

NSF₃

NSF_3

W. H. Kirchhoff

1961

Spectrochim. Acta, 1961, 17, 1096

Микроволновая спект. NSF_3 .

Обл. 8000 - 60000 cm^{-1} . $d(\text{S}-\text{N}) = 1.416 \text{ \AA}$, $d(\text{S}-\text{F}) = 1.552 \text{ \AA}$,

$\angle \text{FSF} = 94^\circ 2'$

Sulfur-nitrogen-fluorine compounds. X. Preparation and properties of SNF and NSF₃. Oskar Glemser and Hans Richert (Univ. Göttingen, Ger.). *Z. anorg. u. allgem. Chem.* 307, 313-27(1961); cf. *CA* 54, 17136i.—Heating S₄N₄ with AgF₂ or CoF₃ in CCl₄ gives a complex, volatile mixt. contg. SNF as a major component, NSF₃, and numerous other compds. SNF, also present in low yield among the substances formed by refluxing S₄N₄F₄ in CCl₄, is an unstable, reactive, pungent gas; from vapor-pressure data, $\Delta H_{\text{vap.}} = 6052$ cal./mole and Trouton's const. = 22.1. SNF reacts with Cl to give gaseous SNCl and other products; with BF₃ to give unstable, colorless crystals (SNF·BF₃ ?); with NaI to give I; and with AgF₂ to give NSF₃ and other products. SNF hydrolyzes quant. to SO₃²⁻, F⁻, and NH₄⁺; OSNH is an intermediate. Alk. hydrolysis gives the same final products, but not quant. and by a different mechanism. NSF₃ is a stable, pungent gas, b. -27.1°, m. -72.6°; from vapor-pressure data, $\Delta H_{\text{vap.}} = 5526$ cal./mole and Trouton's const. = 22.5. NSF₃ resists hydrolysis, but in aq. NaOH gives H₂NSO₃⁻ and F⁻; the mechanism is discussed. NSF₃ reacts with BF₃ to give unstable, colorless crystals of NSF₃·BF₃, and decomp. in glass at 500° to S, SO₂, N, SiF₄, and metal fluorides. 15

C.A. 1961.55.24

24345cdef

references. XI. Structure of some sulfur-nitrogen-fluorine compounds. Hans Richert and Oskar Glemser. *Ibid.* 328-44.—The infrared spectra of gaseous NSF_3 and SNF at 6-570 mm. and 10-740 mm. pressure, resp., are detd. in the NaCl, KBr, and CsBr regions. NSF_3 , symmetry C_{3v} , has a tetrahedral configuration around a central S atom. Force consts. and bond orders are: S-N, 12.4 millidynes/A., 2.3; S-F, 5.6 millidynes/A., 1.2. SNF is probably a bent mol. with N at the apex. The force consts. and bond orders are: S-N, 10.4 millidynes/A., 2.3; N-F, 1.5 millidynes/A., <1. Nuclear magnetic resonance spectra are detd. for SNF , NSF_3 , $\text{S}_3\text{N}_2\text{F}_3$, and $\text{S}_4\text{N}_4\text{F}_4$. The results support the infrared findings for NSF_3 . $\text{S}_3\text{N}_2\text{F}_3$ and $\text{S}_4\text{N}_4\text{F}_4$ have cyclic structures with alternating double and single bonds; the F atoms are attached to S atoms. 33 references. Richard H. Jaquith

SNF

1961

20Б82. Определение молекулярной структуры SNF электронографическим методом. Rogowski F. Bestimmung der Molekülstruktur von SNF mit Elektronenbeugung. «Z. phys. Chem.» (BRD), 1961, 27, № 3—4, 277—296 (нем.).—Электронографически сектор-микрофотометрич. методом изучено строение молекулы SNF (I). Расшифровка полученных электрограмм методом последовательных приближений приводит к следующим значениям межъядерных расстояний (Å) и углов в молекуле I: S—N $1,62 \pm 0,03$, N—F $1,42 \pm 0,03$, $\angle$ SNF $122 \pm 3^\circ$. В. Спиридонов

Р.Н.С. Жилина
1961. 20Б82.

1 SNF

•/Determination of the molecule structure of SNF by electron diffraction. F. Rogowski (Phys.-Tech. Bundesanst., Braunschweig, Ger.), *Z. physik. Chem.* (Frankfurt) 27, 277-96(1961); cf. Gleinser, *et al.*, *Cd* 49, 12170a.—Electron-diffraction pictures have been taken of SNF, colorless gas, b. +0.4, m. -89°, to det. its constitution, an s^{-2} sector being used. The sequence of max. and min. obtained is evaluated photometrically. Of the 2 possible isomers, the form SNF exists. For the quant. structure detn., 100 scattering curves of theoretically possible models are discussed. The following values were obtained: $S-N = 1.62 \pm 0.03$ Å., $N-F = 1.42 \pm 0.03$ Å., $\angle SNF = 122 \pm 3^\circ$.

Friedrich Epstein

2.A. 1961, 55, 17
16070i

SNF

11961

Рис. 1

1 12B75. Определение структуры молекулы $S-N-F$ по рассеянию электронных пучков. Rogowski F. Bestimmung der Molekülstruktur von SNF mit Elektronenbeugung. «Z. phys. Chem.» (BRD), 1961, 27, № 3—4, 277—296 (нем.).—Методом рассеяния электронных пучков исследована структура молекулы $S-N-F$ в газообразном состоянии. Для количеств. определения молекулярных параметров проведен расчет свыше ста кривых рассеяния для теоретически возможных моделей молекулы с различными значениями углов (ν) и межатомных расстояний (R). Получены следующие значения параметров молекулы: $R(S-N) = 1,62 \pm 0,03 \text{ \AA}$, $R(N-F) = 1,42 \pm 0,03 \text{ \AA}$ и $\nu(S-N-F) = 122^\circ \pm 3^\circ$.

Е. Пшеничнов

ф. 1961. 12

NSF₃

u.b.

copy type

BP-1009-III

1962

372

The microwave spectrum and structure of NSF₃.—William H. Kirchhoff and E. Bright Wilson, Jr. (Harvard Univ.). *J. Am. Chem. Soc.* 84, 334-6(1962).—Fragments in the mass spectrum of the gaseous compd. NSF₃ indicate that the

mol. is a symmetric top, N—S $\begin{matrix} \text{F} \\ \diagup \\ \text{F} \\ \diagdown \\ \text{F} \end{matrix}$. This structure was con-

firmed and made quant. by a study of the microwave spectrum of the compound in the region 8-60 kMc. The following set of structural parameters was obtained: d(S-N) = 1.416 Å., d(S-F) = 1.552 Å. and $\angle \text{FSF} = 94^\circ 2'$. The dipole moment of NSF₃ was measured and found to be 1.91 ± 0.03 D. The quadrupole coupling const. of the N¹⁴ nucleus is $+1.19 \pm 0.05$ Mc. Mary K. Dorfman

BP-5254-III

C. H., 1962, 56, 12

13689a6

NSF₃
мв,

ВР-1000-III

1962

372

9 В143. Микроволновой спектр и структура NSF₃. Kirchhoff William H., Wilson E. Bright Jr. The microwave spectrum and structure of NSF₃. «J. Amer. Chem. Soc.», 1962, 84, № 3, 334—336 (англ.)

В диапазоне 8—60 к Мгц исследован микроволн. спектр молекулы NSF₃, полученной действием AgF₂ на S₄N₄ в четыреххлористом углероде. Спектр характерен для молекулы типа симметричного волчка. Идентифицированы линии, относящиеся к молекулам с различными изотопами N и S. Определены возможные расстояния и

углы для структуры $N-S \begin{matrix} \diagup F \\ - F \\ \diagdown F \end{matrix}$, вероятность которой

подтверждена анализом масс-спектра. Сопоставление найденных значений расстояний S—F и S—N с известными для других молекул и рассчитанными по ковалентным радиусам приводит к следующим параметрам

$d(S \equiv N) = 1,416 \text{ \AA}$; $d(S-F) = 1,552 \text{ \AA}$ и $\angle F S F = 94^\circ 2'$. Из спектра определены дипольный момент $M = 1,91 \pm \pm 0,03$ ед. Дебая и константа квадрупольной связи $eQq(N^{14}) = +1,19 \pm 0,05 \text{ Мгц}$.

Г. Шипуло

ВР-5254-III

РЖФ 1962
9 В143

NSF₃

22Б90. Микроволновый спектр и структура NSF₃.

Kirchhoff William H., Wilson E. Bright Jr.
The microwave spectrum and structure of NSF₃. «J.
Amer. Chem. Soc.», 1962, 84, № 3, 334—336 (англ.).—

С помощью спектрометра со штарковской модуляцией
в диапазоне 8—60 кМгц измерен спектр NSF₃ (I),
характерный для симметричного. Идентифицированы
переходы 0→1, 1→2, 2→3 и 5→6 в N¹⁴S³²F₃; 2→3 и
5→6 в N¹⁴S³³F₃ (II); 1→2; 2→3; 5→6 в N¹⁴S³⁴F₃ (III)
и 2→3; 5→6 в N¹⁵S³²F₃ (IV) и найдены моменты инер-
ции (в ат. ед. массы × Å²) 109,039; 109,110; 109,179 и
11,838 для I—IV соответственно. Это соответствует
структуре N≡SF₃ с одним из двух возможных наборов
параметров: 1) $d_{\text{SN}} 1,416 \pm 0,003 \text{ Å}$; $d_{\text{SF}} 1,552 \pm 0,003 \text{ Å}$;
 $\angle \text{FSF } 94^\circ 2' \pm 16'$; 2) $d_{\text{SN}} 1,910 \pm 0,003 \text{ Å}$, $d_{\text{SF}} 1,488 \pm$
 $\pm 0,003 \text{ Å}$; $\angle \text{FSF } 120^\circ 0' \pm 16'$. По эффекту Штарка пе-
рехода 1→2 найден дипольный момент $\mu = 1,91 \pm$
 $\pm 0,03 \text{ D}$. Квадрупольное расщепление перехода 0→1
на ядре N¹⁴ дает $eq Q 1,19 \pm 0,05 \text{ Мгц}$. Масс-спектромет-
рич. исследование I выявляет фрагменты SF₃, NSF₂,
SF₂, NSF, NS, S, F и N, что подтверждает предложен-
ную структуру.

Т. Бирштейн

1962
372

Б-91-11-1009

ж.1962.22

NSF₃

1962-5113-III
B9p - 5113-III

1962

(cns.
noct.)

2.

) Molecular constants of NSF₃. K. Ramaswamy, K. Sathianandan, and Forrest F. Cleveland (Illinois Inst. Technol., Chicago). *J. Mol. Spectr.* 9, 107-13(1962); cf. Richert and Glemser, *CA* 55, 24345e. Potential-energy consts. for gaseous NSF₃ were obtained for the general-valence-force potential function. By use of these force consts., rotational-distortion consts. and Coriolis-coupling consts. were evaluated. Mean-square-amplitudes of vibration were calcd. by the secular-equation method, and the heat content, free energy, entropy, and heat capacity were calcd. by statistical methods with an IBM 1620 computer for 1 atm. pressure at 12 temps. between 100 and 1000°K. for a rigid-rotor, harmonic-oscillator approxn.

Robert A. Bleidt

C.A. 1962.57.11

13193p

NSP₃
защита
суд. коф.

Ramaswamy K. Sathianandan, K.
Cleveland P.F.,

J. Molec. Spectrosc., 1962, 9, 107-113.

Молекулярные азотные N_2F_3 .

Распределение

Д^ДД^ДД^Д
нофян! Карюмова взын

$$\begin{aligned} z_{S-1} &= 1.416 \\ z_{S-F} &= 1.552 \\ \angle F S F &= 94^{\circ} 2' \\ \angle N S F &= 122^{\circ} 22' \end{aligned}$$

Вычислены термодин. ф-ции
в интервале $100 - 1000^\circ\text{K}$.

$$a(1515, 775, 521 \text{ см}^{-1})$$

$$e(811, 429, 342 \text{ см}^{-1})$$

III - 1126

NSe_3 ($\times$ $\angle$)

1952

Wilson E.B. Jr.

Pure and Appl. Chem., 1952, 4, 111
(Ann.,)

Vibrational-rotational spectra

Ex., 1952, 22535

10

Ex. p.k.

NSF₃
NSF

Kirchhoff W.H.

1964

Diss. Abstrs, 1964, 25, №2, 366

м.б.

Микроволновое исследование
в неорг. химии.

NSF₃ - симм. топ., S-F $1,552 \pm 0,003$ Å,
S-N $1,416 \pm 0,003$

NSF₃ - нелинейна, в центре S
∠FSF $94^{\circ}2' \pm 16'$

S-N $1,446 \pm 0,01$ Å

S-F $1,646 \pm 0,01$

∠NSF $116^{\circ}52' \pm 15'$

NSF₃

O₂F₂

CH₂NOH

+ 2 крб.

Вар - 5604 - III

1962

10 В47. Колебательно-вращательные спектры. Wilson E. Bright, Jr. Vibrational-rotational spectra. «Pure and Appl. Chem.», 1962, 4, № 1, 1—13 (англ.)

Определение моментов инерции молекулы с помощью колебательных и вращательных спектров позволяет выяснить строение молекулы. Однако, в случае сложных молекул инфракрасная и микроволновая спектроскопии не дают достаточного кол-ва данных. Для преодоления этой трудности используются образцы с различными изотопами. В этом методе требуется знать не абс. величину моментов инерции, а ее изменение при замене атома на его изотоп. Рассматриваются следующие вопросы строения молекул: природа возникновения потенц. барьеров внутреннего вращения, образование связей внутри молекулы, искажение плоскости плоских молекул, изомеры вращения и силы, отличные от сил связи. Особенно подробно рассмотрены молекулы NSF₃, O₂F₂ и CH₂NOH. Ю. Григорьев

РЖР 1962

10 В.47



ONF, ONCl, ONBr, NSF, NSF₃, OPF₃, 1967
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. 6ax 56eas
6ax 56eas

F-N-SF₂ (P, T_g, ΔH_v)

13

1969

Glemser O., Mews R., Roesky H.W.

Chem. Commun., 1969, N16, 914 (corr.)

F-N-fluorosulphur difluoride imide

F-N-SF₂.

XIII 240

PH X₁₃, 1970

2B11

59

NSF₃

1969

Lojko M. S.,
Beers I.

Sp. noem.

J. Res. Nat. Bur. Stand.
A73, N2, 233.



(Cu. H₂O) III

1969

NSF₃ ν_i

13 Б235. ИК-спектры, спектры комбинационного рассеяния, электронные спектры поглощения, кориолисовы константы взаимодействия, термодинамические функции и характер связей в NSF₃. Müller A., Ruoff A., Krebs B., Olemser O., Koch W. IR—Raman- und Elektronenabsorptions—Spektren, Coriolis—Kopplungskonstanten, thermodynamische Funktionen und Bindungsverhältnisse von NSF₃. «Spectrochim. acta», 1969, A 25, № 1, 199—205 (нем.; рез. англ.)

Сняты ИК-спектры (газ) и спектры КР (жидкость) NSF₃ и предложено отнесение частот основных колебаний: $\nu_1(A_1)$ 1524, $\nu_2(A_1)$ 775, $\nu_3(A_1)$ 520, $\nu_4(E)$ 811, $\nu_5(E)$ 429 и $\nu_6(E)$ 340 см⁻¹ (частоты ИК-спектра). Оценены значения главных моментов инерции, коэф. ζ для

x. 1969. 13


 (+1) (II)


колебаний ν_5 и ν_6 и силовых коэф. связей f_{NS} , f_{SF} и f_{SF}/f_F . Рассчитаны термодинамич. параметры C_p^0 , $(H^0 - H_0^0)/T$, $(G^0 - H_0^0)/T$ и S^0 для т-рого интервала, 200—2000° K в приближении идеального газа. Снят также электронный спектр поглощения NSF_3 в области 130—240 мμ. В рамках простой теории МО описаны и обсуждены типы связей в молекуле NSF_3 . Б. В. Рассадин

1969

NSF₃

M.K. Meier

T.P.

82637v Infrared, Raman, and electron absorption spectra, Coriolis coupling constants, thermodynamic functions, and bonding ratios of thiazyl trifluoride, NSF₃. Mueller, Achim; Ruoff, A.; Krebs, Bernt; Glemser, Oskar; Koch, W. (Univ. Goettingen, Goettingen, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1969, 25(1), 199-205 (Ger). The previously unknown Raman spectrum of NSF₃ is reported. An unambiguous assignment according to the irreducible representations is derived from the ir band contours. Furthermore, force consts. and thermodynamic functions are calcd. from the spectral data. The bond properties are discussed, by using simple M.O. considerations. Tentative assignments are given for the measured absorption bands. RCSQ


 (+1) II


C.A. 1969. 40. 18

XIII 2268

1972

NSC, NSF₃ (promoz. chem)

Cowan D.O., Gleiter R.,
Glemser O., Heilbronner E.
Helv. Chim. Acta, 1972, 55,
N 7, 2418-21

FNSF_2

XIII-2308

1972

+107270e Vibrational spectra of N-fluoro-S,S-difluorosulfilimine, N-chloro-S,S-difluorosulfilimine, and N-bromo-S,S-difluorosulfilimine. Kebabcioglu, R.; Mews, R.; Glemser, O. (Univ. Goettingen, Goettingen, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1972, 28(8), 1593-9 (Eng). The vibrational spectra of FNSF_2 , ClNSF_2 , and BrNSF_2 were studied. A tentative assignment was made and band shapes are discussed. G-matrix elements for XNSF_2 type mols. of the C_s point group are given. Force fields and thermodynamic data were calcd. for ClNSF_2 .

C.A. 1972. 77. N16

(+2) $\boxtimes$

FNSF_2

XIII-2308

1972

3 Б183. Колебательные спектры FNSF_2 , CINSF_2 и BrNSF_2 . Kebabcioglu R., Mews R., Glemser O. Vibrational spectra of FNSF_2 , CINSF_2 and BrNSF_2 . «Spectrochim. acta», 1972, A28, № 8, 1593—1599 (англ.)

(vi) Изучены колебательные спектры соединений типа XNSF_2 ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) при комн. т-ре. Проведено предв. отнесение частот для всех трех соединений, с использованием данных о контурах ИК-полос газа. Найдено, что вал. кол. $\text{N}=\text{S}$ и $\text{N}-\text{X}$ и симм. вал. кол. $\text{S}-\text{F}$ соответствуют полосы типа А с PQR-структурой, а деф. кол. и антисимм. вал. кол. $\text{S}-\text{F}$ — полосы типа В с PQ-QR-структурой. Приведены элементы G-матрицы для XNSF_2 типа молекул C_s и произведен расчет силового поля молекулы CINSF_2 . Для этой молекулы, кроме того, вычислены термодинамич. функции. Р. Г. Микаэлян

х. 1973 № 3

⊕ ⊗

FNSF_2

XIII - 2308

1972

V 1 Д340. Колебательные спектры FNSF_2 , CJNSF_2 и BrNSF_2 . Kebabcioglu R., Mews R., Gtem-ser O. Vibrational spectra of FNSF_2 , CJNSF_2 and BrNSF_2 . «Spectrochim. acta», 1972, A28, № 8, 1593—1599 (англ.)

спектр.

Получены ИК-спектры в газообразном состоянии и лазерные спектры жидких FNSF_2 , CJNSF_2 и BrNSF_2 при комнатной т-ре. Дано отнесение колебаний с учетом наблюдаемых контуров полос. Вычислены элементы G-матрицы для молекулы типа XNSF_2 , принадлежащей к точечной группе симметрии C_s . Для молекулы CJNSF_2 рассчитаны силовые и термодинамич. постоянные. Библ. 9.

Р. М. Ф. 1973. 1

(+2)

(+1)

Т. 99



NSF (ΔH_f° , D_0), NSF₂, NSF₃, XIII 236/1973

NCNSF₂, CF₃NSF₂, NCNSF₂, CF₃N(D_0)

Larsson J.W., Johnson G.K., O'Hare P.A.G.,
Hubbard W.N., Glemser O.

J. Chem. Thermodyn., 1973, 5, NS, 689-697
(exm.)

The enthalpy of formation of thiozyl mono-
fluoride (NSF). Bond dissociation enthalpies
of thiozyl tri- and monofluorides and related
nitrogen-sulfur-fluorine compounds. 11166x

PHILMUN, 1974

46608 CC

44111
Mr. R. P. ...

NSF₃

ammul 5792

1974

matheus
d.

Shimanecki T.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977; 6, 993-1102.

NSF_3

1978

Königer F., et al.
J. Mol. Struct. 1978,
46, 29-34

coll. no. 11.

coll. no.

coll. SPF_3 - III

NSF₃

оттиск 8434

1979

1 Б174. Анализ контура инфракрасной полосы и молекулярные постоянные SPF₃ и NSF₃. Köpner F., Blom C. E., Müller A. Infrared band contour analysis and molecular constants of SPF₃ and NSF₃. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 1, 76—84 (англ.)

Измерены ИК-спектры SPF₃ (I) и NSF₃ (II) в газ. фазе с разрешением 0,4—1,5 см⁻¹ при различных т-рах. Проведен расчет контуров полос вырожденных колебаний ν_4 , ν_5 и ν_6 (E), при к-ром учитывалась зависимость вращательных постоянных от колебательного состояния. Определены значения постоянных кориолисова взаимодействия, при к-рых достигается наилучшее согласие наблюдаемых и расчетных контуров полос. Полученные значения ξ , а также измеренные частоты колебаний, изотопные сдвиги $\Delta\nu_i$ (³²S/³⁴S) и, в случае I, постоянные центробежного искажения использованы для расчета силовых постоянных I и II. Получены след. постоянные для I: $f_r=5,95\pm0,32$, $f_{rr}=0,36\pm0,21$, $f_R=5,62\pm0,16$, $f_{rR}=0,22\pm0,12$ мдин/А. Для E-блока молекулы II получено два решения.. каждое из к-рых пол-

см. м.м.

В. м.м.

2.1980.14

NSF₃

17 Б268. Миллиметровый двойной резонанс; теория и применение к NSF₃: особый случай. Small C. E., Smith J. G., Whitfield D. H. Millimeter wave-radio frequency double resonance; theory and application to NSF₃, a special case. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 3, 681—688 (англ.)

Вращат.
спектр

М. П.

Х. 1979, № 17

Д.
ННУ

7949
Выпущен 7805

Для отнесения вращательного спектра NSF_3 в возбужденном колебательном состоянии $\nu_6=1$ использован метод миллиметрового-РЧ двойного резонанса. Теория двойного резонанса для четырехуровневой системы изложена по аналогии с теорией, используемой в ЯМР. Необычность данного случая двойного резонанса заключается в близости частотных интервалов двух РЧ-переходов в J - и $J+1$ -состояниях, что приводит к одновременному облучению двух РЧ-переходов с послед. фазовой и амплитудной интерференцией сигналов. В случае NSF_3 в вырожденном возбужденном колебательном состоянии $\nu_6=1$ осуществляются почти резонансные условия в $J''=12$ состоянии между парами уровней $|k=0, l=\pm 1\rangle$ и $|k=\pm 3, l=\pm 1\rangle$. Разделение резонансных уровней составляет ~ 50 Мгц. Из-за сильного смещения основных состояний наблюдаются четыре перехода с правилами отбора $\Delta k=3$, два из к-рых довольно сильные и попадают в РЧ-область спектра, а два очень слабых попадают в миллиметровую область спектра. Вычисленные на основе развитой теории контура сигналов двойного резонанса хорошо согласуются с эксперим. результатами. Данные по переходам $\Delta k=3$ дают информацию о вращательной постоянной A .

С. Н. Мурзин

NSF₃

~~011-1111-1111~~
011-1111-4805

1949

91: 165962g Millimeter wave-radio frequency double resonance; theory and application to nitrogen trifluorosulfide, a special case. Small, C. E.; Smith, J. G.; Whiffen, D. H. (Phys. Chem. Dep., Univ. Newcastle upon Tyne, Newcastle upon Tyne, Engl.). *Mol. Phys.* 1979, 37(3), 681-8 (Eng). The theory of radio frequency-mm wave double resonance for a 4 level system was presented and discussed with ref. to the $v_3 = 1$ excited vibrational state of the NSF₃ mol. The rotational assignment of the mol. was confirmed, and the radio frequency transitions, formally $\Delta K = 3$, give information on the A rotational const. The nuclear quadrupole hyperfine structure in the spectrum is K dependent.

M. M. Chirp

C.A. 1949 Q1 N20

Оттиски 4804

1979

NSF₃

18 Б247. Микроволновые спектры NSF₃ в колебательно возбужденных состояниях. Small C. E., Smith J. G. The microwave spectra of NSF₃ in vibrationally excited states. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 3, 665—679 (англ.)

Измерены в миллиметровой области вращательные спектры ¹⁴N³²SF₃ (I), ¹⁴N³⁴SF₃ (II) и ¹⁵N³²SF₃ (III) в основном колебательном состоянии и I в возбужденных колебательных состояниях $\nu_3=1$, $\nu_5=1$ и $\nu_6=1$. Анализ спектров выполнен с учетом центробежного искажения и кориолисова взаимодействия. Для I, II, и III соотв. вращательные постоянные равны (в Мгц) $B=4636, 2484$ (4), $4630, 3771$ (8) и $4520, 222$ (1) и постоянные центробежного искажения равны (в кгц) $D_J=1,0765$ (4), $1,081$ (2) и $1,002$ (2), $D_{JK}=2,120$ (3), $2,100$ (10) и $2,208$ (4).

М. В. Смирнов

И. П. Голосов

XIII-5505

Х. В. В. В. В.

и (в гц) $H_{JK}=9(3)$, $21(15)$ и 0 . Из измерений относит. интенсивностей линий установлено, что состояние $\nu_3=1$ лежит выше основного состояния на $516(40)$ см^{-1} , что согласуется с ИК-данными. Из анализа спектров в состояниях $\nu_5=1$ и $\nu_6=1$ определены постоянные корiolисова взаимодействия $\zeta_{55}^z=-0,2256(18)$ и $\zeta_{66}^z=0,1569(15)$. Уточнена r_0 -структура молекулы $r(\text{SN})=1,4157(8)$ А, $r(\text{SF})=1,5515(17)$ А, $\text{FSF } 93,92(8)^\circ$. Полученные результаты использованы для расчета гармонич. силового поля NSF_3 . Расчетные значения молек. постоянных хорошо согласуются с эксперим. величинами.

С. Н. Мурзин

NSF_3

Оттиски 7804

1979

9 Д522. Микроволновый спектр молекулы NSF_3 в возбужденных колебательных состояниях. Smith J. G. The microwave spectra of NSF_3 in vibrationally excited states. «Mol. Phys.», 1979, 37, № 3, 665—679 (англ.)

М. Г. Смирнов

В диапазоне мм-волн с использованием гармоник клистронов, генерирующих в области 26—40 Гц, исследованы микроволн. спектры трех изотопич. модификаций молекулы NSF_3 . Идентифицированы линии ряда вращательных переходов молекул N^{32}SF_3 , N^{34}SF_3 и $^{15}\text{N}^{32}\text{SF}_3$ в основном колебательном состоянии, молекулы N^{32}SF_3 в возбужденных состояниях с $\nu_3=1$, $\nu_5=1$ и $\nu_6=1$ и молекулы N^{34}SF_3 в состоянии с $\nu_6=1$. Определены значения вращательных и кватичных центробежных постоянных, а также ряда постоянных кориолисова взаимодействия (включая коэф. вращательной зависимости кориолисова взаимодействия), l-удвоения и l-резонанса. Полученные значения центробежных и ко-

XIII - 5505

Ф. 1979, № 9

риолисовых постоянных вместе с литературными данными по частотам колебаний использованы для расчета гармонич. силовых постоянных NSF_3 . Для структурных параметров NSF_3 получено: $SN=1,4157$, $SF=1,5515$ А, $FSF=93,92^\circ$. М. Р. Алиев

NSF_3

эммука 7804

1979

91:165769z The microwave spectra of nitrogen trifluoro-
sulfide in vibrationally excited states. Small, C. E.; Smith,
J. G. (Phys. Chem. Dep., Univ. Newcastle upon Tyne, Newcastle
upon Tyne, Engl.). *Mol. Phys.* 1979, 37(3), 665-79 (Eng).
The mm-wave rotational spectra of N^{32}SF_3 in the excited
vibrational states $\nu_5 = 1$ and $\nu_6 = 1$ were recorded and analyzed
to obtain values of the A_v rotational consts. and a redetd. mol.
structure. The coriolis consts. $\xi_{55}^Z = -0.2256$ and $\xi_{66}^Z = 0.1569$
were also obtained and combined with accurate centrifugal
distortion consts. of the ground state, some isotopic vibrational
results, and $\xi_{66}^Z = 0.1657$ for N^{34}SF_3 to give a good est. of the
most general valence force field.

справка
120 см.

А. В. Череп

XIII-5505

С. А. 1979, 21 N20

NSF_3

1980.

~~S~~ Glemser O, et al.

0530p

Angew. Chem., 1980,
92 (11), 904-21.



(cu. NSF; III)

NSF₃

Ommuck 16284

1982

u.n.

Natarajan A., Somasun-
daram S.,

Proc. Indian Acad. Sci.
(Chem. Sci.), 1982, 91,
N1, ● 39-45.

NF₃S

1984

Chopra J.R., Pandey A.N.

cer.
nocei.,

Indian J. Phys., 1984,
B58, N4-5, 376-383.

Di;

(cer. NF₃O; III)

NSF3

[acc. 18984]

1984

Fierz C., Ahlrichs K.,

расчёт
электрон.
структ.

Inorg. Chem., 1984,

23, N 1, 26-31.

NSF₃

1985

Ehrhardt Claus,
Abbruchs Reinhart.

теор.
распрем
интерм.
характер

Theor. Chim. Acta 1985,
68 (3), 231 - 45.

(see NSF; III)

NSF_3

[OM. 25+15]

1986

Ehrhardt C., Ahlrichs R.,

теорет.
расчет
ab initio,
стационар-
ное
изомеров

Chem. Phys., 1986,
108, N3, 429-439.

FNSF₂ OM 25115 1986

Ehrhardt Claus,
Ahlebachs Reinhart.

ser. n. Chem. Phys., 1986,
108, N3, 429-439.

(ser. NSCl₃; III)

F: NSF3

P: 3 131:278633

The sulphur 2p photoabsorption spectrum of NSF3. Jurgensen, Astrid; Kosugi,

Nobuhiro; Cavell, Ronald G. Department of Chemistry, University of Alberta Edmonton, AB T6G 2G2, Can.

Chem. Phys., 247(3), 445 452 (English) 1999 The high resolu. S 2p photoabsorption spectrum of gaseous NSF3, was measured using synchrotron radiation.

Assignment of the pre-edge spectra features was accomplished with the aid of ab initio GSCF3 CI calcns. Sim the isoelectronic OPF3 and other pyramidal P compds. there exist 2 states are best described as LS coupled because of a very large core-valence ele exchange. The post-edge features, corresponding to outer well p and d sh resonances, were assigned with the aid of X.alpha. calcns.

1999