no. of vibrational band centers for 5 different isotopes was calcd. from Watson's form (Watson, J. K. G., 1968) of the vibrational Hamiltonian by the variational method of R. J. Whitehead and J. C. Handy (1976).

И.
К.Б. Мех.
Харект.
Структура

C.A. 1980, 93, N16

Страница 10672

1980

ОНСЕ

7 Б215. Новые экспериментальные данные о постоянных колебательно-вращательного взаимодействия ONCl из измерений методом микроволновой спектроскопии. Дополнительная информация о кубическом силовом поле. Mirri A. M., Cervellati R., Cazzoli G. New experimental data on the vibro-rotation interaction constants of ONCl by microwave spectroscopic measurements. Additional information of the cubic force field. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 1, 202—212 (англ.)

Измерены в области частот 8—40 ГГц МВ-спектры, $O^{14}N^{35}Cl$ (I), $O^{14}N^{37}Cl$ (II), $O^{15}N^{35}Cl$ (III) и $O^{15}N^{37}Cl$ (IV) в (000) основном колебательном состоянии и I в (100), II и III в (001) и (010) и IV в (001) возбужденных колебательных состояниях. Вращательные переходы в возбужденных колебательных состояниях идентифицированы по их относит. интенсивности и квадрату-

м.п.;
мол. геом.

Х. 1981 N 7

полной сверхтонкой структуре. С учетом сверхтонкой
 структуры вращательные постоянные III и IV в основ-
 ном состоянии, соотв., равны (в Мгц) $B=5693,56$ (2) и
 $5556,42$ (2), $C=5322,64$ (2) и $5201,18$ (2). Для всех об-
 разцов определены постоянные колебательно-вращатель-
 ного взаимодействия и вычислены константы кубич. си-
 лового поля. Результаты расчетов показывают, что ис-
 пользование полуэмпирич. функции Пливы для опреде-
 ления кубич. силовых постоянных является вполне
 удовлетворительным. Возможная равновесная структу-
 ра ONCl с учетом поправок на эффекты колебательно-
 вращательного взаимодействия равна $r(\text{NCl}) =$
 $= 1,976$ (4) А, $r(\text{NO}) = 1,131$ (4) А, $\angle \text{ONCl} =$
 $= 113^\circ 15'$ (11).

С. Н. Мурзин

скул

ONCl

NCl

NO

М. П.; номер

(+2) 14

Ф. 1981 N 4

4 Д415. Новые экспериментальные данные для постоянных колебательно-вращательного взаимодействия молекулы ONCl, полученные по микроволновым измерениям: дополнительная информация для кубического силового поля. New experimental data on the vibration-rotation interaction constants of ONCl by microwave spectroscopic measurements. Additional information on the cubic force field. Mirri A. M., Cervellati R., Cazzoli G. «J. Mol. Spectrosc.», 1980, 83, № 1, 202—212 (англ.)

В диапазоне 8—100 Гц исследованы микроволновые спектры четырех изотопозамещенных молекулы ONCl. Из частот линий вращательных переходов с малыми J основного и первых возбужденных колебательных состояний ONCl с $^{14,15}\text{N}$ и $^{35,37}\text{Cl}$ вычислены значения α -постоянных колебательно-вращательного взаимодействия, а из полученных значений α -постоянных вычислены значения кубич. коэф. ангармоничности во внутренних колебательных координатах. Показано, что ограниченная потенц. ф-ция Пливы удовлетворительно воспроизводит измеренные значения α -постоянных. Для равновесных значений структурных параметров ONCl получено: $\text{NCl}=1,976$, $\text{NO}=1,131 \text{ \AA}$, $\text{ONCl}=113^\circ 15'$.
М. Р. Алиев

148
10642
077451

once

оцінюєк 11705

1980

Thyagarajan G., Subbedar
M. K.

суд. ноеі, Indian J. Pure and
ΔH аіомиз. Appl. Phys., 1980, 18,
392-395.

ONCl

1981

95:30753b Higher-order centrifugal distortion effects in nitrosyl chloride. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Damiani, D.; Mirri, A. M. (Ist. Chim. "G. Ciamician", Univ. Bologna, 40126 Bologna, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1981, 80(2), 365-6 (Eng). One hundred and nine new rotational transitions of ONCl in the ground vibrational state were measured. A centrifugal distortion anal. of these transitions yields the values of six sextic and one octic centrifugal distortion consts. The exptl. and calcd. sextic distortion consts. are in fair agreement.

M.N.
Sprague.
CNEKmp.

C.A. 1981. 95 N4

ONCl

1981

10 Д371. Центробежные эффекты высокого порядка в ONCl. Higher-order centrifugal distortion effects in ONCl. Cazzoli G., Degli Esposti C., Damiani D., Mirri A. M. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, № 2, 365—366 (англ.)

Получены микроволн. спектры поглощения со штарковской модуляцией газообразного ONCl в области 19—245 ГГц. Отнесение 109 наблюдаемых линий подтверждается сверхтонкой структурой, связанной с квадрупольными моментами ядер ^{35}Cl и ^{14}N . Анализ частот с привлечением прежних данных выполнен с использованием гамильтониана Уотсона, включающего константы центробежной деформации вплоть до октичных. Приведены рассчитанные вращательные постоянные A , B , C и константы центробежной деформации. Секстичные константы удовлетворительно согласуются с рассчитанными, что указывает на справедливость использованных в расчетах ангармонич. констант. Библ. 10.

М Д Т

М. П.

Ф. 10. 1981

1981

ONCl

NOCl

М. М.

X. 20. 1981

20 Б221. Эффекты центробежного искажения высоких порядков в ONCl. Gazzoli G., Degli Esposti C., Damiani D., Mirri A. M. Higher-order centrifugal distortion effects in ONCl. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 80, № 2, 365—366 (англ.)

Измерены сто девять новых вращательных переходов молекулы ONCl в основном колебательном состоянии в сантиметровой и миллиметровой областях спектра (от 19 до 245 Гц) с помощью обычного МВ-спектрометра со штарковской модуляцией. Квантовое число полного углового момента J измеренных линий изменяется от 11 до 69. Проведена обработка частот изме-

ренных линий с помощью приведенного вращательного гамильтониана Уотсона, включающего кватерные, секстичные и октичные члены центробежного искажения. Определены ~~вращательные постоянные~~, кватерные, секстичные и одна октичная постоянные NOCl. Получено хорошее согласие между эксперим. и вычисленными секстичными постоянными, что, как отмечается, указывает на правильность определенных ранее кубич. постоянных анигармоничности ONCl. В. М. Михайлов

ceNO

1981

4 Б1696. Сенсибилизированная красителем циклизация дифениламина. Garg Ravinder Kumar, Malhotra Kamini, Sidhu K. S. Dye-sensitized cyclization of diphenylamines. «J. Photochem.», 1981, 17, № 1—2, 27 (англ.)

Флуоресценция электроновозбужденного NO, образующегося при фотодиссоциации орг. нитритов [CH_3ONO , CD_3ONO , $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONO}$ и $(\text{CH}_3)_2\text{CHONO}$] и ClNO , исследована с использованием синхротронного излучения в кач-ве источника света в области 1200—1700 Å. Образование состояний $A^2\Sigma^+$, $C^2\pi$ и $D_2\Sigma^+ + \text{NO}$ доказано анализом спектров, разрешенных по энергии и по времени. Приведены спектры возбуждения флуоресценции индивидуальных электронных состояний, к-рые сравниваются со спектрами поглощения исходной молекулы. Результаты обсуждаются в рамках модели статистич. распределения энергии. Отмечается различное поведение трехатомной молекулы ClNO и многоатомных нитрилов! Резюме

спектр
флуоресц.

Х. 1982, 19, № 4.

ONCl

[omnick 11737]

1981

Kadibelban R, et al.

$v_2 + v_3$,

ϵ_i ,

Chem. Phys., 1981, 60,
215-221.

сравнение
 $C(ONF)$

$v-v$ and $v-R, T$ transfer
in triatomic molecules...

NOce

1981

2 Б1705. Измерение колебательного возбуждения NO, образующейся в фотодиссоциации NOCl и NOBr при 193 нм. Moser Mark D., Weitz Eric. A measurement of vibrational excitation in NO produced in the photodissociation of NOCl and NOBr at 193 nm. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 2, 285—291 (англ.)

М.П.

Методом оптич. спектроскопии испускания в области 5—7 мкм изучено колебательное возбуждение NO, образуемой при диссоциации NOX (X=Cl, Br) при давл. ~0,05—5 мм рт. ст. под действием света 193 нм импульсного лазера на ArF* (частота импульсов 9—10 Гц, энергия импульса 1—7 мДж). Установлено, что наблюдаемая флуоресценция обусловлена колебательно-возбужденной молекулой NO(X²Π) с v=1—16 и возможно 17. Отмечается, что процесс NOX+X→NO*+X₂ не дает нужного колебательного возбуждения, также исключается перенос энергии на NO с NO*, Cl(²P_{1/2}), Br(²P_{1/2}) ввиду малой вероятности. Образо-

Х. 1982, 19АБ,
№2.

вание NO происходит в процессе: $\text{NOX} + h\nu \rightarrow \text{NO}(X^2\Pi, v) + \text{X}$. Считается, что высококолебательное возбуждение NO обусловлено тем, что длина связи N—O в возбужденном состоянии молекулы NOCl равна 1,5 Å, в то время как в молекулах NO и NOCl в основном состоянии эта величина равна $\sim 1,14$ Å.

Ю. И. Дорофеев

NOCl

Оттиск 12459

1981

2 Д740. Определение уровня колебательного возбуждения NO, полученного в процессе фотодиссоциации NOCl и NOBr при 193 нм. A measurement of vibrational excitation in NO produced in the photodissociation of NOCl and NOBr at 193 nm. Moser Mark D., Weitz Eric. «Chem. Phys. Lett.», 1981, 82, № 2, 285—291 (англ.)

спектр
флуоресц.

Исследована флуоресценция в ИК-области 1400—1550 см^{-1} колебательно возбужденных молекул NO, образующихся в результате лазерного фотолиза NOCl или NOBr. В качестве источника возбуждающей радиации использован лазер на смеси AgF с длиной волны излучения 193 нм. Давление газа составляло от 5 до $330 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. Найдена линейная зависимость интегр. интенсивности флуоресценции NO от энергии в импульсе лазерного излучения. Обнаружено наличие быстрой и медленной компонент в затухании свечения NO $v \rightarrow v-1$ ($v=1 \div 15$) при давлении газа до $50 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. Установлено, что за появление быст-



Ф. 1982, 18, № 2.

рой компоненты ответственен процесс прямой фотодиссоциации по типу: $\text{NOCl} \rightarrow \text{NO} (X^2\Pi, v \leq 17) + \text{Cl}$, приводящий к образованию NO, возбужденного до высоких колебательных уровней, в то время как появление медленной компоненты связано со вторичными процессами переноса энергии в результате столкновений, приводящих к возбуждению более низких колебательных уровней NO $v \leq 5$. Обсуждены различные модели механизма фотодиссоциации NOCl и NOBr, сопровождающиеся возникновением колебательно-возбужденного продукта NO при облучении радиацией с длиной волны 193 нм. Библ. 34. А. М. М.

NOCl

Оттиск 12539 1981

2 Д739. Фотофрагментация NOCl под действием излучения эксимерного лазера. Энергетические распределения нейтральных фрагментов и фотоионов. Photo-fragmentation of NOCl with excimer lasers: energy distributions of neutral fragments and photoions. Werner L., Wunderer B., Walther H. «Chem. Phys.», 1981, 60, № 1, 109—117 (англ.)

Спектр

Получены времяпролетные спектры фотофрагментов, образующихся при одно- и двухфотонной диссоциации молекул NOCl под действием излучения $\lambda=248$ и 193 нм эксимерных лазеров. Первичными продуктами распада являются возбужденные молекулы NO и атомы Cl в основном состоянии. При однофотонной диссоциации образуются молекулы NO в основном состоянии с большим колебательным возбуждением. Результаты, полученные для разных λ , хорошо согласуются с модельными расчетами, выполненными в предположении, что наблюдаемые фрагменты в обоих случаях образуются в результате прямой фотодиссоциации одного и

ф. 1982, 18, № 2.

того же промежуточного состояния. При регистрации
времяпролетных спектров ионов NO^+ , образующихся
при фотоионизации первичных фрагментов излучением
того же лазера (увеличивает чувствительность аппара-
туры), зарегистрирована двухфотонная диссоциация
 NOCl . Основными первичными продуктами распада в
этом случае являются, по-видимому, молекулы NO
в ридберговских состояниях. Библ. 20. В. С. Иванов

Оттиск 12539 1981

NOCl

1 Б1623. Фотофрагментация NOCl при облучении эксимерными лазерами. Распределения энергии для нейтральных фрагментов и фотоионов. Werner L., Wunderer B., Walther H. Photofragmentation of NOCl with excimer lasers: energy distributions of neutral fragments and photoions. «Chem. Phys.», 1981, 60, № 1, 109—117 (англ.)

Спектр

При помощи времяпролетного масс-спектрометра зарегистрированы спектры поступательных энергий фотофрагментов NO и Cl, возникающих при одно- и двухфотонной диссоциации NOCl светом 193 нм (энергия фотонов $E=6,4$ эВ) и 248 нм ($E=5$ эВ) эксимерных лазеров на ArF^* и на KrF^* соотв. на установке со скрещенными пучками — молекулярным и лазерным. Свет 193 и 248 нм соответствует максимуму спектра поглощения NOCl в А-континууме и низкоэнергетич. порогу того же континуума. Анализ энергетич. состояний фотофрагментов методом лазерной флуоресценции невозможен, т. к. лазер, вызывающий диссоциацию NOCl, производит также оптич. накачку фрагментов NO, приводя к сильному перераспределению населенно-

X.1982, 1945, N1.

стей возбужденных состояний. Как при одно-, так и при двухфотонной диссоциации перв. фрагментами являются возбужденные молекулы NO и атомы Cl в дублетном основном электронном состоянии. В случае однофотонной диссоциации молекулы NO образуются в основном электронном состоянии $X^2\Pi$ с сильным колебат. возбуждением. Спектры возбуждения фотодиссоциации при $E=5$ и $6,4$ эВ интерпретированы на основе простой модели, согласно к-рой имеет место прямая диссоциация NOCl из одного и того же промежут. состояния. Двухфотонную диссоциацию удалось наблюдать лишь путем времяпролетного анализа ионов NO^+ , полученных при ионизации перв. фрагментов NO светом лазера, вызывающего диссоциацию. Такая ионизация сильно повышает чувствительность регистрации процесса. Сделан вывод, что при двухфотонной диссоциации NOCl образующиеся фрагменты NO скорее всего находятся в ридберговских состояниях (например, $C^2\Pi$, $B^2\Sigma$, а при $E=6,4$ эВ — более высокие состояния). В. Е. Скурат

CENO

[ommuck 16074] 1982

cert. no. 7.

Chopra J.R., Verma U.P.,
et al.,

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N6, ● 500-502.

СЕНО

От. 14957

1982

1 Д691. Распределение энергии при вакуумной УФ-фотодиссоциации молекул CINO в зависимости от энергии возбуждения. Energy partitioning in the VUV photodissociation of CINO as a function of excitation energy. Lahmani F., Lardeux C., Solgadi D. «J. Chem. Phys.», 1982, 77, № 1, 275—282 (англ.)

УФ фотодис-
социация

Выполнено детальное исследование флуоресценции молекул NO, образующихся при вакуумной УФ-фотодиссоциации молекул CINO (I) под действием синхротронного излучения в спектральной области 120—165 нм. Положение линий в спектре возбуждения флуоресценции состояний NO $A^2\Sigma^+ v'=0, 1, 2$, $C^2\Pi v'=0$, $D^2\Sigma^+ v'=0$ коррелирует со структурой полос спектра поглощения I. Для состояния NO ($A^2\Sigma^+$) определена зависимость величины внутренней энергии возбуждения (колебательной + вращательной) от энергии фотонизирующего излучения ($\lambda=147$ нм). Установлено, что распределение по вращательным уровням не является

сп. 1983, 18, N1

NO флуоресц.

больцмановским, а описывается ф-цией Гаусса. Ф-ция распределения внутренней энергии возбуждения скло-няется от расчетов, основанных на статистич. прибли-жении, и может быть описана в рамках квазидвух-атомной отталкивательной модели. В результате иссле-дования временной зависимости спада флуоресценции NO ($A^2\Sigma^+$) определена константа тушения этого со-стояния молекулами I. Библ. 24. В. А. Елохин



NOCl

1982

96: 225914h Quenching of nitric oxide ($D^2\Sigma^+$, $E^2\Sigma^+$) formed by UV photodissociation of nitrosyl chloride. Wilson, M. W.; Rothschild, M.; Muller, D. F.; Rhodes, C. K. (Dep. Phys., Univ. Illinois, Chicago, IL 60680 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(9), 4452-6 (Eng). The photodissocn. of NOCl at 193 nm has resulted in vibrationally excited NO which was subsequently excited to the $D(v=5)$ and $E(v=0)$ states. The resulting fluorescence at 160-180 nm was analyzed in terms of kinetic model. Satn. of the photodissocn. was obsd. at laser intensities $> 2 \text{ MW/cm}^2$. The quenching rate consts. of NO^* by Ne, Ar, Kr, and Xe were $k_{\text{Ne}} = (6.4 \pm 1.6) \times 10^{-11}$, $k_{\text{Ar}} = (1.7 \pm 0.4) \times 10^{-10}$, $k_{\text{Kr}} = (6.6 \pm 1.7) \times 10^{-10}$, and $k_{\text{Xe}} = (1.0 \pm 0.2) \times 10^{-9} \text{ cm}^3\text{-s}^{-1}$. The quenching by NO and Cl was explained in terms of charge transfer mechanism and the corresponding rate consts. were $k_{\text{NO}} = (2.7 \pm 0.6) \times 10^{-9}$ and $k_{\text{Cl}} = (2.1 \pm 0.5) \times 10^{-9} \text{ cm}^3\text{-s}^{-1}$.

photogenic-
consequence

C. A. 1982, 96, N25.

ONCl

Ом- 16204

1983

14 Б235. Равновесная структура и силовое поле нитрозил хлорида. Equilibrium structure and force field of nitrosyl chloride. Cazzoli G., Degli Esposti C., Palmieri P., Simeone S. «J. Mol Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 165—185 (англ.)

Измерены вращательные спектры молекул $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ (возб. колеб. состояние 100), $^{18}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ и $^{18}\text{O}^{14}\text{N}^{37}\text{Cl}$ (основное колеб. состояние 000). Дан перечень линий, их отнесение и найденные из анализа спектров вращательные постоянные молекул. Значения равновесных вращательных постоянных B_e и C_e (МГц): $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ — 5748,958, 5393,462; $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ — 5704,582, 5339,070. Выполнен неэмпирич. расчет молекулы (рассчитаны геометрич. параметры молекулы и параметры ф-ций потенциальной энергии). Равновесные структурные параметры молекулы ONCl полученные из спектров — $r_e(\text{N—Cl}) = 1,97453$, $r_e(\text{N—O}) = 1,13357$ (А), $\text{ONCl} = 113,320^\circ$ (приведены также параметры r_0 , r_s , r_m структур); а рассчитанные — соотв., 1,147 и 1,979 А, $113,88^\circ$. Для семи

Vi, М.П.,
геометрия,
структура

X. 1983, 19, N 14

изотопозамещенных молекул ONCl ($^{16,18}\text{O}$, $^{14,15}\text{N}$, $^{35,37}\text{Cl}$) в колебательных состояниях 000, 100, 010, 001 даны значения вращательных постоянных, постоянных центростремительного искажения, параметров колебательно-вращательного взаимодействия и гармонич. частот колебаний. Приведены, полученные на базе эксперим. данных и вычисленные неэмпирически, силовые постоянные молекулы (вплоть до кубических членов и нек-рых квартетных постоянных).

В. М. Ковба

ONCl

DM- 16204

1983

7 Д58. Равновесная структура и силовое поле нитрозилхлорида. Equilibrium structure and force field of nitrosyl chloride. Cazzoli G., Degli Esposti C., Palmieri P., Simeone S. «J. Mol. Spectrosc.», 1983, 97, № 1, 165—185 (англ.)

Методом штарк-модуляции получены вращательные спектры изотопомеров $^{18}\text{O}^{15}\text{N}^{37}\text{Cl}$, $^{18}\text{O}^{14}\text{N}^{37}\text{Cl}$ в основных колебательных состояниях и изотопомера $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ в возбужденном состоянии (100). Измеренные частоты переходов совместно с известными из литературы использованы для получения набора вращательных постоянных изотопомеров молекулы нитрозилхлорида, а также для последующего определения r_m и r_e структур. По известным эксперим. данным методом наименьших квадратов найдены также квадратичные и кубические силовые постоянные ONCl. При этом 4 постоянные (f_{12} , f_{112} , f_{331} и f_{123}) полагались равными либо нулю, либо постоянным, найденным в результате неэмпирич.

М.П., Сил. пост.

Р. 1983, 18, № 7

квантовомеханич. расчета силового поля $ONCl$, проведенного методом ССП в двухэкспонентном базисе гауссовых ф-ций. Для всех оставшихся силовых постоянных отмечено хорошее согласие между эмпирич. и квантовомеханич. значениями.

А. И. Дементьев.



ONCl

OM 16204

1983

' 98: 62431y Equilibrium structure and force field of nitrosyl chloride. Cazzoli, G.; Degli Esposti, C.; Palmieri, P.; Simeone, S. (Ist. Spettrosc. Mol., CNR, 40126 Bologna, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1983, 97(1), 165-85 (Eng). The α -type rotational spectra of $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ in the (100) excited vibrational state ($\nu_1 \approx 1770 \text{ cm}^{-1}$) and of $^{18}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$ and $^{18}\text{O}^{14}\text{N}^{37}\text{Cl}$ in the ground state were obsd. The equil. structure of NOCl was calcd. from the values of the equil. rotational const. B_e and C_e of the 2 isotopic species $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ and $^{16}\text{O}^{15}\text{N}^{35}\text{Cl}$. The ground-state rotational const. of 7 isotopic species of NOCl were used to calc. Watson's r_m structure, which was in satisfactory agreement with the r_e structure. The quadratic and cubic force fields of NOCl were simultaneously refined by optimizing the least-squares fit to a set of 48 exptl. data which includes the sextic centrifugal distortion const., with 1 quadratic and 3 cubic terms of the potential energy function constrained to the values computed by SCF/ab initio methods. All remaining quadratic and cubic SCF force const. were in reasonably close agreement with the empirically detd. const.

См. прим.
на прим.,
См. прим.

C. A. 1983, 98, N 8.

ClNO

am. 17439

1983

199: 166859f Ab initio CI study of the photodissociation of nitrosyl chloride (ClNO). Solgadi, D.; Lahmani, F.; Lardeux, C.; Flament, J. P. (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys.* 1983, 79(2), 225-33 (Eng). Potential-energy curves for the ground and excited singlet states of ClNO in the energy region up to 8.5 eV were calcd. by means of the CIPSI method (B. Huron, et al., 1973), which combines variation and perturbation techniques to take into account electron correlation effects. The calcd. dissocn. energy D_e for the ground state is 1.58 eV, which can be compared with the exptl. value of 1.55 eV. The 3 first A'' and two first A' symmetry states at low energy are all repulsive along the Cl-N coordinate and are responsible for the direct dissociative processes obtained in the 6000-3000 Å energy range. At ≈ 2000 Å a bound state was obsd. which clearly indicates that the photofragmentation in $\text{NO}(X) + \text{Cl } ^2P^0$ is not due to a direct dissocn. but should involve a predissociative mechanism through a crossing with a triplet state or a rapid internal conversion to the hot ground state. Between 1700 and 1200 Å the electronic states are numerous and involve a large contribution of Rydberg orbitals. These states dissocd. towards $\text{NO } A^2\Sigma^+$, C^2H , and $D^2\Sigma^+$ corroborating exptl. observations.

номер.

ф-ил в оск.

и в оск. соем.

C. A. 1983, 99, N 20

NOCL

1984

Baldecchi M.G., Carli B.,
et al.

Экспе-
римп

Int. J. Infrared Milli-
meter Waves 1984, 5(3),
381-401.

● (cu. CO; III)

CLNO

[Om. 20765]

1984

Burdett J.K., Lawrence N.J.,
et al.,

Inorg. Chem., 1984, 23,
N 16, 2419—2428.

Электро-
отрицат.,
структур.
4
св. 36 в
мол-лах.

NOCe

1985

№ 0 Б4385. Импульсная фотодиссоциация нитрозил-хлорида. Процессы переноса колебательной энергии. The flash photodissociation of nitrosyl chloride: vibrational energy-transfer processes. Bechara J., Morrow T., McGrath W. D. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 122, № 6, 605—611 (англ.)

При импульсном ФТ NOCl при давл. 0,25—20 Торр светом $\lambda > 340$ нм (время нарастания импульса 3 мкс, ширина на полувысоте 5 мкс, энергия 200 Дж) наблюдали появление сильного континуумного поглощения в области 230—280 нм, максимум к-рого достигается через ~ 50 мкс после фотолизующей вспышки. Интенсивность этого поглощения увеличивается с ростом давл. NOCl, а его спектр соответствует обычному спектру NOCl, смещенному в красную сторону на ~ 35 нм. Оно приписано колебательновозбужденным молекулам NOCl* ($v''=2-6$), к-рые образуются в р-ции $\text{Cl}_2^* + \text{NOCl} \rightarrow \text{NOCl}^* + \text{Cl}_2$ с константой скорости $k = (1,8 \pm \pm 0,5) \cdot 10^{-13}$ см³/(молекула·с), причем колебательновоз-

импульсная
фотодиссоц.

х. 1986, 19, № 10

возбужденные молекулы Cl_2^* в свою очередь возникают
 в р-ции с NOCl атомов Cl — перв. продуктов фотодис-
 социации NOCl . Константы скорости тушения NOCl^*
 в столкновениях с Ar и CO_2 равны $(1,1 \pm 0,3) \cdot 10^{-14}$ и
 $(2,1 \pm 0,5) \cdot 10^{-14} \text{ см}^3/(\text{молекула} \cdot \text{с})$ соотв., а для туше-
 ния Cl_2^* в соударениях с NOCl $k = (1,5 \pm 0,4) \cdot$
 $\cdot 10^{-13} \text{ см}^3/(\text{молекула} \cdot \text{с})$. В. Е. Скурат



ClNO

1985

104: 26557c New bands and relative intensities from the vibrational-rotational transitions of the nitric oxide laser from the photodissociation of nitrosyl chloride (ClNO). Del Barrio, J. I.; Rebato, J. R.; Tablas, F. M. G. (Fac. Cienc., Univ. Auton. Madrid, Madrid, Spain 28049). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 122(1-2), 59-65 (Eng). The NO laser emission was analyzed from the photodissocn. of ClNO. Two new bands and many more lines than previously reported were detected. The relative intensities were also measured before and after purging the cavity. These results were easily interpreted regarding the atm. H₂O bands. The effect of Cl and H as buffer gases was studied at 22.5 and 45 torr.

(Kon. Gratz.
crekmp)

c.A. 1986, 104, N4

ClNO_x
($x=1-3$)

Om. 21516

1985

10 Д127. Исследование молекул ClNO_x ($x=1-3$) неэмпирическим методом самосогласованного поля. Ab initio self-consistent-field studies of ClNO_x ($x=1-3$). Bhatia Subhash C., Hall John H., Jr. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 4, 1991—1996 (англ.)

Различные изомерные формы молекул ClNO_x , $x=1, 2, 3$, исследованы неэмпирическим спин-ограниченным методом ССП. Положение локальных минимумов потенц. поверхностей молекул рассчитаны в базисах 4-31 ГФ, после чего энергии изомеров были уточнены с использованием двухэкспонентных базисов, расширенных поляризац. ф-циями. Расчетная энергия ClNO оказалась значительно ниже, чем ClON , однако отмечено, что в последнем случае качественно правильное опи-

геометр.
структура,
 E, γ ;

ф. 1985, 18, n 10

сание электронной структуры требует перехода к неограниченному варианту метода ССП. Энергия изомеров с $x=2$ возрастает в ряду ClNO_2 — цис- ClONO — транс- ClONO . Для $x=3$ наиболее стабилен изомер ClONO_2 . Построена потенц. ф-ция внутреннего вращения относительно O—O -связи в ClOONO . Найдены потенциалы ионизации и дипольные моменты молекул.

А. В. Зайцевский

ClNO_x

$x = 1 \div 3$

[Om. 21516]

1985

102: 172836t Ab initio self-consistent-field studies of ClNO_x ($x = 1-3$). Bhatia, Subhash C.; Hall, John H., Jr. (Sch. Geophys. Sci., Georgia Inst. Technol., Atlanta, GA 30332 USA). *J. Chem. Phys.* 1985, 82(4), 1991-6 (Eng). Ab initio self-consistent-field studies of the electronic charge distributions of isomers of ClNO_x ($x = 1-3$) are reported. Three basis sets are employed. The first is a 4-31G basis. The second, only in the ClNO_x ($x = 1, 2$) calcs., employed a near Hartree-Fock basis with d orbitals on all centers and is designated PDZ*. The third basis set is a near Hartree-Fock basis, with d orbitals only on the Cl atom, and is designated PDZ. The geometry of each isomer was optimized at the 4-31G level. Ionization potentials were calcd. from Koopmann's theorem and from the Δ SCF between the neutral mol. and the pos. ion. Dipole moments are also reported. The resulting calcs. indicate that the ClNO_2 isomers are of comparable electronic stabilities. The calcs. for ClNO_3 indicate that ClONO_2 is 16.0 kcal/mol more stable, electronically that ClOONO . The planar structure for ClONO_2 is favored over the nonplanar structure by 80 kcal/mol.

ab initio
pacem

C.A. 1985, 102, N20

CLNO

1985.

Solgadi D., Flament

J. P.

ab initio Stud. Phys. Theor.
pariem. Chem. 1985, 35, 497 -
- 503.

(see FNO; III)

СМД

1986

22 Б1120. Гармонические и ангармонические силовые поля и колебательно-вращательные постоянные для CINO, FNO, FSN и CISN на основе неэмпирических расчетов методами ССП и КВ. The harmonic and anharmonic force fields and vibration-rotation constants of CINO, FNO, FSN, and CISN from SCF and CI ab initio computations. Bendazzoli G. L., Cazzoli G., Esposti C. Degli, Fano G., Ortolani F., Palmieri P. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 10, 5351—5364 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) рассчитаны квадратичные и кубичные силовые постоянные молекул CINO, FNO, CISN и FSN. На основе полученных силовых полей определены постоянные колебат.-вращат. взаимодействия для CINO величины, рассчитанные методом ССП, хорошо согласуются с эксперим. данными. Для описания силового поля FNO

(М.П.)

(+3)

Δ

Х. 1986, 19, № 22

потребовалось использовать методы расчёта, учитывающие электронную корреляцию. Корреляц. поправки существенны для гармонич. силовых постоянных и постоянных колебат.-вращат. взаимодействия FNO. Систематически исследована зависимость силовых постоянных FNO от орбитального базиса и метода учета корреляции. Предсказаны значения постоянных колебат.-вращат. взаимодействия для CISN и FSN.

А. А. Сафонов

CINO

1986

Р 10 Д76. Определение гармонического и ангармонического силовых полей и колебательно-вращательных постоянных молекул CINO, FNO, FSN и CISN из результатов неэмпирических расчетов методами ССП МО ЛКАО и конфигурационного взаимодействия. The harmonic and anharmonic force fields and vibration—rotation constants of CINO, FNO, FSN, and CISN from SCF and CI ab initio computations. Bendazzoli G. L., Cazzoli G., Degli Esposti C., Fano G., Creiam Z., Palmieri P. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 10, 5351—5364 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых орбиталей с учетом конфигурационного взаимодействия вычислены квадратич. и кубич. силовые коэф. для молекул CINO, FNO, FSN и CISN. Из полученных силовых коэф. вычислены значения частот колебаний, дефекта инерции, постоянных квартичного и секстичного центробежного искажения и α -постоян-

42
43

сп. 1986, 18, N 10

ных колебательно-вращательного взаимодействия, которые сопоставлены с эксперим. данными. Получено удовлетворительное согласие с экспериментом, в том числе для α -постоянных и постоянных секстичного центростремительного искажения, зависящих от кубич. коэф. ангармоничности. В частности, расхождение между вычисленными и измеренными значениями α -постоянных не превышает 20%.

М. Р. Алиев



CLNO

[Am. 24696]

1986

cul. nocm.,
se. n., meop.
paciem

Bendazzoli G.L.,
Cazzoli G., Esposito C.D.,
et al.,

J. Chem. Phys., 1986,
N10, 53 • 51-5364.

ONCl

1986

8 Б1342. Исследование полос ν_1 и $\nu_1 + \nu_3$ молекулы $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$. Study of the ν_1 and $\nu_1 + \nu_3$ bands of $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$. Cheikh Monia, Alamichel Claude. «Proc. 9th Int. Conf. High Resolut. Infrared Spectrosc., Liblice near Prague, Sept. 8—12, 1986. Progr. Sess. Abstr. Pap.» Prague, s. a., 52 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением $0,01 \text{ см}^{-1}$ исследован ИК-спектр поглощения молекулы ONCl. Идентифицировано 498 линий полосы ν_1 ($1760\text{—}1830 \text{ см}^{-1}$) и 435 линий полосы $\nu_1 + \nu_3$ ($2105\text{—}2155 \text{ см}^{-1}$).

Е. В. Алиева

М.П.

X. 1987, 19, N8

1986

ONCL Cheikh M., et al.,
Proceedings of the IXth In-
ternational Conference on
High Resolution Infrared
Spectroscopy, Liblice near
Prague September 8-12,
1986,



52.

52

ONCl

1986

7 Л195. "Исследование ИК-полосы ν_1 ONCl. Study of the ν_1 infrared band of ONCl. Cheikh M., Alami-chel C., Chevillard J. P., Hubbard R. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 125, № 3, 283—285 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии в области 1760—1830 см^{-1} исследован ИК-спектр поглощения колебательно-вращательной полосы ν_1 ONCl. При $t = 22^\circ \text{C}$ и давлении ONCl 1,48—4,84 мм рт. ст. с разрешением $\sim 0,005 \text{ см}^{-1}$ измерены положения 498 вращательных линий. Представлены результаты анализа вращательной структуры, выполненного в приближении гамильтониана Уотсона. С привлечением метода наименьших квадратов определено положение начала полосы и рассчитаны эффективные значения молекулярных постоянных $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ для основного (000) и возбужденного (100) колебат. состояний. Приведено сравнение постоянных (000) состояния с данными микроволн. спектроскопии. В. К.

М.А.

Ф. 1986, 18, № 7.

ONCl

ОЛМ. 23535

1986

16 B1280. Изучение инфракрасной полосы ν_1 молекулы ONCl. Study of the ν_1 infrared band of ONCl. Cheikh M., Alamichel C., Chevillard J. P., Hubbard R. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 125, № 3, 283—285 (англ.)

С разрешением $0,005 \text{ см}^{-1}$ (фурье-спектрометр) измерена вращат. структура полосы ν_1 молекулы ONCl в обл. $1760\text{—}1830 \text{ см}^{-1}$. При анализе спектра использовался приведенный гамильтониан Ватсона А-типа в J -представлении. Значения вращат. постоянных A , B , C и постоянных центробежного искажения Δ_J , Δ_{JK} , Δ_K , δ_J , δ_K (в см^{-1} , $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$): основное состояние, (000) — $2,9061$; $0,191382$; $0,179338$, $2,1022 \cdot 10^{-7}$, $-1,9 \cdot 10^{-6}$, $1,46578 \cdot 10^{-8}$, $1,9 \cdot 10^{-8}$, $1,3442 \cdot 10^{-8}$; состояние {100} — $2,884098$, $0,192271$; $0,180045$; $2,11 \cdot 10^{-7}$, $-1,72 \cdot 10^{-6}$, $1,419 \cdot 10^{-4}$, $1,7 \cdot 10^{-8}$, $1,3442 \cdot 10^{-6}$; $\nu_0 = 1799,7357$.
В. М. Ковба

(2i)

X. 1986, 19, N16

CINO

1986

20 B1225. Простой теоретический метод для предсказания энергии вращательных уровней и частот микроволновых переходов. A simple theoretical method for prediction of rotational energy levels and MW transitions. Konarski J. «Acta phys. pol.», 1986, A69, № 4, 685—698 (англ.)

Рассмотрено вычисление энергии вращат. уровней различных колебат. состояний молекул типа асимм. волчка, на основе полного колебательно-вращат. гамильтониана. Для описания внутр. движений введены координаты, инвариантные относительно преобразования от пространственных осей к молек. осям. В этих координатах построен вращат. гамильтониан, в к-ром параметры (компоненты обр. тензора инерции) предполагаются усредненными по колебат. состояниям. Этот гамильтониан применен к расчету энергии вращат. уровней и частот вращат. переходов молекул CINO и FNO: расхождения с экспериментом достигают нескольких десятков МГц.

Е. В. Алиева

расчет энергии
вращат. уровней
и частот вращат.
переходов

Ⓚ(4)

X. 1986, 19, № 20

CENO

1986

Д 11 Д68. Простой теоретический метод определения вращательных энергетических уровней и MW переходов. A simple theoretical method for prediction of rotational energy levels and MW transitions. Konarski J. «Acta phys. pol.», 1986, A69, № 4, 685—698 (англ.)

Проводится исследование колебательно-вращательной структуры полиатомных молекул. Анализ спектроскопич. свойств молекул основывается на использовании канонич. формы вращательно-колебательного гамильтониана, записанного в переменных, инвариантных относительно преобразования от системы координат, связанной с молекулой, к пространственно фиксированной системе координат. Расчет вращательно-колебательных уровней трехатомных нелинейных молекул проводится без использования условий Эккерта. В качестве примера рассматриваются молекулы CINO и FNO с различными изотопич. модификациями азота. Ю. Е. Горбачев

лл.р.

ср. 1986, 18, N 11

ONCl

1986

18 Б1271. Спектры комбинационного рассеяния и инфракрасные спектры газообразного и твердого нитрозилхлорида. Raman and infrared spectra of gaseous and solid nitrosyl chloride. McDonald J. K., Merritt J. A., Kalasinsky V. F., Heusel H. L., Durig J. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 69—88 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Измерены КР (Kr^+ -лазер, 647,1 нм, $\Delta\nu = 10\text{--}2200\text{ см}^{-1}$) и ИК- (30—2000 см^{-1}) спектры газ. и тв. нитрозилхлорида (ONCl). Получены значения (в см^{-1}) фундаментальных частот колебаний для ON^{35}Cl (газ) — $\nu_1 = 1799,7$, $\nu_2 = 595,7$, $\nu_3 = 331,8$. В спектрах конденс. фазы наблюдался существенный сдвиг частот колебаний (КР — соотв. 1909, 453, 275 см^{-1} ; ИК — $\nu_2 = 495$, $\nu_3 = 294\text{ см}^{-1}$). С разрешением $\sim 0,06\text{ см}^{-1}$ измерена и проанализирована вращат. структура полос ν_2 и ν_3 в ИК-спектре ONCl (газ). В диапазоне 25—120 см^{-1} на-

(М.П.)

X. 1986, 19, N 18

блюдалось 27 линий Q-ветвей чисто вращат. спектра ONCl в основном состоянии и состоянии $v_3=1$. Рассчитаны валентно-силовое и центрально-силовое поля ONCl; значения частот колебаний различных изотопов ONCl, распределение потенциальной энергии по координатам для обоих вариантов силового поля.

В. М. Ковба

ONCl

1986

11 Л197. Спектры ИК-поглощения и комбинационного рассеяния газообразного и твердого хлористого нитрозила. Raman and infrared spectra of gaseous and solid nitrosyl chloride. McDonald J. K., Merritt J. A., Kalasinsky V. F., Heusel H. L., Durig J. R. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 69—88 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Получены спектры КР газообразного и твердого ONCl в области $10\text{--}2200\text{ см}^{-1}$ и спектры ИК-поглощения в области $30\text{--}2000\text{ см}^{-1}$, причем ИК-спектр газа с разрешением $0,06\text{ см}^{-1}$. Приведены колебательные и межмолекулярные частоты ONCl для твердой фазы и частоты колебательно-вращательных линий полос ν_2 и ν_3 в ИК-поглощении. Наблюдаемые в длинноволн. области линии отнесены к вращательным переходам в основном и возбужденном ν_3 состоянии, этот спектр интерпретирован в приближении слегка асимметричного вытянутого волчка. Полученные колебательные частоты вместе с литературными данными для других изотопич. модификаций использованы для решения коле-

(М.П.)

ср, 1986, 18, 111

бательной задачи. Приведены валентные силовые по-
стоянные. Библ. 30. М. В. Т.

ерм

ONCl

OM 25669

1986

(CKP, UKP)

104: 176906 Raman and infrared spectra of gaseous and solid nitrosyl chloride. McDonald, J. K.; Merritt, J. A.; Kalasinsky, V. F.; Heusel, H. L.; Durig, J. R. (Res. Dev. Eng. Cent., Res. Dir., Reston Arsenal, AL 35898-5248 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(1), 69-88 (Eng). The Raman spectra of gaseous and solid ONCl were recorded at 10-2200 cm^{-1} . In the spectrum of the gas, the 3 fundamentals for the isotopic species ON^{35}Cl were obsd. at: $\nu_1 = 1799.7$, $\nu_2 = 595.7$, and $\nu_3 = 331.8 \text{ cm}^{-1}$. Large shifts from these frequencies were obsd. for the solid material. The IR spectra of the gaseous and solid ONCl were recorded at 30-2000 cm^{-1} . The spectrum of the gas was recorded at a resolu. of 0.06 cm^{-1} and the vibrational-rotational structure for both ν_2 and ν_3 was analyzed in the ground and excited vibrational states. Band origins were 595.860(3) and 331.973(4) cm^{-1} for ν_2 and ν_3 , resp., for ON^{35}Cl and the corresponding band centers for ON^{37}Cl were ~ 594.9 and $\sim 328.2 \text{ cm}^{-1}$. The pure rotational IR spectrum of ONCl was recorded (20-120 cm^{-1}) and interpreted in terms of a slightly asym. prolate top with centrifugal distortion. Series of 17 and 10 sharp Q branches were obsd. for the ON^{35}Cl ground state and $\nu_3 = 1$ excited state, resp. A new force field based on new and existing data is proposed and discussed.

c.A. 1986, 104, n20

1986

CNO

CNO
ClON

M.N.

72

ф. 1986, 18, № 9

Д141. Энергии ионизации XNO ($X=Cl, F$ и Br) и XON ($X=Cl$ и F), полученные методом ССП $X\alpha-Pb$. SCF- $X\alpha$ -SW ionization energies of XNO ($X=Cl, F$ and Br) and XON ($X=Cl$, and F). Takeuchi T. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1986, 40, № 1, 27—33 (англ.)

Методом ССП рассеянных волн (ССП $X\alpha-Pb$) и с помощью процедуры переходного состояния (Slater J. C., Johnson K. H. «Phys. Rev.», 1972, B5, 844) получены энергии ионизации с различных электронных уровней молекул XNO ($X=Cl, F$ и Br). Данные сравнены с расчетами других авторов и с эксперим. данными, полученными методом фотоэлектронной спектроскопии. Проведенные сравнения показывают, что полученные в работе расчетные данные хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными. Рассчитаны также энергии ионизации молекул XON ($X=Cl$ и F). Первые потенциалы ионизации $ClON$ и FON соответственно равны 10,1 и 12,0 эВ.

Г. К.

FNO, BrNO

сено
сено

1986

19 Б1020. Расчет энергий ионизации XNO ($X=Cl$, F и Br) и XON ($X=Cl$ и F) методом ССП- $X\alpha$ -РВ. SCF $X\alpha$ -SW ionization energies of XNO ($X=Cl$, F and Br) and XON ($X=Cl$, and F). Takeuchi T. «J. Electron Spectrosc. and Relat. Phenom.», 1986, 40, № 1, 27—33 (англ.)

Методом ССП- $X\alpha$ -рассеянных волн в приближении перекрывающихся атомных сфер рассчитано электронное строение молекул XNO ($X=Cl$, F и Br) и XON ($X=Cl$ и F). В приближении переходного состояния для каждой из исследованных молекул вычислены потенциалы ионизации (ПИ) валентных МО, сопоставленные с аналогичными данными др. теорет. расчетов и с экспериментом. Исследованы тенденции изменения ПИ вдоль рядов XNO и XON и между ними, а также связь изменений ПИ с характерными особенностями распределения заряда соотв. МО в молекулах. Установлена корреляция между изменениями ПИ и отношениями длин связей $(X-N)/(N-O)$ и $(X-N)/(O-N)$ в соотв. молекулах. Для молекул с большой величиной отношения длин связей ($ClNO$, FON и $BrNO$) обнаружено квазивырождение трех низших ПИ. И. А. Тополь

у;

42
наб

X.1986, 19, N19

FNO, FON, BrNO, BrON.



CLNO

1986

Takeuchi T.

J. Electron Spectrosc.
Relat. Phenom. 1986,
40(1), 27-33.

(see FNO; III)

DNCL

[от. 28370]

1987

Албтман А.Б., Вениошимова Т.И. и др.

струк-
тура
колебл.
частоты.

Таблицы рекомендуемых
справочных данных.

Рекомендован. во ВНИИКИ

Госстандарта СССР 17.02.87г.

№ 295.

ONCl

От. 28518

1987

21 Б1287. Исследование инфракрасной полосы $\nu_1 + \nu_3$
ONCl. Study of the $\nu_1 + \nu_3$ infrared band of ONCl.
Cheikh M., Hubbard R. «Spectrochim. acta», 1987,
A43, № 4, 515—516 (англ.). Место хранения ГПНТБ
СССР

Изучен ИК-спектр поглощения газ. (давл. 4,88 Тор)
 $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ (I) в обл. полосы $\nu_1 + \nu_3$ ($\sim 2105\text{—}2155\text{ см}^{-1}$).
Спектр регистрировали на ИК-фурье-спектрометре с раз-
решением $\sim 0,005\text{ см}^{-1}$. Наблюдали 435 линий А-типа.
Произведено отнесение линий в спектре к различным
типам колебательно-вращат. переходов. Отнесение про-
контролировано теор. расчетом частот переходов моле-
кулы I типа асимм. волчка. Оценены значения ν_0 (2131,
517 765 см^{-1}), вращат. постоянных А, В, С и констант
центробежного искажения. А. В. Бобров

М.П.

Х. 1987, 19, № 21

ONCl

Om. 28518

1987

№ 11 Л215. Изучение ИК-полосы ONCl $\nu_1 + \nu_3$. Study of the $\nu_1 + \nu_3$ infrared band of ONCl. Chejkh M., Hubbard R. «Spectrochim. acta», 1987, A43, № 4, 515—516 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получен ИК-спектр поглощения молекулы ONCl в области 2105—2155 cm^{-1} при комнатной т-ре. Проведено отнесение вращательной структуры колебательной полосы $\nu_1 + \nu_3$. Путем обработки данных по положению в спектре 435 линий поглощения вычислены константы тонкой структуры для колебательного уровня (101) ONCl. Е. Н. Т.

ИК спектр,
 $\nu_1 + \nu_3$

ср 1987, 18, N 11

CINO

1987

7 6 Л199. Спектр поглощения CINO в области 190—350 нм. The absorption spectrum of CINO between 190 and 350 nm. Tyndall G. S., Stedman K. M., Schneider W., Burrows J. P., Moortgat G. K. «J. Photochem.», 1987, 36, № 2, 133—139 (англ.)

С помощью автоматизированного спектрометра оригинальной конструкции исследованы спектры УФ-поглощения газа CINO в области 190—350 нм. Проведенные исследования позволили устранить существовавшие ранее разногласия между различными опубликованными результатами. Получены абс. значения сечения поглощения, которые могут быть использованы в качестве стандарта при актинометрич. исследованиях.

К. Э. М.

(М.Л.)

ср. 1987, 18, № 6

ClNO

Om. 25720 1987

106: 110334b The absorption spectrum of nitrosyl chloride between 190 and 350 nm. Tyndall, G. S.; Stedman, K. M.; Schneider, W.; Burrows, J. P.; Moortgat, G. K. (Air Chem. Res. Max-Planck-Inst. Chem., D-6500 Mainz, Fed. Rep. Ger.). *Photochem.* 1987, 36(2), 133-9 (Eng). The UV spectrum of ClNO was studied by using a microcomputer-controlled scanning spectrometer. The absorption cross-sections of ClNO were detd. at 295 K & 190-350 nm. These new measurements enable the discrepancies between different detns. of the ClNO absorption cross-sections to be rationalized. They provide a reliable set of data for actinometric purposes.

УФ спектр
получен

C.A. 1987, 106, 114

Носсе

1988

4 Л207. Исследование ИК-полосы ν_1 ONCl. Совпадения с линиями лазера CO и уширение давлением. Infrared studies in the ν_1 band of ONCl: CO laser line coincidences and pressure broadening data / Cheikh M., Picard-Bersellini A. // Spectrochim. acta. A.—1988.— 44, № 12.— С. 1443—1445.— Англ.

М.П.

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения газообразного NO^{35}Cl в области 1780—1820 см^{-1} с разрешением 0,005 см^{-1} . Приведены частоты линий, совпадающие в пределах 0,035 см^{-1} с частотами линий генерации лазера $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$. В интервале давл. 0—50 мм рт. ст. смеси ONCl с аргоном измерены ширины линий $^2R_4(25)$ и $^2P_0(17)$ полосы ν_1 . В предположении контура Фойгта выполнена редукция к ударной ширине и найдены коэф. уширения этих линий аргоном.

М. В. Т.

ф. 1989, № 4

ONCE

(Om. 31446)

1988

Contreras J.B., Grecco J.A.

Spectrosc. Lett., 1988,

21, N8, 745-755.

The Harmonic and an-

harmonic Force Fields
of Nitrosyl Halides.

ONCl

Ом. 30376

1988

2 Л178. Исследование ИК-полосы $\nu_2 + \nu_3$ ONCl. Study of the $\nu_2 + \nu_3$ infrared band of ONCl / Cheikh Monia, Valentin Alain // Spectrochim. acta. A.— 1988.— 44, № 8.— С. 783—784.— Англ.

Методом фурье-спектроскопии получен ИК-спектр газа ONCl при давл. 2,8 мм рт. ст., т-ре 300 К в спектральной области 895—945 см^{-1} при эффективной ширине аппаратной ф-ции после процедуры аподизации 0,003 см^{-1} . В указанном диапазоне зарегистрировано более 1800 линий, 260 из них отнесены к полосе $\nu_2 + \nu_3$ изотопа $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$. С использованием литер. значений молекулярных постоянных молекулы ONCl в основном колебательном состоянии методом наименьших квадратов по полученным данным определены частота колебательного перехода $\nu_2 + \nu_3$ и значения вращательных постоянных и постоянных центробежного растяжения ONCl в состоянии (011).

Н. Н. Ф.

М.П.

ср. 1989, N 2

DNCL

от. 30376

1988

2) 6 Б1286. Изучение инфракрасной полосы $\nu_2 + \nu_3$ ONCl. Study of the $\nu_2 + \nu_3$ infrared band of ONCl / Chetikh M., Valentin A. // Spectrochim. acta. A.— 1988.— 44, № 8.— С. 783—784.— Англ.

С высоким разрешением (фурье-спектрометр) измерена вращат. структура полосы $\nu_2 + \nu_3$ в ИК-спектре поглощения (895—945 см^{-1}) молекулы $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$. При анализе спектра использован приведенный гамильтониан Ватсона А-типа в I' представлении. Молекулярные постоянные основного колебат. состояния фиксировались в соответствии с результатами микроволновых исследований молекулы. Начало полосы при 925,191 см^{-1} . Значения вращат. постоянных и параметров центробежного искажения уровня (011) (в см^{-1}): $B_z(A) = 2,9648$, $B_x(A) = 0,18999$, $B_y(A) = 0,17742$, $\Delta_K = 3,59 \cdot 10^{-4}$, $\Delta_J = 1,55 \cdot 10^{-7}$, $\Delta_{JK} = 7,7 \cdot 10^{-6}$, $\sigma_J = 3,8 \cdot 10^{-7}$, $\sigma_K = 1,3442 \cdot 10^{-6}$ (σ_K принято при анализе таким же как и для уровня (000)). В. М. Ковба

М.П.

X.1989, №6

ONCl

1988

Om 30376

109: 179368v Study of the $\nu_2 + \nu_3$ infrared band of nitrosyl chloride (ONCl). Cheikh; Monia; Valentin; Alain (Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1988, 44A(8), 783-4 (Eng). The 260 A type rovibrational lines of the $\nu_2 + \nu_3$ vibrational band of $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$, at $\sim 925 \text{ cm}^{-1}$, were assigned; a least-squares calcn. with a root-mean-square deviation of 0.006 cm^{-1} made it possible to measure several consts. of the (011) vibrational level.

($\nu_2 + \nu_3$)

@.A. 1988, 109, N20

CLNO

(OM · 29224)

1988

Destro R., Merati F.,
et al.

Cl-N
Chgzb

Chem. Phys. Lett.,
1988, 145, N3, 193-199.

An initial study of
the N-Cl bond.

CLNO

1988

Harmony Marlin D.,
Berry Rajiv J., et al.

J. Mol. Spectrosc.

1988, 124(2), 324-36.

(see. SO_2 ; III)

спектр-
тура,
моменты
инерции

CENO⁺ [om. 30490] 1988

Lacoe M.E.,

Ti, Vi; J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N2,

331.

ОНЦ

130353

1988

Краснов К. С.,
Филиппенко М. В.,

и.п.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Дел. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

ONCE

От 30 800 1988

4 Л217. Спектры высокого разрешения ON^{35}Cl в области основных полос ν_1 , ν_2 и ν_3 . High-resolution infrared spectra of the ν_1 , ν_2 , and ν_3 fundamentals of ON^{35}Cl / McDonald J. K., Kalasinsky V. F., Geyer T. J., Durig J. R. // J. Mol. Spectrosc.— 1988.— 132, № 1.— С. 104—122.— Англ.

С помощью фурье-спектрометра BOMEN DA3.002 получены спектры ИК-поглощения газообразного хлористого нитрозила с разрешением $0,004 \text{ см}^{-1}$ в области основных полос ν_1 , ν_2 и ν_3 . Приведены частоты линий и их отнесение к колебательно-вращательным пере-

М.П.

ф. 1989, № 4

ходам. Для каждой полосы зарегистрировано ~ 600 линий. Эти данные вместе с микроволн. частотами вращательных линий использованы для определения колебательных частот, вращательных и центробежных констант в основном и возбужденных колебательных состояниях. Отмечен случай вращательного возмущения в полосе ν_1 вблизи $J=22$, $K=5$, связанный с ее взаимодействием с $2\nu_2+2\nu_3$.

М. В. Т.

DNCE

(Om 30800)

1988

10 Б1287. Инфракрасные спектры высокого разрешения в области фундаментальных полос ν_1 , ν_2 и ν_3 ON^{35}Cl . High-resolution infrared spectra of the ν_1 , ν_2 , and ν_3 fundamentals of ON^{35}Cl / McDonald J. K., Kalasinsky V. F., Geyer T. J., Durig J. R. // J. mol. spectrosc.— 1988.— 132, № 1.— С. 104—122.— Англ.

С высоким разрешением ($0,004 \text{ см}^{-1}$, фурье-спектрометр) измерена вращат. структура полос ν_1 , ν_2 и ν_3 молекулы ON^{35}Cl . При анализе использованы молек. постоянные основного состояния, полученные из микроволновых спектров (// Chem. Phys. Lett.— 1981.— 80.— С. 365). Начала полос соотв. при 1799 , 7316 , $595,8518$ и $331,9707 \text{ см}^{-1}$. Значения (в см^{-1}) вращат. постоянных A , B , C и постоянных центробежного искажения $\Delta_J (\cdot 10^7)$, $\Delta_{JK} (\cdot 10^6)$, $\Delta_K (\cdot 10^4)$, $\delta_J (\cdot 10^8)$ и

М.П.

X. 1989, N 10

$\delta_K (\cdot 10^6)$ верхних колебат. уровней: $v_1 = 1 - 2,892513$;
 $0,192282$; $0,1800373$; $2,1229$; $-1,874$; $1,4415$; $1,719$;
 $1,30$; $\varphi_{JK} = 2,53 \times 10^{-11}$, $\varphi_{KJ} = -1,47 \cdot 10^{-9}$; $\varphi_K = 4,57 \cdot 10^{-8}$;
 $v_2 = 1 - 2,941109$; $0,1906560$; $0,1783946$; $2,124$;
 $-2,102$; $1,5587$; $1,67$; $1,44$; $v_3 = 1 - 2,931514$; $0,1904847$;
 $0,1784287$; $2,118$; $-2,187$; $1,5651$; $1,70$; $1,59$. Во вра-
 щат. структуре полосы v_1 отмечены возмущения, свя-
 занные с уровнем $2v_2 + 2v_3$.

В. М. Ковба

DNCL

(Im 30 800) 1988

(Vi, type UK)

109: 259636t High-resolution infrared spectra of the ν_1 , ν_2 , and ν_3 fundamentals of nitrosyl chloride- ^{35}Cl . McDonald, J. K.; Kalasinsky, V. F. (Res. Dev. Eng. Cent., U. S. Army Missile Command, Redstone Arsenal, AL 35898-5248 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1988, 132(1), 104-22 (Eng). The ν_1 , ν_2 , and ν_3 fundamentals of ON^{35}Cl were recorded with a Fourier transform interferometer at an apodized resolu. of 0.004 cm^{-1} . The data were analyzed together with previous microwave data for the ground vibrational state to yield improved mol. parameters for the (100), (010), and (001) vibrational states. The values for a no. of the centrifugal distortion consts. were obtained for each of these normal modes.

C.A. 1988, 109, N26

ONCl

1988

кон. сп. спектр,
в 6 лос.
составе.

110: 30693k Rotational analysis of nitrosyl chloride. McDonald, Joseph K.; Kalasinaky, Victor F.; Geyer, Thomas J.; Durig, James R. (Res. Dev. Eng. Cent., U. S. Army Missile Command, Redstone Arsenal, AL 35898-5248 USA). *Mikrochim. Acta* 1987 (Pub. 1988). 2(1-6), 429-31 (Eng). The vibrational-rotational spectra of the fundamentals of ONCl were recorded with a Fourier transform interferometer at an apodized resolu. of 0.004 cm^{-1} . The data were analyzed to det. excited state mol. consts. for ν_1 , ν_2 , and ν_3 .

C.A. 1989, 110, 24

ONCl

1988

75 Л154. Вращательный анализ хлористого нитрозила. Rotational analysis of nitrosyl chloride / McDonald Joseph K., Kalasinsky Victor F., Geyer Thomas J., Durig James R. // Mikrochim. acta.— 1988.— 2, № 1—6.— С. 429—431.— Англ.

М.П. С использованием фурье-спектрометра BOMEM DA3.002 получены спектры ИК-поглощения ON^{35}Cl в области основных полос с разрешением $0,004 \text{ см}^{-1}$ после аподизации. Измерены частоты линий ~ 600 для каждой из трех полос. С использованием констант основного колебательного состояния рассчитаны вращательные и центробежные константы в состояниях $v_1=v_2=v_3=1$ и основные колебательные частоты.
М. В. Т.

ф. 1989, 45

ONCl

1989

Alamichel C., Verges J.,

Study of Overtones and Combination Bands in the Infrared spectrum of ONCl

Eleventh Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, ● Giessen, 1989

September 18-22, 1989,
A1, B14.

B14

NOCl

Am 32406

1989

110: 221787d The electronic spectrum of nitrosyl chloride (NOCl): photofragment spectroscopy, vector correlations, and ab initio calculations. Bai, Y. Y.; Ogai, A.; Qian, C. X. W.; Iwata, L.; Segal, G. A.; Reisler, H. (Dep. Chem., Univ. South. California, Los Angeles, CA 90089-0482 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(8), 3904-14 (Eng). The electronic absorption spectrum of NOCl at 620-180 nm was assigned by using vector properties of the NO photofragment and the results of ab initio calens. at the CI level. In assigning the electronic spectrum, the recoil anisotropy, rotational alignment, and Λ -doublet populations of NO were taken into account as well as the calcd. vertical excitation energies, oscillator strengths, and the nature of the orbitals involved in the transitions. Expansion-cooled samples were used and the recoil anisotropy parameters were measured from the Doppler profiles of selected NO Λ $2\Sigma^+ \leftarrow X$ 2Π rotational lines. The alignment parameters and Λ -doublet populations were derived from the rotational spectra using different laser polarizations and excitation detection geometries. The theor. calens. treat all-lying singlet and triplet states. The calens. yield least energy paths for the excited states, with optimized r_{NO} and $ClNO$ angle as a function of r_{ClN} , as well as the angular dependences of the

M. Czekaj
New York

C.A. 1989, 110, 124

potentials and oscillator strengths of the singlet-singlet transitions. The following assignments are proposed for the main absorption bands: (1) E band- $T_1(1\ ^3A'') \leftarrow S_0(1\ ^1A')$; the transition borrows intensity by mixing with remote singlet states, predominantly the $4\ ^1A'$ state; (2) D and C bands- $S_1(1\ ^1A'') \leftarrow S_0(1\ ^1A')$; the C band corresponds to excitation of ν_1 in S_1 ; (3) B band- $S_3(2\ ^1A') \leftarrow S_0(1\ ^1A')$; (4) A band- $S_5(4\ ^1A') \rightarrow S_0(1\ ^1A')$. The assignments proposed here are in full agreement with all the exptl. observations and the results of the calcs. Despite the shallow min. calcd. for the T_1 and S_1 surfaces, dissocn. on all the surfaces is fast, and the implications of the results to the dissocn. dynamics are discussed.

NOCl

(On 32192)

1989

/ 111: 86442r Raman spectra of nitrosyl chloride and molecular chlorine. Photodissociation dynamics. Bell, Andrew J.; Pardon, Patrick R.; Frey, Jeremy G. (Dep. Chem., Univ. Southampton, UK SO9 5NH). *Mol. Phys.* 1989, 67(2), 465-72 (Eng). The resonance enhanced Raman spectra of NOCl and Cl₂ were recorded at a range of laser wavelengths 514-355 nm, in both static and flow cells. A progression of overtone transitions (up to $v'' = 13$) was obsd. in the Raman spectrum of Cl₂ at 355 nm. No overtones were obsd. for the NOCl dissocn. at any of the wavelengths investigated. This suggests that the NOCl photodissocn. may not be as fast as was previously thought.

(CKP, Vi)

C.A. 1989, 111, N10

ONCl

От 31773

1989

7 Лf28. Изучение инфракрасных полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_3$ и $\nu_2 + \nu_3$ ONCl. Study of the ν_1 , $\nu_1 + \nu_3$ and $\nu_2 + \nu_3$ infrared bands of ONCl / Cheikh Monia, Alamichel Claude // Spectrochim. acta. A.— 1989.— 45, № 2.— С. 153—157.— Англ.

Методом фурье-спектроскопии высокого разрешения (до $0,003 \text{ см}^{-1}$) измерены частоты 820 линий полосы ν_1 (1800 см^{-1}), 435 линий полосы $\nu_1 + \nu_3$ (2131 см^{-1}) и 257 линий полосы $\nu_2 + \nu_3$ (925 см^{-1}) спектра поглощения, ONCl. Отнесение линий произведено с помощью гамильтониана Ватсона А-типа в I' -представлении. Получены наборы молекулярных параметров для 3 возбужденных колебат. уровней, причем использовались хорошо определенные параметры основного состояния, взятые из литературы. Приведена таблица коэф. зависимости вращательных постоянных от колебательных квантовых чисел. Библ. 23. И. Г.

И. Г.

ср. 1989, N 7

DNCL

(Om 31773)

1989

110: 239408r Study of the ν_1 , $\nu_1 + \nu_3$ and $\nu_2 + \nu_3$ infrared bands of nitrosyl chloride. Cheikh, Monia; Alamichel, Claude (Lab. Photophys. Mol., Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1989, 45A(2), 153-7 (Eng). A type ($\Delta K_a = 0$) rovibrational lines of the near-prolate asym. top. $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ were assigned on high resolu. Fourier transform spectra: 820 lines of the ν_1 band, centered around 1800 cm^{-1} 435 lines of the $\nu_1 + \nu_3$ band, centered around 2131 cm^{-1} , and 257 lines of the $\nu_2 + \nu_3$ band, centered around 925 cm^{-1} . Least-squares calcns. were carried out over these lines, using the A reduced Watson's Hamiltonian in I_r representation; r.m.s. std. deviations of 0.0016 cm^{-1} , 0.0016 cm^{-1} and 0.006 cm^{-1} were resp. obtained, making it possible to measure mol. consts. of the (001), (101) and (011) vibrational levels of $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$.

(Vi)

KONIAM-
AKAMU

C.A. 1989, 110, N 26

ONCl

DM 31773 1989

13 Б1211. Изучение инфракрасных полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_3$ и $\nu_2 + \nu_3$ ONCl. Study of the ν_1 , $\nu_1 + \nu_3$ and $\nu_2 + \nu_3$ infrared bands of ONCl / Cheikh M., Alamichel C. // Spectrochim. acta. A.— 1989.— 45, № 2.— С. 153—157.— Англ.

На двух ИК-фурье-спектрометрах в обл. частот 1760—1830 и 2105—2155 см^{-1} с разрешением 0,005 см^{-1} и в обл. частот 895—945 см^{-1} с разрешением 0,003 см^{-1} измерен колебательно-вращат. спектр полос ν_1 , $\nu_1 + \nu_3$ и $\nu_2 + \nu_3$ $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$. Анализ ИК-спектра выполнен в приближении модели слабо вытянутого асимм. волчка с использованием гамильтониана Уотсона в А-редукции с учетом квартичного и секстичного центробежного искажения. Для полос (100), (101) и (011), соотв., определены центры полос $\nu_0 = 1799,7356(2)$, $2131,5178(2)$ и $925,191(1)$ см^{-1} , эффективные вращат. и центробежные постоянные в возбужденных состояниях. Определена зависимость величины вращат. постоянных от колебат. квантового числа.

С. Н. Мурзин

И.Л.

X. 1989, N 13

ONCl

[OM. 31842]

1989

Picard - Bersellini A.,
Cheikh M., et al.,

Chem. Phys. 1989, 133, N3,
461-467.

Infrared photodissociation in
ONCl using a ● multiline

CO laser.

ONCl

1989

111: 122928q Study of overtones and combination bands in the infrared spectrum of nitrosyl chloride (ONCl). Verges, Jean; Chevillard, Jacqueline; Alamichel, Claude; Etcheberry, Jean Roger (Lab. Aime Cotton, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1989, 159(4), 315-17 (Eng). The $2\nu_1$, $2\nu_1 + \nu_3$, $2\nu_1 + \nu_2$, $2\nu_1 + 2\nu_2$, $3\nu_1$, $3\nu_1 + \nu_3$ and $4\nu_1$ IR bands of ONCl were recorded. A least-square calcul. over a few lines of the $3\nu_1$ band of $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$, with a rms deviation of 0.003 cm^{-1} , provided values for several consts. of the $\nu_1 \approx 3$ level.

(Vi, UK)

C.A. 1989, 111, N14

ONCl

1989

12 Л176. Изучение обертонов и составных полос в ИК-спектре ONCl. Study of overtones and combination bands in the infrared spectrum of ONCl / Vergès Jean, Chevillard Jacqueline, Alamichel Claude, Etcheberry Jean-Roger // Chem. Phys. Lett.— 1989.— 159, № 4.— С. 315—317.— Англ.

Исследованы ИК-спектры ($10\,130\text{--}2100\text{ см}^{-1}$) газообразного ONCl при комн. т-ре и давл. 5—97 мм рт. ст. с разрешением $0,005\text{ см}^{-1}$. Идентифицированы полосы обертонов $2\nu_1$, $3\nu_1$ и $4\nu_1$ и составных колебаний $2\nu_1+\nu_3$, $2\nu_1+\nu_2$, $2\nu_1+2\nu_2$ и $3\nu_1+\nu_3$. Проведен анализ вращательной структуры ИК-полос. Методом наименьших квадратов рассчитаны частоты колебательно-вращательных компонентов ИК-полосы $3\nu_1$ в спектре молекул $^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$. Определены эффективные вращательные постоянные и константы центробежного искажения для колебательно-го уровня (300) этих молекул. Среднеквадратичное от-

М.П.

ф. 1989, N 12

клонение найденных величин составляло $0,003 \text{ см}^{-1}$.
И. В. А.

ONCl

1989

7 2 Б1157. Изучение обертонов и комбинационных полос в инфракрасном спектре ONCl. Study of overtones and combination bands in the infrared spectrum of ONCl / Vergès J., Chevillard J., Alamichel C., Etcheberry Jean-Roger // Chem. phys. lett.— 1989.— 159, № 4. — С. 315—317.— Англ.

Измерены (фурье-спектрометр) ИК-спектры поглощения ONCl (давл. газа до ≈ 100 мм, многоходовая оптич. ячейка с длиной поглощающего слоя до 32 м) в обл. полос $2\nu_1$, $2\nu_1+\nu_3$, $2\nu_1+\nu_2$, $2\nu_2+2\nu_1$, $3\nu_1$, $3\nu_1+\nu_3$ и $4\nu_1$ (положение центров полос соотв. при 3565, 3890, 4160, 4740, 5290, 5620, 6975 см^{-1}). Предварительно интерпретированы еще две полосы, 5880 и 8634 см^{-1} , как $3\nu_1+\nu_2$ и $5\nu_1$. Проанализирована вращат. структура полосы $3\nu_1$ и определены начало полосы и значения эфф. вращат. постоянных колебат. уровня $(300)^{16}\text{O}^{14}\text{N}^{35}\text{Cl}$ (в см^{-1}): $\nu_0=5292,107$, $A=2,84855$, $B=0,194165$, $C=0,181541$, $\Delta_J=2,167 \cdot 10^{-7}$, $\Delta_{JK}=-1,31 \cdot 10^{-8}$, $\Delta_K=1,29 \cdot 10^{-4}$, $\delta_J=1,6 \cdot 10^{-8}$.

В. М. Ковба

М.Л.

X. 1990, №2.

NoCl

1989

2 Б1014. Электронный спектр NOCl; спектроскопия фотофрагментации, векторные корреляции и неэмпирические расчеты. The electronic spectrum of NOCl: Photofragment spectroscopy, vector correlations, and ab initio calculations / Bai Y. Y., Ogai A., Qian C. X. W., Iwata L., Segal G. A., Reisler H. // J. Chem. Phys.—1989.— 90, № 8.— С. 3903—3914.— Англ.

Исследован электронный спектр поглощения NOCl (I) в диапазоне 620—180 нм. Неэмпирич. методом ССП в биэкспоненциальном базисе с поляризац. ф-циями с учетом configuraц. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями рассчитаны основное и ряд возбужденных состояний I. Дано отнесение электронного спектра поглощения I, учитывающее его эксперим. х-ки и результаты расчетов. Результаты использованы для обсуждения динамики диссоциации I в разных электронных состояниях. В. И. Фаустов

М.А.

Х. 1990, N 2.

NOCl

Om 34376)

1990

113: 48872q Raman emission from the photolysis of nitrosyl chloride (NOCl) at 266 nm. Bell, Andrew J.; Frey, Jeremy G. (Dep. Chem., Southampton Univ., Southampton, UK SO9 5NH). *Mol. Phys.* 1990, 69(5), 943-5 (Eng). A progression in both the ν_2 and ν_3 vibrational modes, extending for several thousand cm^{-1} was obsd. in the 266 nm Raman spectrum of NOCl.

ν_2, ν_3

c.A. 1990, 113, N 6

$O=N-Cl$

(om. 33714)

1990

Birnewies M.,
Schröckel H.,

I, меня
гаряче

Chem. Rev. 1990, 90,
N1, 321-330.



NOU

[Om 34516]

1990

Qian C.X.W., Ogai A., et al.,
J. Chem. Phys. 1990, 92,
N7, 4296-4307.

The influence ● of excited-state

vibrations on fragment state
distributions: The photodisso-
ciation of NOCl on T_1 ($1^3A''$).

СЛНО

1990

7 Б1264. Фотодиссоциация CINO в состоянии S_1 : квантово-механическое неэмпирическое изучение. Photodissociation of CINO in the S_1 state: A quantum-mechanical ab initio study / Schinke Reinhard, Nonella Marco, Suter Hans Ulrich, Huber J. Robert // J. Chem. Phys.— 1990.— 93, № 2.— С. 1098—1106.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием биэкспоненциального базиса с поляризац. функциями и с учетом взаимодействия между очень большим числом предварительно отобранных одно- и двухкратно возбужденных конфигураций рассчитана трехмерная ПВ потенциальной энергии для фотодиссоциации CINO из нижнего синглетного электронно-возбужденного состояния S_1 . Вычисленная ПВ потенциальной энергии использована для квантовомех. расчета динамики диссоциации и колебат. структуры ЭСП. Показано, что данная реакция идет без активац. барьера. Колебат. возбуждение фрагмента NO мало и м. б. количественно описано в рамках адиабатич. приближения. Распределение вращат. состояний NO сильно инвертировано, имеет максимум при $j=30$ и с достаточно высокой точностью описывается гауссовой функцией.

К. Я. Бурштейн

М. П.

Х. 1991, № 7

CINO

1990

24 Б4140. Фотодиссоциация CINO в S_1 -состоянии.
Точные трехмерные зависящие от времени квантово-механические расчеты. Photodissociation of CINO in the S_1 -state: Exact 3D time dependent quantum mechanical calculations / Untch Agathe, Schinke Reinhard // MOLEC VIII: 8th Eur. Conf. Dyn. Mol. Collisions, Bernkastel—Kues, Sept. 10—14, 1990: Abstr. invit. lect. and contrib. pap.— Kaiserlautern, 1990.— С. 225—226.— Англ.

X. 1990, N 24

ClNO ,
 Cl_2NO^+
 Cl_3NO

1991
Brumm M., Frenking G.,
Koch W.

Chem. Phys. Lett. 1991. 182,
N3-4. C. 310-314.

(Cl_4HNO , $\bullet \text{H}_2\text{NO}^+, \text{H}_3\text{NO}; \text{III}$)

ON³⁵Cl [Om. 35697] 1991

ON³⁷Cl Durig J.R., Beyer T.J., et al.,

Гарексый Г. МР. Spect. 1991, 244,
ab initio, 103 - 115.
расчет

Far - infrared spectra and
ab initio cal ● culations of

nitrosyl chloride.

ONCl

1991

/ 114: 49906m Infrared studies of matrix-isolated and neat solid nitrosyl chloride. Jones, L. H.; Swanson, B. I. (Isot. Nucl. Chem. Group, Los Alamos Natl. Lab., Los Alamos, NM 87545 USA). *J. Phys. Chem.* 1991, 95(1), 86-90 (Eng). The IR spectra of nitrosyl chloride (ONCl) isolated in rare gas solids have been studied in an attempt to verify the existence of a dimer. The results indicate that with increased concn. and with high-temp. annealing one or more types of dimers or possibly trimers form in Ar and Kr matrixes. In a Xe matrix we see the presence of dimers at concns. of 0.2%, and eventually multimers and aggregates form with high-temp. annealing. In liq. solns. of ONCl in K, Xe, and CS₂ no evidence of dimer formation is seen. In the solid state at 150-160 K we see absorption peaks at 1925 and 520 cm⁻¹, which are attributable to the mol. solid showing Raman peaks at 1900 and 475 cm⁻¹. For the ionic phase we observe an IR NO⁺ stretching frequency of about 2090 cm⁻¹, close to that obsd. in Raman spectra. The frequency of the NO stretch for the mol. solid is strongly influenced in an upward direction by the presence of intimately dispersed ionic solid, leading us to believe that the mol. solid consists of long chains with strong intermol. coupling rather than discrete dimers.

check b
manuscript,
Di.

C.A. 1991, 114, 26

CINO
CLON

1992

116: 113810w Investigation of nitrosyl halide and (halooxy)im-
idogen (XNO and XON (where X = chlorine or bromine)) and
their protonated isomers. Meredith, Cynthia; Quelch, Geoffrey E.;
Schaefer, Henry F., III (Cent. Comput. Quantum Chem., Univ.
Georgia, Athens, GA 30602 USA). J. Chem. Phys. 1992, 96(11),
480-8 (Eng). Ab initio mol. electronic structure methods have been
used to examine nitrosyl chloride (CINO) and nitrosyl bromide
(BrNO), their hypohalite isomers (i.e., CLON and BrON), and all
possible singly-protonated forms of these species. Equil. geometries
have been optimized and harmonic vibrational frequencies obtained
for each parent structure and protonated isomer at the self-consistent-field
(SCF) double zeta plus polarization (DZP) level of theory. Mol.
structures also have been optimized with the DZP basis set, utilizing
the single and double excitation CI method (CISD). This study has
located stable min. corresponding to the nitrogen hypohalites XON
(where X = Cl or Br), neither of which has been obsd. exptl. For all
of the species under study, protonation at the nitrogen is energetically
favored over protonation at the oxygen atom. Protonation at the
halogen atom of either XNO structure, however, results in the
formation of stable trans and cis isomers. Similar protonation of
XON results in a rearrangement of the halogen-protonated XNO
form.

ab initio calc-
rem,
comp. comp.
happening, etc.

C.A. 1992, 116, N 12 BrNO, BrON

С.Н.О

1992

Г 2 Б1036. Исследование XNO и XON (где X=Cl или Br) и их протонированных изомеров. Investigation of XNO and XON (where X=Cl or Br) and their protonated isomers / Meredith Cynthia, Queilch Geoffrey E., Schaefer Henry F. // J. Chem. Phys. .—1992 .—96 ,№ 1 .—С. 480—488 .—Англ.

Неэмпирическим методом ССП, а также методом конфигурац. вз-виз с использованием двухэкспонентных базисных наборов, дополненных поляризац. ф-циями, проведены расчеты электронного и геометрич. строения нитрозилхлорида ClNO, нитрозилбромиды BrNO, их изомеров ClON и BrON и возможных протонир. форм этих частиц. Для всех исследованных частиц найдено, что протонирование по атому азота более энергетически выгодно, чем по атому кислорода. В то же время протонирование по галогенидному атому еще более выгодно, чем по атому азота; при этом транс-изомеры более стабильны, чем цис-изомеры. Протонирование приводит к ослаблению связи NO и упрочнению связи X—(NO) (X — галогенидный атом). Показано, что все протонир. формы XNO стабильнее соотв-щих форм XON. Полученные результаты сопоставлены с данными для молекул FNO и FON. Библ. 77.

И. Н. Сенченя

И.Н.

(+2)

Х. 1993, №2

ClNO
ClON

1992

№ 11 Д83. Исследование XNO и XON (где X=Cl или Br) и их протонированных изомеров. Investigation of XNO and XON (where X=Cl or Br) and their protonated isomers / Meredith C., Quelch G. E., Schaefer (III) H. F. // J. Chem. Phys.— 1992.— 96, № 1.— С. 480—488.— Англ.

Неэмпирическими методами исследованы молекулы ClNO и BrNO, их изомеры ClON и BrON, а также все возможные однократно протонированные формы этих изомеров. Равновесные геометрии оптимизированы, и частоты гармонич. колебаний получены для каждой исходной структуры и протонированного изомера в рамках метода Хартри—Фока с использованием двухэкспонентного базиса плюс поляризация. Оптимизация молекулярных структур проведена методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений. Показано, что замена N на H энергетически более выгодна, чем замена атома O. Протонирование атома галогена в структуре XNO приводит к образованию стабильных цис- и трансизомеров. Аналогичное протонирование XON приводит к перестройке в форму XNO.

и.п.

(4)



BrNO
BrON

ф. 1992, N 11-12

35 CENO.

PM 36 634

1992

117: 78920d Quadrupole coupling measurements on nitrosyl chloride- ^{35}Cl ($^{35}\text{ClNO}$). Roehrig, M. A.; Kukolich, S. G. *J. Phys. Chem., Univ. Arizona, Tucson, AZ 85721 USA*. *Mol. Phys.* 1992, 76(1), 221-7 (Eng). Hyperfine structure for $J = 0 \rightarrow 1$ and $J = 1 \rightarrow 2$ transitions of $^{35}\text{ClNO}$ was measured using a pulsed-beam, Fourier transform spectrometer and beam-maser spectrometer. The ^{35}Cl hyperfine resolved microwave spectra were analyzed to obtain eQq_{Cl} (^{35}Cl) = -49.05(4), eQq_{Cl} (^{35}Cl) = 30.0(4.0), eQq_{N} (^{14}N) = 0.98(6), and eQq_{N} (^{15}N) = -4.78(22) MHz. The quadrupole coupling values are discussed in relation to results in other small mols. and nitrosyl complexes. Rotational consts. obtained from the measurements were $B = 5737.70(6)$ and $C = 5376.32(6)$ MHz.

M.A.

C.A. 1992, 117, N8

CENO

1993

Lee Timothy J.,

J. Chem. Phys. — 1993,
u.n. 99, N 12, C. 9783-9789.

(cu. HNO; III)

CDON

1994

Lee, Timothy F.,

модем.
расчет
статистик. Chem. Phys. Lett., 1994,
223, (5-6), 431-8.

(see. DON: III)

CFNO

1994

Martin Jan M.L.,
Francois Jean-Pierre,
et al.

см. посей.,

Δ H атомы.,

Δ f H

таблица Т. ф.

в форме

таблицы
JANAF

J. Phys. Chem. 1994,
98 (44), 11394-400.



(см. FNO; iii)

LNVO

[Om. 38052]

1995

спрыжыра,
сцц. нсчм.
спрыжам-
нсчмч.

Bethany fate house,
Holger S-P. Müller,
Nils Heineking, et al.,

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1995, 91(19),
3347-3355

CINO

1997

128: 198042t Matrix infrared spectra and ab initio calculations of nitrosyl chloride complex with water. Hallou, A.; Schriver-Mazzuoli, L.; Schriver, A.; Sanna, N.; Pieretti, A. (Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications, Unité propre du CNRS, Université Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, Fr.). *Asian J. Spectrosc.* 1997, 1(4), 189-200 (Eng), Spectral-Force Publications. IR spectra of 1:1 complex between water and nitrosyl chloride in nitrogen matrix are reported. Isotopic substitution for water (HOD, D₂O) and force field calcns. suggest that the 1:1 complex is weakly hydrogen bonded. The complex was studied by means of ab initio computations. Three structures were found to be the stationary points on the energy surface. The non-planar model where H₂O mol. simultaneously interacts with the ClN and NO bonds of ClNO mol. is the stable structure of the complex. The remaining two planar models are first-order saddles and were estd. less stable than the stable structure up to about 20 kJ mol⁻¹.

(UK &
Mampura)

C.A. 1998, 128, N16

F: CINO

P: 3

1999

132:84448 Complete basis set and gaussian computational study of bond dissociation energies, enthalpy of formation and rearrangement barriers for XNO nitric oxide derivatives. Jursic, B. S.

Department of Chemistry, University of New Orleans New Orleans, LA, USA THEOCHEM, 492, 35-43 (English) 1999 Systematic computational studies of the XNO (X = H, F, Cl, and OH) mol. systems with complete basis set and gaussian ab initio methods were used accurate evaluations of their enthalpies of formation, bond dissocn. ener relative energies, and activation barriers of rotation and isomerization. was demonstrated that exptl. detd. enthalpies of formation for nitrogen o derivs. are 2-3 kcal/mol higher than they should be. Better heats of for as well as bond dissocn. energies for these mol. systems are offered.

C.A. 2000, 132

2000

F: Cl-N=O

P: 3

132:302523 Isomerizations between nitrosyl
halides X-N=O and isonitrosyl halides X-O-N: a
matrix-spectroscopic study. Maier, Gunther;
Reisenauer, Hans Peter; De Marco, Michael
Institut für Organische Chemie der Justus-
Liebig-Universität Giessen 35392, Germany Chem.-
Eur. J., 6(5), 800-808 (English) 2000 ~~Wiley-VCH~~

C. A. 2000

65: 73 Irradn. of nitrosyl bromide BrNO (4) with light of the wave-length $\lambda = 248 \text{ nm}$ and nitrosyl chloride ClNO (6) with $\lambda = 193 \text{ nm}$ in an Ar matrix at 10 K leads to the corresponding isomers isonitrosyl bromide BrON (5) and isonitrosyl chloride ClON (7). Both new compds. 5 and 7 were identified by comparison of the exptl. and calcd. (BLYP/6-311 + G*) IR spectra. Nitrosyl fluoride FNO (8) could not be transferred into isonitrosyl fluoride FON (9). The reverse reactions 5.fwdarw.4 and 7.fwdarw.6 can be initiated by UV($\lambda > 310 \text{ nm}$), visible or IR light. The retransformation also occurs spontaneously in the matrix at 10 K under exclusion of any UV/visible or IR radiation. Surprisingly, the reaction rates of these spontaneous back reactions are temp. independent between 8.5 and 25 K. The mechanism of these processes is discussed.

~~photochemical reaction~~