

$N_{F3}; N_{F3}^+$

1937

WF₃

Bailey C.R. Hall J.B.,
Thompson J.W.

J. Ch. Ph. 5, 204

U.K. camp WF₃

NF₃

V. Schamacker, C.S. Lu

1950

11-813

JACS 72 (3) 1182-7

Записки групп. Исследования
в области NF₃

$$N-F = 1,37 \pm 0,02 \text{ \AA}$$

$$\angle FNR = 102,5 \pm 1,5^\circ$$

$$F-F = 2,14 \text{ \AA}$$

САЧЧ
5164:

III - 811

NF₃

M.B. creep

Sheridan J., Gordy W. 79, 513-15/1950
Phys. Rev.

N¹⁴F₃

N.F. = 1.371 Å

N¹⁵F₃

∠ = 102°9'

ω

~~III-1101-18-P~~

(O_2 , CO , OCS , N_2O , POF , CH_3F , CD_3F ,

I95I

NF_3 , PSF_3 , PF_3)

B9-5064-III

Jonnston C.M., Trambarulo R., Gordy W.
Phys.Rev.I95I,84, II78-80.

"Microwave spectroscopy in the region
from two to three millimeters".

C.A., I952, 2403a

Герб гр.к. 92

WF₃

W. Gordy

1952

u
sp.

Ann. N.Y. Acad. Sci. 55, 774-88

PF₃
POF₃
HCN
HCN

M. B. Currey PF₃, N₂F₄,
POF₃, HCN, HCN.

CA, 1953, 3115b.

814-III

1952

NT₃, PF₃ (γ_i , изоб. погр., термодинам. функции)

Wilson M. K., Polo S. R.

J. Chem. Phys., 1952, 20, 1716-19.

The infrared spectra of NT₃ and PF₃

ЕОТБ д. н. б.

с. а., 1953, 4739:

✓ ϕ

10

1955

NF₃ и
NH₃

R. S. Mulliken

УАСС. 77, 887

Углы связи в молекулах
типа NF₃ и NH₃ и их
производных

NF₃ < 102° 9'

NF₃

и.к.
Раман
спектр

Race E.W. (Пейс)

1955

Pierce L. (Пирс)

828

J. Chem. Ph. 23, 57, 1248-50

III и.к. и Раман спектр NF₃

и.к. спектр газодыр. NF₃ исслед.
в обл. 400 см⁻¹ - 3000 см⁻¹

Раман  спектр жидкого
NF₃ исслед. в обл. 400-2000 см⁻¹

из интр. кр. шледр =

$$\nu_1(A_1) = 1031 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_2(A_1) = 642 \text{ см}^{-1}$$

Совб. из раман

$$\nu_1(A_1) = 1050 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_2(A_1) = 667 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_3(E) = 907 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_4(E) = 497 \text{ см}^{-1}$$

шледра тидко кр

$$\nu_3(E) = 905 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_4(E) = 515 \text{ см}^{-1}$$

Различие с предыдущими данными
связано с неравномерной индифференциацией
гидро и обертонков.

Некоторые данные более правдоподобны

NF₃

1955

Маботинский А. Е.

Успехи химии 1955, 24, 430

Радиоспектроскопия и строение
молекул (обзор около 130 ссылок,
интересные данные для
углов связи и межатомных
расстояний).

(см. CO, II)

Reese R.M., Dibelor V.H.,

1956

J. Chem. Phys., 1956, 24, 1175 - ~~44~~

Устойчивость и гидратация

NF_3 в жидком азоте.

NF_3

11/34

NF_3

III

WF₂

S. Barkerman

(1957

Dissert. Abst. 17, 1906.

колебательная синхронизация: У.К.
полосы и параметры колебаний

WF₃

has р.к. Edgell'a

и чис. группа $\frac{V_2}{\text{дип. маневр}}$

~~колеб. част. вес.~~ колеб. част. вес.

CA 52

858 a

NF_3

1953

Schatz P. K.,

J. Chem. Phys., 1958, 29, 481. — 83

Романовская Е. и др. NF_3 .

На основании:

- 1) Данные по центробежным расщеплениям
- 2) Данные по ас. излучениям
- 3) Сравнение с известными данными CF_3H
- 4) Калибровка спектра

результатов, $F_{12} = 0,75$ и $F_{34} = 0,65$ и

$f_{\alpha} = 1,92$ $f_{\alpha\alpha'} = 0,31$; $f_{\alpha 2} = 0,47$

$f_{\alpha 2'} = -0,18$ $f_2 = 4,36$ $f_{22} = 0,67$

8-12

F_{11}	F_{12}	F_{22}	F_{33}	F_{34}	F_{44}	$F_{11}, F_{33}, \text{ и др. } \Delta$
2,5349	0,75	5,7047	4,6593	0,5	3,4653	$F_{12}, F_{34} \text{ и др.}$
2,3134	0,9	5,3579	1,6080	0,65	3,6831	$F_{22}, F_{44} \text{ и др. } \Delta$
2,2371	1,	6,6598	1,5901	0,75	3,8126	
2,1307	1,25	7,2564	1,5818	0,9	3,9890	

$$F_{11} = f_{\alpha} + 2f_{\alpha\alpha'} \quad F_{12} = 2f_{\alpha\beta} + f_{\alpha\beta'} \quad F_{22} = f_{\beta} + 2f_{\beta\beta'}$$

$$F_{33} = f_{\alpha} - f_{\alpha\alpha'} \quad F_{34} = f_{\alpha\beta} - f_{\alpha\beta'} \quad F_{44} = f_{\beta} - f_{\beta\beta'}$$

Напряжения в ДПК с.с. паку $-(21 \div 23) \text{ кг/см}^2$,
 а ДК 9,7 кг/см²

NT₃

Schatz P. R., Levin ~~G. W.~~ G. W. 1958

J. Chem. Phys., 1958, 29, 475.

Асс. молекулярных и атомарных
радиационных колебаний NT₃.

100-200

III

$\nu_1 (A_1)$	1032 cm^{-1}	Спектрометр
$\nu_2 (A_1)$	642 "	Непрям. дис-
$\nu_3 (E)$	906 "	непр. изм. 21.
$\nu_4 (E)$	492 "	красная Nall и CsBr.

III - 1036

NO_2 , O_3 , SO_2 , F_2O , NH_3 ,
 NF_3 , H_2O , H_2S , H_2Se , ClO_2

(СИЛОВЫЕ)
ПОСТОЯННЫЕ

1959

Van de Vorst A.

Bull. cl. sci. Acad. roy. Belg., 1959, 45, n 10
966-973.

О применимости поля центральных сил к
молекулярным колебаниям.

РЖХ, 1960, № 21,
83697.

Не нужно

10

~~02~~
~~11~~
~~12~~

10

1960

NF₃

Cowan M., Gordy W.,

Bull. Am. Phys. Soc. 1960, 5, 241 (24)

Измерено в инфракрасном

спектре спектров, пары

поглощения изотопов пара-

метри BrCN и NF_3 .Для Br^{81}CN $B = 5096,808 \text{ Mc/sec}$; $D = 3,716 \cdot 10^{-4} \text{ Mc/sec}$; $K = -7 \cdot 10^{-4} \text{ Mc/sec}$.Для NF_3 $B_0 = 10680,65 \text{ Mc/sec}$; $D_1 = 0,0295 \text{ Mc/sec}$ $D_{JK} = -0,022 \text{ Mc/sec}$

20702

1960

NF₃

ЗБ144. Теория интенсивностей инфракрасных спектров молекул. VI. BF₃, NF₃, SiF₄ и SF₆. Свердлов Л. М. «Оптика и спектроскопия», 1960, 8, № 2, 183—190.—В первом приближении валентно-оптич. схемы произведен расчет электрооптич. параметров молекул BF₃, NF₃, SiF₄ и SF₆ на основе использования абс. интегральных интенсивностей ИК-полос указанных молекул. Установлено закономерное возрастание дипольного момента связи X—F при увеличении разности электроотрицательностей атомов X и F. Предыдущее сообщение см. РЖХим, 1960, № 21, 83708.

Резюме автора

x.1961.3



NF₃

Sobhanadri Y.

1960

Proc. Natl. Inst. Sci. India
Pt. A 26, 110

Дипольные моменты
и ионный характер
для PCl₃, PF₃ и NF₃.

(См. PCl₃) III

803-III

1961

NF_2 , NF_3 , N_2F_2

(I, *Энергия связей N-F*)

N_2F_4 (D)

Herron John T., Dibeler Vernon H.
J. Res. Nat. Bur. Standards, 1961,

A65 N 5, 405-409 (*англ*)

Mass spectrometric study of
 NF_2 , NH_3 , N_2F_2 and N_2F_4 .

PX., 12528, 1962

10 м

ЕСТЬ Ф. Н. Г.

804-III

NF_2 (J. ΔH_f)

1961

N_2F_4 NF_3 (A.P. UOHG NF_2^+)

Kennedy A.L., Colburn C.B.

J. Chem. Phys., 1961, 35, N 5,

1892-1893 (*assul*)

Strength of the N-F bonds in
 NF_3 and N-F and N-N bond in N_2F_4 .

PX., 1962, 16 30

E O T L O. N.

to M

90

WF₃
Смеш

111-807

1961

№ B185. Спектр поглощения в вакуумной ультрафиолетовой области и дипольный момент фтористого азота. La Paglia S. R., Duncan A. B. F. Vacuum ultraviolet absorption spectrum and dipole moment of nitrogen trifluoride. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 3, 1003—1007 (англ.)

Впервые исследованы электронные спектры поглощения NF₃. В области 1200—1800 Å интенсивность поглощения монотонно убывает до ничтожных значений при 1800 Å без заметных следов структуры, соответствующей различным электронным переходам. В области длин волн короче 960 Å при давлениях NF₃ ниже 0,008 мм рт. ст. качественно обнаружено сильное поглощение. Граница поглощения 960 Å соответствует нижнему потенциалу ионизации (согласно данным электронной бомбардировки 939 Å). Обсуждаются различия спектров NF₃ и NH₃. Данные о дипольном моменте и потенциале ионизации NF₃ использованы для построения волн. ф-ций NF₃ методом ЛКАО. Ю. Мазуренко

Всп-5318-III

ф.1962.1B

WF₃
спектр

III - 804

11961

—17B29. Спектр поглощения в вакуумной ультрафиолетовой области и дипольный момент трехфтористого азота. La Paglia S. R., Duncan A. B. F. Vacuum ultraviolet absorption spectrum and dipole moment of nitrogen trifluoride. «J. Chem. Phys.», 1961, 34, № 3, 1003—1007 (англ.).—Впервые исследованы электронные спектры поглощения NF₃. В области 1200—1800 Å интенсивность поглощения монотонно убывает до ничтожных значений при 1800 Å без заметных следов структуры. В области длин волн короче 960 Å при давл. < 0,008 мм рт. ст. качественно обнаружено сильное поглощение. Граница поглощения соответствует нижнему потенциалу ионизации (согласно данным электронной бомбардировки 939 Å). Обсуждаются различия спектров NF₃ и NH₃. Данные о дипольном моменте и потенциале ионизации NF₃ использованы для построения волновых функций NF₃ методом ЛКАО.

ВФ-5318-III

ж. 1962. 17

WF₃

y.g.

BΦ-5318-III

1961

Vacuum ultraviolet absorption spectrum and dipole moment of nitrogen trifluoride. S. E. La Paglia and A. B. F. Duncan (Univ. of Rochester, Rochester, N. Y.). *J. Chem. Phys.* 34, 1003-7(1961).—At the lowest pressures, the long-wavelength limit of absorption is at approx. 960 Å., in agreement with the lowest ionization potential of the mol. (939 Å.) Quant. intensity measurements showed a smooth decrease of the absorption coeffs. to zero at about 1800 Å., with no indication of even partly resolved electronic transitions. Comparisons were made with the electronic spectrum of NH₃. The mol. dipole moment was used to obtain an equiv. orbital representation of the NF₃ wave function.

Henry Leidheiser, Jr.

-808-
III

C.A. 1961. 55. 26

26653 d

I962

NF₃

Kaufman J.J.

J.Chem.Phys., 37, 759

(ca NF₂)

Some theoretical aspects of bonding
in N-F compounds.

(ca. NF₂, III)

1963

Bp-5086-III

NF₃рәман
сүсүп.

Raman spectrum of gaseous NF₃. Yu. I. Kotov and V. M. Tatevskii. *Optika i Spektroskopiya, Akad. Nauk SSSR, Old. Fiz.-Mat. Nauk, Sb. Statei* 2, 305-6(1963). The results obtained confirm infrared data reported previously (Wilson and Polo, CA 47, 4739i; Pace and Pierce, CA 49, 13781d). A. Libackyj

III - 2344 - BP

III - 2934

C.A. 1963. 59. 13
14738g

ВФ - 5086 - III

1963

NF₃

23.44 - 199

III

29934

III

11 Б126. Колебательный спектр комбинационного рассеяния газообразного NF₃. Котов Ю. И., Татевский В. М. В сб. «Оптика и спектроскопия». Т. 2. М.—Л., АН СССР, 1963, 305—306

Исследован спектр комб. расс. газообразного NF₃ при давлении 2,5 атм. В качестве источника возбуждения использованы 4 ртутные лампы низкого давления мощностью по 2 квт. В спектре NF₃ зарегистрированы две широкие полосы 495 и 911 см⁻¹, что подтверждает правильность их отнесения к вырожденным (неполносимметричным) колебаниям молекулы NF₃, и две резкие полосы 1033 и 646 см⁻¹, относящиеся к полносимметричным колебаниям молекулы. Полученные данные хорошо согласуются с данными по ИК-спектру поглощения NF₃. Э. Тетерин

X. 1964. II

ВФ - 508 - III

1963

11 Д292. Колебательный спектр комбинационного
рассеяния газообразного NF_3 . Котов Ю. И., Татев-
ский В. М. В сб. «Оптика и спектроскопия». Т. 2. М.—
Л., АН СССР, 1963, 305—306

Приведены результаты исследования спектра комб. рас.
газообразного NF_3 с помощью многоходовой кюветы при
давл. 2,5 атм. Наблюдены две широкие полосы 495 и
911 см^{-1} , отнесенные к неполносим. колебаниям. Две
другие полосы (1033 и 646 см^{-1}) отнесены к полносим.
колебаниям. Полученные значения частот хорошо согла-
суются со значениями, найденными из ИК-спектров по-
глощения.

III - 2344 - 89

III - 2934

Ф. 1963. ИД 292

ВР 2687 - III
ВР 5104 - III
NF₂ } (We, символы пост.)
NF₃ }

1963

Котов Ю. И., Матвеевич И. М.

Вестн. Моск. ун-та, Химия, 1963, №2, 3-5

Расчет символов построения для молекул NF₂ и NF₃.

ЕСТЬ ОРИГИН.

Рис. Хим., 1963, 20675

Ю

П 2454

✓
 N_2F_4 (we, СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ) 1963

N_2H_4 , HF_2) (СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ)

HF_3 , C_2F_6)
ОТОВ Л.М., Татевский Л.М.
ОСТН. ОСК. УН-ТА "УИИИТ", 1963.

В 1, 10-12

Расчет колебательного спектра
молекулы тетрафторэтилена N_2F_4 .

РФ., 1963, 8050



Есть оригинал.

NF₃

nonconjugated

1964

Absorption spectra of matrix-isolated nitrogen trifluoride from 18 to 50 Gc. R. L. Armstrong, J. B. Newman, and J. J. Whalen (Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). AD 608739. Avail. CFSTI, 33 pp.(1964)(Eng). An exptl. study has been made of the absorption spectrum of NF₃ mols. trapped in an Ar matrix in the microwave region, 18-50 Gc. A discussion of the properties of such crystals is given, followed by a description of the exptl. app. and technique. No microwave absorption in excess of 1 db. was observed, 1 db. being the smallest signal which could be detected by the microwave spectrometer used in this expt. A discussion of this result is given together with recommendations for future expts. From *U.S. Govt. Res. Develop. Rept.* 40(2), 81(1965). TCVL

C.A. 1965. 63.4
37954

NF₂Cl

1964

ИК-спектр

№ 12 Д187. Инфракрасный спектр и расчет колебательного спектра молекулы хлордифторамина (NF₂Cl). Москвитина Е. Н., Кузяков Ю. Я. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1964, № 2, 23—25

Исследован ИК-спектр поглощения NF₂Cl (I) в области 400—3000 см⁻¹ в газообразном и твердом состоянии. Произведен расчет колебательного спектра I с силовыми постоянными, полученными для аналогичных молекул. На основании расчета, а также анализа литературных данных предложено следующее отнесение для основных частот I (в см⁻¹): A' 932 (NF), 698 (NCl), 556; A'' 854 (NF), 378. Рассчитанное значение частоты 4-го колебания класса A' равно 235 см⁻¹. В. Алексанян

ф. 1964-128

NF₂Cl

1964

И. К. Алексеев

23 Б129. Инфракрасный спектр и расчет колебательного спектра молекулы хлордифторамина (NF₂Cl). Москвитина Е. Н., Кузьяков Ю. Я. «Вестн. Моск. ун-та, химия», 1964, № 2, 23—25

Исследован ИК-спектр поглощения NF₂Cl (I) в области 400—3000 см⁻¹ в газообразном и твердом состоянии. Произведен расчет колебательного спектра I с силовыми постоянными, взятыми из аналогичных молекул. На основании расчета, а также анализа литературных данных предложено следующее отнесение для основных частот I (в см⁻¹): A' 932 (NF), 698 (NCl), 556; A'' 854 (NF), 378. Рассчитанное значение частоты ν_4 класса A' равно 235 см⁻¹. В. Алексанян

Р. 1964. N 23

NF₃

В 90 - 3703 - 111

1964

Термод.
ф-ции,
Ср. ампл.
колеб.

12 Б140. Средние амплитуды колебания. Термодинамические функции некоторых тригалогидопроизводных элементов V группы. Nagara jan G. Mean amplitudes of vibration and thermodynamic functions in some group 5 trihalides. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1964, 2, № 8, 237—241 (англ.)

Методом Цивина авторы вычислили при 0 и 298° К средние амплитуды колебания для молекул NF₃, PF₃, PBr₃, PJ₃, AsBr₃, AsJ₃, относящихся к точечной группе симметрии C_{3v}. При комнатной т-ре средние амплитуды колебания расстояний как между связанными, так и между несвязанными атомами возрастают при переходе от низших членов ряда галогенов к высшим (F→J) для случая P и As. Для ряда т-р в интервале 50—2000° К для всех исследованных молекул вычислены статистич. термодинамич. функции (энтальпия, свободная энергия, энтропия, теплоемкость) и моменты инерции.

Н. Чумаевский

ж. 1965. 12



1964

Bop-3703-III

Mean amplitudes of vibration and thermodynamic functions of some Group V trihalides. G. Nagarajan (Oklahoma State Univ., Stillwater). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 2(8), 237-41 (1964). The mean amplitudes of vibration for NF_3 , PF_3 , PBr_3 , PI_3 , AsBr_3 , and AsI_3 were calcd. from 0 to 298°K . At ambient temp., the mean amplitudes of vibrations for the bonded as well as nonbonded distances increase from lower to higher members of the halogen series of P and As. The molar thermodynamic functions were calcd. in the temp. range from 50 to 2000°K , assuming a rigid rotator-harmonic oscillator model.

Wesley W. Wendlandt

T. sp.

bms

C.A. 1965. 62.2

1204 e



NF_3

м.п.

1990-4330-III

1985

Kaufman J. J., Burnelle L.,
Hamann J. R.

JAA Bull., 2, N 3, 109.

Возможность предска-
ния свойств асим-
метрии с помощью кван-
тово-химич. расчетов.
(см. N_2F_2)

NF_2 , NF_3 , N_2F_2 ($\tau_{\text{N-F}}$, $\tau_{\text{N-N}}$, J, γ_i , D_0) 1965
3 XIII 1640

Kaulman H. H. Burnelle L. A. Hamann J. R.

Advan. Chem. Ser. 1965, 54, 2-22

The feasibility of predicting properties
of NF_2 radicals by quantum
chemical calculations

W. Φ CONFIDENTIAL

1965

FNF_2 , HNF_2 , CH_3NF_2 , CF_3NF_2 , ClNF_2 ,
 NF_2NF_2 (Vс. р. 3. 7. 11. 12-13)

Ward G.A., Craig A.D., Wright C.M.,
Chien J.C.W.

Am. Chem. Soc., Div. Fuel. Chem. Preprints,
1965, 9(1), 172-82
The chemistry of difluoramines

CA., 1966, 65, N12,
18147f

J, Be

NF₃

Abramowitz S.,
Levin J. W.

1966

J. Molec. Spectrosc., 19, n 4, 461.

Методы определения ко-
нформационного ζ -постоянного.

(см. BF₃^{III})

NF₃

XIII - 1697

1966

силовые
посл.

3 Д134. Модель неподеленной пары и колебательные силовые постоянные NF₃. Curtis E. C., Muirhead J. S. The lone-pair model and the vibrational force constants of NF₃. «J. Phys. Chem.», 1966, 70, № 10, 3330—3336 (англ.)

Составлена видоизмененная потенц. ф-ция Юри — Брэдли молекулы NF₃, содержащая силовые постоянные взаимодействия атомов азота и фтора с неподеленной парой электронов азота. После преобразования матриц кинематич. коэф. и силовых постоянных получены ф-лы, выражающие эффективные силовые постоянные через обычные силовые постоянные Юри — Брэдли и постоянные отталкивания неподеленной пары. Эти постоянные

н. 1967. 32

вычислены в одноэлектронном приближении для атомов Н, С, N, О, F, при учете эффектов поляризации и экранирования. Эффективные постоянные определены по опытным значениям частот колебаний и затем при различных наборах значений обычных постоянных Юри — Брэдли определяются постоянные отталкивания, которые сравниваются с вычисленными. Из такого сравнения сделаны выводы о распределении электронного заряда в молекуле.

М. Ковнер

NF₃

XIII - 169.7

1966

7 Б134. Модель неподеленной пары и колебательные силовые постоянные NF₃. Curtis E. C., Muirhead J. S. The lone-pair model and the vibrational force constants of NF₃. «J. Phys. Chem.», 1966, 70, № 10, 3330—3336 (англ.)

Составлена видоизмененная потенциальная функция Юри-Бредли молекулы NF₃, содержащая силовые постоянные взаимодействия атомов N и F с неподеленной парой электронов азота. После преобразования матриц кинематич. коэф. и силовых постоянных получены ф-лы, выражающие эффективные силовые постоянные через обычные силовые постоянные Юри-Бредли и постоянные отталкивания неподеленной пары. Эти постоянные вы

x. 1967. 7

числены в одноэлектронном приближении для атомов Н, С, N, O, F при учете эффектов поляризации и экранирования. Эффективные постоянные определены по опытным значениям частот колебаний и затем при различных наборах значений обычных постоянных Юри-Бредли определяются постоянные отталкивания, к-рые сравниваются с вычисленными. Из такого сравнения сделаны выводы о распределении электронного заряда в молекуле.

М. Ковнер

NF₃

XIII - 1697

1966

The lone-pair model and the vibrational force constants of NF₃. E. C. Curtis and J. S. Muirhead (Rocketdyne Div. of N. American Aviation, Inc., Canoga Park, Calif.). *J. Phys. Chem.* 70(10), 3330-6(1966)(Eng). The repulsion between an atom and a lone pair of electrons, such as may exist on N atoms, is examd. in some detail. The repulsion force consts. are estd. using the 1-electron theory. A new derivation is shown for the method of introducing forces by the lone pair and subtracting lone-pair motions from the vibrational secular equation. The vibrational force consts. for NF₃ are examd. with this model in mind. This model suffices to account for the force consts. of NF₃, while all other models failed to account for the principle non-Urey-Bradley interaction const. Implications of this model using the 1-electron theory argue for fluorines much less neg. charged than previous estimates. RCKG

C.A. 1966. 68. 12
14695 d

NF₃

1966

11 Б152. Интервал между *P*- и *R*-ветвями и постоянные кориолисова взаимодействия для молекул типа симметричного волчка: силовые коэффициенты NF₃, PF₃ и AsF₃. Hoskins L. C. *P—R separations and Coriolis constants for symmetric-top molecules: force constants for NF₃, PF₃, and AsF₃*. «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 12, 4594—4600 (англ.)

Предложена программа для расчета интервала между *P*- и *R*-ветвями неразрешенного контура колебательно-вращательных полос вырожденных колебаний молекул типа симметричного волчка с учетом кориолисова взаимодействия между компонентами вырожденного колебания. Рассмотрено влияние конечной ширины *Q*-ветви на ве-

XIII - 1695

2. 1967. 11

IX

личину $P-R$ -интервала при различных значениях ζ -постоянной и параметра $\beta = (I_B/I_A) - 1$ (I_A, I_B — моменты инерции). Выведена приближенная ф-ла, связывающая $\Delta\nu_{P-R}$ с I_A, I_B и ζ_i . Найдены значения постоянной ζ_4 из опытных значений $\Delta\nu_{P-R}$ полосы ν_4 молекул $\text{NF}_3, \text{PF}_3, \text{AsF}_3$ и NH_3 . Заметное расхождение между вычисленными и опытными значениями ζ_4 для NH_3 обусловлено неприменимостью данного метода к легким молекулам. Найденные здесь значения ζ_4 вместе с частотами вырожденных колебаний использованы для расчета силовых коэф. класса E молекул NF_3, PF_3 и AsF_3 . М. А.

NF_3

5 Д120. Интервал между P - и R -ветвями и постоянные кориолисового взаимодействия для молекул типа симметричного волчка: силовые коэффициенты для молекул NF_3 , PF_3 и AsF_3 . Hoskins L. C. P - R separations and Coriolis constants for symmetric-top molecules: force constants for NF_3 , PF_3 , and AsF_3 . «J. Chem. Phys.», 1966, 45, № 12, 4594—4600 (англ.)

силовые
коэффициенты

Предложена программа для расчета интервала между P - и R -ветвями неразрешенного контура колебательно-вращательных полос вырожденных колебаний молекул типа симметричного волчка с учетом кориолисового взаимодействия между компонентами вырожденного колебания. Рассмотрено влияние конечной ширины Q -ветви на величину P - R -интервала при различных значениях ζ -постоянной и параметра $\beta = (I_B/I_A) - 1$ (I_A , I_B — моменты инерции). Выведена приближенная ф-ла, связывающая $\Delta\nu_{P-R}$ с I_A , I_B и ζ_i . Найдены значения постоянной ζ_4 из опытных значений $\Delta\nu_{P-R}$ полосы ν_4 молекул NF_3 , PF_3 , AsF_3 и NH_3 . Заметное расхождение между вы-

1966

5191-1695
XIII

+2

ф. 1967.52

17

численными и опытными значениями ζ_4 для NH_3 обусловлено неприменимостью данного метода к легким молекулам. Найденные здесь значения ζ_4 вместе с частотами вырожденных колебаний использованы для расчета силовых коэф. класса E молекул NF_3 , PF_3 и AsF_3 .

М. Алиев

Мат. нот. } LiF_4 , GeF_4 , NF_3 , PF_3
См. нот } AsF_3 XIII 1640 1966

Levin I, Abramowitz S,
J. Chem. Phys., 1966, 44,
N 7, 2562-64

10 64 PX 1964
2276

M 1815

1966

м.н.н., 7с (парам)
(BH_3 , CH_3 , OH_3^+ , NH_3 , OH_3 ,
 CO_3^- , BF_3 , NO_3^- , CF_3 , NF_3 , BeH_2 , OH_2 , FH_2 ,
 CO_2 , OF_2 и др.)

Pople J.A., Segal G.A.

J.Chem.Phys., 1966, 44, N 9, 3289-3296
Approximate self-consistent molecular
orbital theory.III. CNDO results for
 AB_2 and AB_3 systems

Px., 1967, 8537

J

10

NF_3

1967
Керрел G. W., et al.

J. Amer. Chem. Soc., 89,
n 14, 3396.

Барьеры инверсии пирамидальных молекул типа XH_3 и родственных плоских молекул, содержащих группу XH .

(см. CH_3^-)

V_i ($\underline{YX_3}$, $Y = \text{Li, P, As, Pb, Sb, Bi}$ 1964
 $X = \text{H, F, Cl, CH}_3, \text{C} \equiv \text{CH}$)

Smit W.M.A., Maas J.H. Van der
Spectrochim. Acta, 1964, A23,
N8, 2453-55 XIV 936

ссылка

px 1968

40

NF₃

XIII - 1700

1967

) 11 Б220. Микроволновый спектр и постоянные центробежного растяжения молекулы NF₃. Mirri A. M., Cazzoli G. Millimeter wave spectrum and centrifugal distortion constants of NF₃. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 3 1197—1198 (англ.)

Исследован МВ-спектр молекулы NF₃ в миллиметровом диапазоне. Идентифицированы линии переходов 4→5, 9→10, 11→12 и 12→13. Из частот переходов методом наименьших квадратов найдены значения вращательной постоянной B ($10681,078 \pm 0,0052$ МГц) и постоянных центробежного растяжения D_1 ($0,014534 \pm 0,000068$) и D_{1K} ($-0,022694 \pm 0,000096$ МГц).
М. Р. Алиев

вращат.
пост.

X. 1968. 11

NF₃

XIII-1700

1967

D4 Д350. Спектр в миллиметровой области и константы центробежной дисторсии NF₃. Miggi A. M., Cazzoli G. Millimeter wave spectrum and centrifugal distortion constants of NF₃. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 3, 1197—1198 (англ.)

Исследован спектр NF₃ в области $(1-3) \cdot 10^5$ Мгц. Приведены наблюдаемые и рассчитанные значения частот для следующих переходов. $J \rightarrow J+1$: $4 \rightarrow 5$, $9 \rightarrow 10$, $11 \rightarrow 12$, $12 \rightarrow 13$. Получены следующие значения констант, центробежного растяжения (в Мгц): $D_J = 0,014533$; $D_{JK} = -0,02269$ и значение вращательной постоянной $B = 10681,078$ Мгц. Э. В. Б.

09.1988.4

NF₃

XIII - 1700

1967

112614t Millimeter wave spectrum and centrifugal distortion constants of NF₃. A. M. Mirri and G. Cazzoli (Univ. Bologna, Italy). *J. Chem. Phys.* 47(3), 1197-8(1967)(Eng). The millimeter wave spectrum of NF₃ was recorded at dry-ice temp. From the obtained data, the frequencies of the rotational transitions, from $J = 4 \rightarrow 5$ to $J = 11 \rightarrow 12$, and the centrifugal distortion and rotational consts. were calcd. BGIN

M. P.

C. A. 1967. 17. 24

XIII-1403

1964

NF₃

5 Д127. Общее силовое поле NF_3 , PF_3 , AsF_3 с комбинированным использованием колебательных частот, центробежного растяжения и постоянных взаимодействия Кориолиса. Mirri Anna M. General force field of NF_3 , PF_3 , and AsF_3 by the combined use of vibrational frequencies, centrifugal stretching, and coriolis coupling constants. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 8, 2823—2828 (англ.)

сис. пост.;
структура

Составлена таблица опытных значений частот колебаний постоянных Кориолиса ζ_4 и постоянных центробежного растяжения D_J и D_{JK} в молекулах NF_3 , PF_3 , AsF_3 . На основании расчетов построены графики следующих зависимостей: силовой постоянной F_{12} в NF_3 от ангармоничностей колебаний ν_1 и ν_2 , постоянной ζ_5

9. 1968. 52

A

в PF_3 от ангармоничности ν_4 , той же постоянной в PF_3 и AsF_3 от валентного угла, постоянных D_J , D_{JK} от силовых постоянных F_{12} , F_{34} во всех 3 молекулах. Сопоставление этих графиков с опытными данными позволило вычислить все силовые постоянные в координатах симметрии и установить, что валентный угол в молекулах PF_3 и AsF_3 равен 98° , а длины связей равны 1,562 и 1,708 Å. При этих значениях геометрич. параметров получается согласие между вычисленными и опытными значениями ζ_4 , D_J , D_{JK} даже при использовании в расчете частот, не исправленных на ангармоничность. Отмечается большая чувствительность силовых постоянных к значениям D_J , D_{JK} .

М. Ковнер

NF₃

XIII - 1703

1967

6425t General force field of NF₃, PF₃, and AsF₃ by the combined use of vibrational frequencies, centrifugal stretching, and Coriolis coupling constants. Anna M. Mirri (Univ. Bologna, Italy). *J. Chem. Phys.* 47(8), 2823-8(1967)(Eng). Possible sources of the discrepancies between zeta parameters and centrifugal distortion consts. found in the attempt to det. the general force field of NF₃, PF₃, and AsF₃ have been analyzed. Large anharmonicities on the ν_2 bending modes cannot be responsible for the results obtained by other authors; the discrepancies become smaller only by assuming that the ν_4 bending modes are considerably anharmonic. On the other hand, for smaller values of the bond angle in the case of PF₃ and AsF₃ it is possible to obtain consistency between ir and microwave data. For a bond angle of 98° for PF₃, in agreement with recent results of

M. P.

+ 2

C. A. 1968. 68. 2

electron diffraction measurements, it is possible to det. a force field which gives zeta parameters and centrifugal distortion consts. within their exptl. accuracy even by using anharmonic vibrational frequencies. Consistency between ir and microwave data for AsF_3 is obtained for $\angle \text{FAsF} = 99^\circ \pm 1^\circ$. In the case of NF_3 the structure is very accurately known and a force field consistent with all the exptl. data has been detd. even by using anharmonic vibrational frequencies.

RCJQ

Ока Т.

1967

J. Chem. Phys., 1967, 47, 5410

Эшлов

17

NF_3 (203)

М. Г.

XIII-1784

1987

NF₃

8 Б230. Инфракрасный спектр и молекулярные постоянные трифторида азота. Popplewell R. J. L., Masci F. N., Thompson H. W. Infra-red spectrum and molecular constants of nitrogen trifluoride. «Spectrochim. acta», 1967, A23, № 11, 2797—2807 (англ.)

ИК-спектр,
м. и.;

Исследован ИК-спектр высокого разрешения газообразн. NF₃ в интервале 400—3500 см⁻¹. Выполнен анализ вращательной структуры ряда основных полос, обертонов и составных тонов. Найдены следующие значения постоянных колебательно-вращательного взаимодействия ζ_i , α_i^A и α_i^B (в см⁻¹): $\zeta_3 = 0,81$, $\zeta_4 = -0,90$, $\alpha_1^B = -0,0014$, $\alpha_2^B = 0,0011$, $\alpha_2^A = 0,0006$, $\alpha_3^A = 0,0006$, $\alpha_3^B = 0,0025$, $\alpha_4^A = 0,00045$, $\alpha_4^B = 0,00055$. М. Р. Алиев

X. 1988. 8

XIII - 1484

1917

64075q Infrared spectrum and molecular constants of nitrogen trifluoride. R. J. L. Popplewell, F. N. Masri, and H. W. Thompson (Phys. Chem. Lab., Oxford, Engl.). *Spectrochim. Acta, Part A* 23(11), 2797-2807(1967)(Eng). The ir spectrum of NF_3 was measured over the range $400\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$, and the rotational fine structure of a no. of bands was resolved. The nature of this rotational structure is of special interest since few such studies have been made with oblate sym. tops. From the parallel type bands, est. were made of the coeffs. α^B relating different vibrational states, and a detailed study of the perpendicular type bands assocd. with ν_3 and ν_4 has made it possible to derive the Coriolis coeffs. $\zeta_3 = +0.81$ and $\zeta_4 = -0.90$ and other coeffs. α^A . The new values of ζ_3 and ζ_4 seem more satisfactory than earlier est. based upon studies of unresolved band contours. A no. of other bands due to overtones, combinations, and difference transitions were recorded and assigned. RCSQ

C.A. 1968. 68. 14

NF₃

1891-1892
XIII

1967
4 Д283. Спектры комбинационного рассеяния азотфтористых соединений. II. Спектр комбинационного рассеяния газообразного трехфтористого азота. Shamir J., Human H. H. Raman spectra of N—F compounds-II. Raman spectrum of gaseous nitrogen trifluoride. «Spectrochim. acta», 1967, A 23, № 6, 1899—1901 (англ.)

Изучен спектр комб. рас. газообразного NF₃ при давлении 8 атм. Обнаружено 4 основных колебания: 500 см⁻¹ (E), 649 см⁻¹ (A₁), 910 см⁻¹ (E) и 1035 см⁻¹ (A₁). Из значений поляризации и формы линий выполнено отнесение полос к полносимметричным валентному (1035 см⁻¹) и деформационному (649 см⁻¹) и неполносимметричным валентному (910 см⁻¹) и деформационному (500 см⁻¹) колебаниям. Библ. 5. Ч. I см. РЖФиз, 1967, 11Д352. С. Ф. Б.

09.1968.4

NF₃

XIII - 1824

1967

KP-check

v.
i

69213x Raman spectra of N-F compounds. II. Raman spectrum of gaseous nitrogen trifluoride. J. Shamir and H. H. Hyman (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *Spectrochim. Acta, Part A* 23(6), 1899-901(1967)(Eng). cf. CA 67: 38047s. The Raman spectrum of gaseous NF₃ has been studied. All 4 fundamentals have been observed at 500 cm.⁻¹ (E), 649 cm.⁻¹ (A₁), 910 cm.⁻¹ (E), and 1035 cm.⁻¹ (A₁). The vibration species were assigned on the basis of polarization data and line shape.

RCSQ

C.A. 1967. 67. 14

XIII - 164.7

1968

NF₃

1/21 B271. Длинноволновый инфракрасный спектр NF₃.
Chantry G. W., Gebbie H. A., Poplewell R. J. L.,
Thompson H. W. The far infrared spectrum of nitrogen
trifluoride. «Proc. Roy. Soc.», 1968, A304, № 1476, 45—51
(англ.)

м. н.

Получен спектр поглощения ($10-50 \text{ см}^{-1}$) газообразного NF₃. В спектре обнаружены 63 вращательные J -линии с неразрешенной K -структурой. Проведен анализ ожидаемого из конфигурационных соображений распределения интенсивности (J, K) -линий. Рассчитаны общие контуры перекрывающихся K -линий, измерены частотные интервалы между пиками K -контуров и положение K_0 -линий. Полученные данные позволяют определить мол. константы B_0 ($0,3562$) и D_J ($4,5-10^{-7} \text{ см}^{-1}$), что соответствует результатам анализа МВ-спектров.

Л. В. Коновалов

X. 1968. 21

1968

XIII - 1047

NF₃

branz. currep

82734h The far infrared spectrum of nitrogen trifluoride. G. W. Chantry, H. A. Gebbie, R. J. L. Popplewell, and H. W. Thompson (Nat. Phys. Lab., Teddington, Engl.). *Proc. Roy. Soc., Ser. A* 304(1476), 45-51(1968)(Eng). The rotational absorption spectrum of NF₃ was measured in the range 10 to 50 cm.⁻¹ Although the K components of the J lines were not resolved, an anal. was made of the expected intensity distribution of (J, K) lines for this oblate sym. top. The spectrum is consistent with that to be expected from mol. consts. derived from a few observed lines in the microwave spectrum. RCPP

C.A. 1968. 68. 18

NF₃ (chem. no. 8.) 13 XIII 158 1968

Curtis E.C.,

U.S. Clearinghouse Fed. Sci. Tech.

Informab. 1968, ~~AD~~ 666456, 21 pp

Bent-bend model for the vibrational force constants of nonplanar

X₃ molecules



CA, 1968, 69, 116, 61641d

AsF₃, NF₃; NSF (исст. центробетонного
решения миссии) 1969

Mivvi, A.M.

7 XIII 416

Corsi Revis. Chim. 1968, №14, 75-6.

Vibrational-rotational interactions
in the microwave rotational spectra
of diatomic and triatomic mole-
cules and determinations in the
generalized E. force field.

10

(Φ)

CA, 1969, LI, 116, 7596012

NF₃

u. b.

τ N-F

LFNF

супергруппа

C. A. 1968. 69. 26

1968

111858e Microwave spectra of nitrogen trifluoride in the excited vibrational states. Equilibrium structure. Otake, Masayuki; Matsumura, Chi; Morino, Yonezo (Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 28(3), 316-24 (Eng). The microwave spectra of 2 isotopic species of the NF₃ mol. were investigated in the excited vibrational states. The vibration-rotation interaction constants α_v^B for the ν_1 , ν_2 , ν_3 , and ν_4 states were -43.45, +38.65, +78.81, and +4.48 MHz. for ¹⁴NF₃ and -38.41, +40.14, +75.67, and +4.64 MHz. for ¹⁵NF₃, resp. The equil. rotational const., B_e , was then derived to be 10761.9₁ ± 0.2 MHz. for ¹⁴NF₃ and 10710.6₃ ± 0.2 MHz. for ¹⁵NF₃, from which the equil. structure was detd. to be $r_e(\text{N-F}) = 1.365 \pm 0.002$ A. and $\alpha_e(\angle \text{FNF}) = 102^\circ 22' \pm 2'$. A set of linear relations was derived between cubic potential const. from the observed α_v^B and l -type doubling const. RCKP

№ F₃

XIII - 482

1968

м. в.

спектр

Сек. пост.

4 Д358. Микроволновые спектры трехфтористого азота в возбужденных колебательных состояниях. Дублетное расщепление и резонанс *l*-типа в ν_3 - и ν_4 -состояниях. Otake Masayuki, Hirota Eizi, Morino Yonezo. Microwave spectra of nitrogen trifluoride in the excited vibrational states. *l*-type doubling and resonance in the ν_3 and ν_4 states. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 28, № 3, 325—340 (англ.)

Измерены микроволн. спектры для переходов $J=2 \leftarrow 1$ и $J=3 \leftarrow 2$ двух изотопич. образцов молекул NF₃ в возбужденных колебательных состояниях. Анализ спутников ν_4 и $\nu_2 + \nu_4$ показал наличие резонанса *l*-типа с расщеплением центральных линий более чем 80 Мгц. Определены значения силовых постоянных.

02.1969. 42

NF₃

XIII - 482

1968

u. b.;
coul. wot.

N1857d) Microwave spectra of nitrogen trifluoride in the excited vibrational states. 1-Type doubling and resonance in the ν_3 and ν_4 states. Otake, Masayuki; Hirota, Eizi; Morino, Yonezo (Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 28(3), 325-40 (Eng). The microwave spectra for the $J = 2 \leftarrow 1$ and $J = 3 \leftarrow 2$ transitions were measured and analyzed for 2 isotopic species of NF₃ in the excited vibrational states. The $\nu_4 + \nu_2 + \nu_1$ satellites showed spectral patterns characteristic of the *l*-type resonance, with the splitting of the center lines amounting to more than 80 MHz. The theory of Maes and Amat was applied by introducing explicitly the symmetry property of the energy levels. The ζ_4 was -0.895 for ¹⁴NF₃ and -0.888 for ¹⁵NF₃, resp. The ν_3 satellites also showed the pattern of the *l*-type resonance, but slight discrepancies found

C.A. 1968. 69. 26

between the calcd. and the observed spectra cannot be accounted for unless the 3rd-order terms are taken into consideration. The quadratic potential consts. were detd. from the observed values of ζ_4 and the isotope shifts of the vibrational frequencies, $\Delta\nu_1$ and $\Delta\nu_3$: $F_{11} = 6.14 \pm 0.15$ millidynes (md.)/A.; $F_{12} = 0.84 \pm 0.04$ md., $F_{22} = 2.41 \pm 0.05$ md.A., $F_{33} = 3.39 \pm 0.05$ md./A., $F_{34} = -0.45 \pm 0.03$ md., and $F_{44} = 1.67 \pm 0.02$ md. A., resp.

RCKP

$N^{14}F_3$

м. в.

спектр,

м. н.,

структура

ф. 1969

и р

4 Д351. Микроволновые спектры трехфтористого азота в возбужденных колебательных состояниях. Равновесная структура. Otake Masayuki, Matsumura Chi, Morino Yonezo. Microwave spectra of nitrogen trifluoride in the excited vibrational states. Equilibrium structure. «J. Molec. Spectrosc.», 1968, 28, № 3, 316—324 (англ.)

Исследованы микроволн. спектры молекул $N^{14}F_3$ (I) и $N^{15}F_3$ (II) в возбужденном колебательном состоянии. Найдены постоянные колебательно-вращательного взаимодействия, равные —43,45; +38,65; +78,81 и +4,48 Мгц (для I) и —38,41; +40,14; +75,67 и 4,64 Мгц (для II) соответственно для ν_1 , ν_2 , ν_3 и ν_4 -состояний. С помощью определения постоянной B_e установлена равновесная структура $r_e(N-F)=1,365\pm 0,002$ А и $\alpha_e(<FNF)=102^\circ 22' \pm 2'$. Найдено, что дублетное расщепление относится к l-типу.

1968

1968

XIII

NF₃ (нов. посв.)

XIII 523 1968

Pulay P., Sawodny W.,
J. Molec. Spectrosc., 1968,
26, N1, 150-152

20

pp 1968

NF₃

XIII-914

1968

(Calc. Herz)
(V_i)

(8.99)

(+ 2.95)

C.A. 1968.69.14

- (54445s) Force field and molecular constants of nitrogen tri-
fluoride. Sawodny, W.; Ruoff, A.; Peacock, C. J.; Mueller,
A. (Univ. Stuttgart, Stuttgart, Ger.). *Mol. Phys.* 1968, 14(5),
433-40 (Eng). General valence force field consts. for NF₃ were
calcd. by using accurate frequency data, Coriolis coupling consts.
(ζ), and centrifugal distortion consts. The calcd. constants
agree with expt. Mean amplitudes of vibration were calcd. by
different methods and thermodynamic functions are given from
200 to 2000°K. Earlier investigations of these mol. consts. are
incorrect. 30 references. RCFS

NF₃

м.п.;
сис. пост.;
термод.
ф-ции

+1

л. 1969. 1

ХИИ-914

1 Б78. Силовое поле и молекулярные постоянные NF₃. Sawodny W., Ruoff A., Peacock C. J., Muller A. The force field and molecular constants of NF₃. «Molec. Phys.», 1968, 14, № 5, 433—440 (англ.)

При помощи литературных данных по частотам основных колебаний ω_i , постоянным кориолисова взаимодействия ξ_i для вырожденных колебаний и центробежным постоянным D_I и D_{IK} вычислены силовые коэф. наиболее общего силового поля NF₃. Недиагональные силовые коэф F_{12} и F_{34} определены из кривых зависимостей F_{11} , F_{22} , $D_I^{(A_1)}$ $D_{IK}^{(A_1)}$ от F_{12} и F_{33} , F_{44} , $D_I^{(E)}$, $D_{IK}^{(E)}$, ξ_3 , ξ_4 от F_{34} . Найдены интервалы значений F_{12} и F_{34} , воспроизводящие опытные данные по ω_i , ξ_i , D_I и D_{IK} . Вычислены также распределение потенциальной энергии по внутренним колебательным координатам, средне-квадратич. амплитуды колебаний и термодинамич. функции (при т-рах 200—2000°K).

М. Р. Алиев

1968

☑

Использование нелинейных

$$V_1 = 1031,91, V_2 = 647,26, V_3 = 968,4, V_4 = 492,62 \quad (\text{вс } \pm 1 \text{ см}^3)$$

$$\xi_3 = 0,81 \quad \xi_4 = -0,90 \quad (\text{вс } \pm 0,02) \quad (\text{из Р.М.Т., 1967})$$

$$O_y = 14,534 \pm 0,068 \text{ (мкс)} \quad O_{y2} = -22,694 \pm 0,096 \text{ (мкс)} \quad (\text{Бечт., 1967})$$
$$\gamma(NF) = 1,371 \quad \angle NF_2 = 102,1^\circ \quad (\text{Skutzel})$$

$$F_{11} = 6,13 \quad F_{12} = 0,63 \quad F_{22} = 1,29 \quad F_{33} = 3,40 \quad F_{34} = -0,33, F_{44} = 0,90$$

$$f_2 = 4,31 \quad f_{22} = 0,91 \quad f_{F2} = 0,32 \quad f_{F21} = -0,01 \quad f_2 = 1,03 \quad f_{F2} = 0,13$$

(все в ед. $\text{мдгн}/\text{\AA}^3$, $g_0 = \gamma(NF)$)

И.В. Использование  не совсем корректно
значит, что для построения МВ и МК,
необходимо учитывать,

NF₃

4 Д407. ИК-спектры и силовое поле ¹⁵NF₃. Allan A., Duncan J. L., Holloway J. H., McKean D. C. The infrared spectrum of ¹⁵NF₃ and force field. «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 31, № 3, 368—377 (англ.)

1969

Получен ИК-спектр специально синтезированного образца ¹⁵NF₃. Произведен вращательный анализ полос колебаний ν_1 , ν_2 , ν_3 , ν_4 . Определены колебательные и

вращательные постоянные (в см⁻¹): $\nu_1=1008,93$, $\nu_2=644,84$, $\nu_3=886,34$, $\nu_4=492,02$; $B''=0,3541$, $B'=0,3554$, $\alpha_1^B=-0,00128$, $\alpha_3^B=+0,0027$, $\alpha_3^C=+0,0007$, $\zeta_3=+0,77$.

Обнаружен резонанс Ферми между уровнями ν_1 и $2\nu_4$.

Произведен расчет силовых постоянных молекулы NF₃.

При этом из решения векового уравнения для ν_3 и ν_4 (симметрия E) получено два различных набора силовых постоянных F_{33} , F_{34} , F_{44} . Имеющиеся эксперим. данные не позволяют сделать выбор между двумя наборами. При

ν_1

сим. ч.

09.1970. 42

расчете силовых постоянных F_{11} , F_{12} , F_{22} (симметрия A_1)
были определены также постоянные центробежного ис-
кажения D_j и D_{jk} . Результаты расчета силового поля
сравниваются с данными других авторов. Библ. 9.
Л. Щерба

$N^{15}F_3$

XIII-8

1969

10 Б261. Инфракрасный спектр $N^{15}F_3$ и силовое поле.
Allan A., Duncan J. L., Holloway J. H., McKean D. C. The infrared spectrum of $^{15}NF_3$ and force field.
«J. Molec. Spectrosc.», 1969, 31, № 3, 368—377 (англ.)

Исследован ИК-спектр поглощения газообразного $N^{15}F_3$ в области 490—1010 $см^{-1}$. Проведен вращательно-колебательный анализ и определены молек. постоянные: из $\nu_1 = 1008,93 \pm 0,04$ $см^{-1}$ найдены $B' = 0,3541 \pm 0,0004$, $B'' = 0,3554 \pm 0,0004$, $\alpha_1^B = 0,00128 \pm 0,00002$ $см^{-1}$; $2\nu_4^0 = 981,9$ $см^{-1}$ (изотопич. сдвиг Q-ветви по отношению к Q-ветви $N^{14}F_3$ $\Delta\nu_{44}^0 = 2,1 \pm 0,2$ $см^{-1}$); $\nu_2 = 644,84$ $см^{-1}$ (изотопич. сдвиг a-ветви $\Delta\nu_2 = 2,32 \pm 0,05$ $см^{-1}$): из $\nu_3 = 886,34 \pm 0,30$ $см^{-1}$ определены $\alpha_3^B = +0,0027 \pm 0,0003$, $\alpha_3^C = +0,0007 \pm 0,001$ $см^{-1}$ и $\zeta_3 = +0,77 \pm 0,03$; $\nu_4 = 492,02$ $см^{-1}$ (изотопич. сдвиг a-ветви $\Delta\nu_4 = 0,60 \pm 0,03$ $см^{-1}$). Изотопич. сдвиг $\Delta\nu_4$ вместе со значениями

ИК-спектр

X. 1970. 10

постоянных кориолисова взаимодействия ζ_3 и ζ_4 для молекул $N^{14}F_3$ и $N^{15}F_3$ определяют два различных набора силовых коэф. класса E : (1-й набор) $F_{33}=3,364\pm 0,08$, $F_{34}=-0,316\pm 0,03$, $F_{44}=0,901\pm 0,03$ мдн/А и (2-й набор) $F_{33}=1,918\pm 0,03$, $F_{34}=-0,129\pm 0,03$, $F_{44}=1,536\pm 0,03$ мдн/А . Оба эти набора физически неразличимы, т. к. они одинаково хорошо воспроизводят частоты кол. класса E , все возможные ζ — постоянные и вклады в постоянные центробежного растяжения. Для класса A_1 удалось выбрать один набор силовых коэф. $F_{11}=5,765\pm 0,12$, $F_{12}=+0,570\pm 0,07$, $F_{22}=1,368\pm 0,05$ мдн/А , хорошо воспроизводящий частоты кол. класса A_1 и постоянные центробежного растяжения молекулы $N^{14}F_3$ $D_J=14,85$ и $D_{JK}=-23,1$ кгц . Между частотами ν_1 и $2\nu_4$ молекулы $N^{15}F_3$ предположено существование Ферми—резонанса, характеризуемого параметром взаимодействия $W_{144}=7,0$ см^{-1} .

А. Александров

NF

XIII - 70

1969

14 Б77. Среднеквадратичные амплитуды колебаний для некоторых пирамидальных молекул XY_3 . Cyvin S. J., Cyvin B. N., Müller A. Mean amplitudes of vibration for some pyramidal XY_3 molecules. «J. Molec. Struct.», 1969, 4, № 5—6, 341—349 (англ.)

С использованием лит. силовых коэф. для молекул NF_3 (I), PF_3 (II), AsF_3 (III) и PCl_3 (IV) вычислены частоты нормальных колебаний, постоянные корриолисова взаимодействия $\zeta_{14a''}$, $\zeta_{24a''}$ и $\zeta^2[E(a) \times E(b)]$, постоянные центробежного растяжения $D_J D_{JK}$ и D_K и среднеквадратич. амплитуды колебаний молекул при T -рах 0° и $298^\circ K$ для I—III и 0° — $500^\circ K$ для IV. В приближении $L_{12}=0$ (h —матрица собственных векторов ур-ния колебаний) для двухмерных блоков A_1 и E вычислены среднеквадратич. амплитуды колебаний (0° и $298^\circ K$) молекул I—IV, PBr_3 , PJ_3 , $AsCl_3$, $AsBr_3$, AsJ_3 (V), $SbCl_3$, $SbBr_3$, SbJ_3 (VI), $BiBr_3$, BiJ_3 , XeO_3 . А. Александров

Ср. - кв.

Алхим.

исслед.

V, м.п.

X. 1970

14

+14



NF₃

XIII - 16p

1969

60986x Mean amplitudes of vibration for some pyramidal XY₃ molecules. Cyvin, Sven J.; Cyvin, Bjoerg N.; Mueller, Achim (Inst. Theor. Chem., Tech. Univ. Norway, Trondheim, Norway). *J. Mol. Struct.* 1969, 4(5-6), 341-9 (Eng). Mean amplitudes of vibration calculated from spectroscopic data are reported for 16 pyramidal XY₃ mols. For all mols. the L-matrix approxn. method was used. In addn., more accurate calcns. were performed for some of the mols., viz. NF₃, PF₃, PCl₃ and AsF₃, for which exptl. Coriolis consts. or centrifugal distortion consts. are available. The accurate calcns. confirmed the validity of the L-matrix approxn. method. RCBF

средне в.

всего в.

исследования

+14

C.A. 1970.

72.12

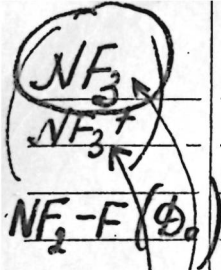


XIII-174

1969

7 Б101. Масс-спектрометрическое изучение фотоионизации. XIV. NF_3 и ONF_3 . Dibeler Vernon H., Walker James A. Mass spectrometric study of photoionization XIV. Nitrogen trifluoride and trifluoramine oxide. «Inorgan. Chem.», 1969, 8, № 8, 1728—1733 (англ.)

С помощью масс-спектрометра, снабженного вакуумным монохроматором, изучена фотоионизация NF_3 и ONF_3 . В масс-спектре фотоионизации NF_3 обнаружены ионы NF_3^+ , NF_2^+ и NF^+ . Отсутствие ионов N^+ и F^+ указывает на их высокий потенциал появления ($>21,22$ эв). Получены кривые выхода всех ионов спектра. В диапазоне 880—700 А выход NF_3^+ постоянен (автоионизация отсутствует). Измеренный потенциал ионизации NF_3 равен $13,00 \pm 0,02$ эв, теплота образования иона $\Delta H^0(1) = 269,4 \pm 0,5$ ккал/моль. Пороговое



ΔH^0
 Φ

X. 1970. 7



+8



значение потенциала появления иона i (ППП) для NF_2^+ равно $14,12 \pm 0,1 \text{ эв}$, $\Delta H^0 (\text{NF}_2^+) = 279,7 \text{ ккал/моль}$, энергия диссоциации связи $D_0 (\text{NF}_2-\text{F}) = 2,39 \pm 0,09 \text{ эв}$ ($55,1 \pm 2 \text{ ккал/моль}$), $D_0 (\text{NF}-\text{F}) = 3,45 \pm 0,2 \text{ эв}$ ($79,5 \pm 5 \text{ ккал/моль}$). Для иона NF^+ ППП равен $17,9 \pm 0,3 \text{ эв}$, $\Delta H^0 = 343,1 \pm 0,7 \text{ ккал/моль}$, $D_0 (\text{NF}) = 2,37 \pm 0,2 \text{ эв}$ ($54,6 \pm 5 \text{ ккал/моль}$). В масс-спектре ONF^+ молек. ион имеет очень малую интенсивность, основные ионы — ONF_2^+ и NO^+ . Из кривых выхода для всех трех ионов определены ППП, равные $13,26 \pm 0,1$, $13,59 \pm 0,01$ и $15,21 \pm 0,02 \text{ эв}$ для ONF_3^+ , ONF_2^+ и NO^+ соответственно. $\Delta H^0 (\text{ONF}_3) = 10,24 \text{ эв}$ ($236,1 \text{ ккал/моль}$), $\Delta H^0 (\text{ONF}_2) = 9,90 \text{ эв}$ ($228,3 \text{ ккал/моль}$), $D_0 (\text{O}-\text{NF}_3) = 4,26 \text{ эв}$ (98 ккал/моль) и $D_0 (\text{ONF}_2-\text{F}) = 1,9 \text{ эв}$ (44 ккал/моль). Повышенная прочность связи $\text{N}-\text{O}$ в ONF_3 (по сравнению со связью $\text{N}-\text{F}$) наблюдается как при фотонионизации, так и при ионизации электронным ударом. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1969, 19Б89. М. Туркина

Chem. Soc. (NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3 , ND_3 , 1969
 PD_3 , AsD_3 , SbD_3 , NHF_2 , NDF_2 , NF_3 , PF_3 ,
 AsF_3 , SbF_3 , NCl_3 , PCl_3 , AsCl_3 , SbCl_3 , NBr_3 ,
 PBr_3 , AsBr_3 , SbBr_3 , NI_3 , PI_3 , AsI_3 , SbI_3)

King Shin-Tung, Overend J.,
J. Phys. Chem., 1969, 73, N2,
406-12.

NF₃

1969

Lojko M. S.,
Beers L.

sp. noc.

J. Res. Nat. Beer.

Stand., A73, N2, 233

(Ccu. H₂O) III

NF₃

1969

kb. sex

packi

103178w Molecular orbital study of NF₃, PF₃, and NF₂.
Olmstead, Marilyn M. (Univ. Wisconsin, Madison, Wis.). 1969,
120 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich.,

Order No. 40-3651. From Diss
Abstr. Int B, 1970, 31, 2, 542

SND C

C.H. 1987, 74.90

XIII - 1402

1969

NF₃

75864j Harmonic frequencies, potential function, Coriolis coupling constants, centrifugal stretching constants, and root-mean-square amplitudes for a nitrogen trifluoride molecule. Ponomarev, Yu. I.; Khovrin, G. V. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1969, 26(6), 1062-5 (Russ). The title parameters were calcd. for NF₃. The values obtained are compared with literature data and discussed. Wladyslaw S. Brud

J_i

curr. nociv.

D_j ; D_k

C.A. 1969. H. 16

NF₃

XIII - 1402

1969

1 Б70. Гармонические частоты, потенциальная функция, постоянные кориолисова взаимодействия и центробежного растяжения, среднеквадратичные амплитуды молекулы трехфтористого азота. Пономарев Ю. И., Ховрин Г. В. «Оптика и спектроскопия», 1969, 26, № 6, 1062—1065.

Для молекулы NF₃ вычислены гармонич. частоты $\nu_1 = 1052,5$ и $\nu_2 = 663,9$ см⁻¹ (класс А) и $\nu_3 = 928,6$, $\nu_4 = 498,3$ см⁻¹ (класс Е), силовые коэф. $F_{11} = 5,72$ и $F_{33} = 3,52$ мдин/А, $F_{12} = 0,81$ и $F_{34} = -0,43$ мдин, $F_{22} = 2,82$ и $F_{44} = 1,74$ мдин. А, постоянные ангармо-

постоян.
амплитуды,
конт.
центров. расст.

X. 1970.1

ничности $X_{11} = -2,8$, $X_{12} = -3,5$, $X_{13} = -9,9$,
 $X_{1,4} = -2,3$, $X_{2,2} = -2,5$, $X_{2,3} = -6,5$, $X_{2,4} = -2,4$,
 $X_{3,3} = -3,5$, $X_{3,4} = -1,5$, $X_{4,4} = -0,6$ (все в см^{-1}),
 постоянные центробежного расстояния $D_J = 14,53$,
 $D_{JK} = -22,41$, $D_K = 9,81$ (кгц), постоянные кориолисова
 взаимодействия $S_3^2 = 0,81$, $S_4^2 = -0,90$, $S_{34}^2 = -0,43$,
 $S_{13}^x = -0,827$, $S_{14}^x = -0,194$, $S_{23}^x = 0,470$, $S_{24}^x = 0,110$;
 $S_{3a,4b}^x = -0,207$. Вычислены также среднеквадратич.
 амплитуды для 0 и 298° .

А. Александров.

NF₃

XIII - 1402

1969

12 Д164. Гармонические частоты, потенциальная функция, постоянные кориолисова взаимодействия и центробежного растяжения, среднеквадратичные амплитуды молекулы трехфтористого азота. Пономарев Ю. И., Хюврин Г. В. «Оптика и спектроскопия», 1969, 26, № 6, 1062—1065

Из литературных данных о гармонич. частотах постоянных кориолисова взаимодействия ζ_3 , ζ_4 и центробежного растяжения D_J вычислены силовые коэф. молекулы NF₃. Вычислены также формы колебаний, а из них постоянные ζ_{34}^2 , D_{JK} , D_K и среднеквадратичные амплитуды колебаний. М. Р. Алиев

ф. 1969. 128

NF₃

XIII - 1568

1969

2 Б43. Анализ колебаний молекул NF₃ и NCl₃ методом функций Грина. Ramaswamy K., Mohan N. Green's function analysis of NF₃ and NCl₃. «Indian J. Phys.», 1969, 43, № 11, 693—699 (англ.)

Методом функций Грина выведены изотопич. соотношения для частот изотопич. разновидностей молекул типа XY₃(C_{3v}). Из частот и структурных параметров вычислены силовые постоянные, средние амплитуды колебаний, постоянные кориолисова взаимодействия для вырожденных колебаний и постоянные центробежного искажения молекул NF₃ и NCl₃. Вычисленные значения центробежных и кориолисовых постоянных согласуются с имеющимися эксперим. данными. М. Р. Алиев

X. 1972.2

+1



NF₃

Valdemoro C.
at all

1969

pacem

Am. fis. real. soc. esp.
fis. y quim. 1969, 65,
Nº 2, 181-7



1970

NF₃

(103854t) Photoelectron spectra of nitrogen trifluoride and nitrogen oxide trifluoride, and a reassignment of the spectra of tetrafluorides of Group IV. Bassett, P. J.; Lloyd, D. R. (Chem. Dep., Univ. Birmingham, Birmingham, Engl.). *Chem. Phys. Lett.* 1970, 6(3), 166-8 (Eng). The He resonance photoelectron spectra of NF₃ and ONF₃ are presented, assigned, and correlated with BF₃ and CF₄ spectra. The NF₃-ONF₃ correlation is discussed in terms of a donor N-O bond in ONF₃, and from the ONF₃-CF₄ correlation it is proposed that the highest occupied orbital in CF₄ is 14. Correlations with MO calcs. are discussed.
William Braker

9-7

chem

H

C.A. 1970.73.20



1970

NF₃

12 Д265. Фотоэлектронные спектры NF₃, ONF₃ и повторное отнесение спектров фторидов IV группы. Bassett P. J., Lloyd D. R. The photoelectron spectra of nitrogen trifluoride and nitrogen oxide trifluoride, and a reassignment of the spectra of tetrafluorides of group IV. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 6, № 3, 166—168 (англ.)

С помощью резонансного излучения HeI получены фотоэлектронные спектры NF₃ и ONF₃ при разрешении $\approx 0,01$ эв и вычислены значения потенциалов ионизации. Обсуждается сравнение структуры NF₃ и ONF₃ с точки зрения N—O донорной связи в ONF₃. Из сопоставления ONF₃ и CF₄ сделан вывод, что наивысшей заселенной орбиталью в CF₄ является 1 t₁. Обсуждаются поправки, полученные при расчетах по методу MO.

В. Александров

+1

A

9. 1970.

12A

NF₃

1970

1 Б163. Фотоэлектронные спектры трехфтористого азота и оксида трехфтористого азота и переотнесение полос спектров тетрафторидов IV группы. Bassett P. J. Lloyd D. R. The photoelectron spectra of nitrogen trifluoride and nitrogen oxide trifluoride, and a reassignment of the spectra of tetrafluorides of group IV. «Chem. Phys. Lett.», 1970, 6, № 3, 166—168 (англ.)

Получены He (I) резонансные фотоэлектронные спектры NF₃ и ONF₃, проведено отнесение полос по орбиталлям и сопоставление со спектрами BF₃ и CF₄. Сопоставление спектров NF₃ и ONF₃ обсуждено с точки зрения донорного характера связи N—O в ONF₃. Из сравнения спектров ONF₃ и CF₄ предполагается, что 1t₁ — наивысшая заселенная орбиталь в CF₄. Результаты измерений сопоставляются с данными МО-расчетов.

О. Г. Гаркуша

X. 1971. 1



NF3

ср-ие
потери.
энергии

Freeman D.E. 1970

Z. Naturforsch.,

A 1970, 25, 2, 217.



(see SM4) III

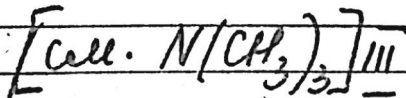


структур.
строение

Kahn O. et al.

1970

C. r. Acad. Sci., C271
(4), 231.



NF_3

Kahn O.

1970

Bull. Soc. chim. France
N12, 4193.

расчет

$[Ce.B(CH_3)_3]_{III}$

NF₃

1970

15 Б226. Интенсивности инфракрасных полос и силовое поле молекулы NF₃. Levin Ira W. Infrared intensities and force field for NF₃. «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 5, 2783—2784 (англ.)

Из эксперим. данных по абс. интенсивности ИК-полос вырожденных колебаний и из двух решений для силового поля (F) класса E вычислены производные дипольного момента по координатам симметрии ($\partial P/\partial S_i$) типа E молекулы NF₃. Отмечена высокая чувствительность параметров $\partial P/\partial S_i$ к коэф. F_{34} . С целью однозначного выбора между двумя решениями выполнен расчет $\partial P/\partial S_i$ методом ССП МО в приближениях полного и частичного пренебрежения диф. перекрыванием. Результаты обоих расчетов приводят к выводу, что действительности соответствует только набор с $F_{34} = -0,316$ мдн/А.

М. Р. Алиев

У. 1970. 15

NF₃

chem. nat

V_i

C.A. 1970. 72. 18

1970
C 94803a Infrared intensities and force field for NF₃. Levin, Ira W. (Nat. Inst. of Arthritis and Metab. Dis., Nat. Inst. of Health, Bethesda, Md.). *J. Chem. Phys.* 1970, 52(5), 2783-4 (Eng). A. Allan, *et al.* (1969) detd. 2 sep. indistinguishable force fields ($F_{34} = -0.316$ and -0.129 millidyne/Å) that precisely predict the Coriolis zeta consts. for the ¹⁴N and ¹⁵N species, the centrifugal distortion parameters, and the isotopic frequency shift ($\Delta\nu_4$) for the *E* symmetry species of NF₃. To resolve this problem, sets of dipole-moment derivs. corresponding to the 2 force field solns. were calcd. from exptl. abs. ir intensity data (P. N. Schatz and I. W. Levin, 1958). SCF complete and incomplete neglect of differential overlap (CNDO/2 and INDO) MO approxns. were then applied to choosing a preferred set of charge distribution parameters that define the mol. force field: the set of force consts. with $F_{34} = -0.316$ millidyne/Å. The normal coordinates for this force field soln. indicate that the *E* species ν_3 and ν_4 vibrations are predominantly stretching (94%) and bending (80%) coordinates, resp. FBJN

NF_3

1970

Д 196. Интенсивности ИК-спектров и силовое поле молекулы NF_3 . Levin Ira W. Infrared intensities and force field for NF_3 . «J. Chem. Phys.», 1970, 52, № 5, 2783—2784 (англ.)

Из интенсивностей ИК-полос поглощения вычислены два набора производных дипольного момента по координатам симметрии. Сравнение полученных величин с данными расчетов по распределению электронного заряда в молекуле NF_3 позволило отдать предпочтение одному из наборов силовых постоянных. М. В. Тонков

Ф. 1970. 92

11970

J ($AlCl_3$, PCl_3 , PF_3 , NF_3 , AlB_3 ,
 CrB_3 , CoB_3)

Lloyd D.R., 7 6 15 13
VII 5775

Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.,

1970, 4, 56, 500-503 (abbr).

The failure of electron impact mass
spectrometers to detect first ionization poten-
tials in some
for Phys, 1971, 42236

5075



10 18



NF₃

Pullen B.P.

1970

U.S. At. Energy Comm.,
TTR-25381, 117 pp.

фототр.
снимок

(see. CO) III



III

$Al_2Br_6 (vi)$; HF ; BF_3 ; CF_4 ; NF_3 ; NaF ; 19
 C_2F_4 ; CF_3 ; CF_3H ; CF_3Br ; CF_3Cl ; CF_3I ,
 CF_3CF_3 ; (OH_f) $\bar{x}$ 7655 $\uparrow$

Prophet H., Syverud J.N.,
U.S. Nat. Tech. Inform. Serv., AD Rep.,
1970, N867956, 76 pp (ann.)

to u (9)

CA72

NOF_3 , NF_3 , NF_2Cl , NFCl_2 , NF_2D , NCl_3 (coord. comp.) 1970
(mon. comp.)

Ramaswamy K., Mohan N., XIII 533

Z. Naturforsch., 1970, B25, No 2, 169-73
(ann.)

Normal coordinate analysis of
some nitrogen-halogen compounds

to



CA, 1970, 72, 48, 9489.3e

NF₃

расчет
ангармонич.

10 Д175. Колебательная ангармоничность в пирами-
дальных трифторидах. Reichman Sandor,
Smith D. Foss, Jr, Overend John. Vibrational
anharmonicity in the pyramidal trifluorides. «Spectro-
chim. acta», 1970, A26, № 4, 927—935 (англ.)

Расчеты постоянных ангармоничности молекул NF_3 ,
 PF_3 , AsF_3 выполнены в трех приближениях. В 1-м при-
ближении применена квадратичная потенц. ф-ция, но
введены криволинейные колебательные координаты.
Во 2-м приближении учитывается ангармоничность валент-
ных колебаний с помощью ф-ций Морзе. Постоянные
ангармоничности вычислены по известным энергиям
диссоциации и квадратичным силовым постоянным.
В 3-м приближении учитывается ангармоничность де-
формационных колебаний с помощью двухпараметрич.
потенциальной ф-ции с двумя симметричными миниму-
мами. Ангармонич. силовые постоянные K_{aaa} , $K_{aa'a'}$,
 $K_{aa'a''}$ вычислены по равновесным геометрич. парамет-
рам и квадратичным силовым постоянным. Получены

1970
XIII-1789

ор. 1970. 10 D

удовлетворительные совпадения вычисленных и некоторых известных значений постоянных X_{ij} ($i, j=1, 2, 3, 4$) и g_{33} , g_{34} , g_{44} . Вычислены разности между нормальными и фундаментальными частотами колебаний. Вычислены также постоянные α_s , β_s ($s=1, 2, 3, 4$) колебательно-вращательного взаимодействия. Главный вклад в значение β_1 вносит член 1-го приближения вида — $8B^2 (\varphi_{13}^x)^2 \omega_1 / (\omega_1^2 - \omega_3^2)$. Отрицательный знак β_1 обусловлен тем, что в данном случае $\omega_1 > \omega_3$. Опытное значение β_1 для NF_3 равно $-14,49 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. М. А. Ковнер

KCl_3 , SCl_3 , NF_3 (Vi, noc. anzapm.) 1970

Ruoff A., 14 13 XIII 1201

Mol. Phys., 1970, 19(1), 23-31

Calculation of anharmonicity constant
for some symmetric top molecules
from band contours with hot bands.

10

4

⑤



EC
CA, 1970, 13, 112, 60747a

NF
3

1970

1) 6 Б395. Знаки постоянных l -удвоения NF_3 . Stone J. M. R., Mills I. M. Signs of l -doubling constants in NF_3 . «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 35, № 3, 354—358 (англ.)

— Из значений постоянных l -удвоения вырожденных колебаний молекулы NF_3 ($q_3 = \pm 0,00405$, $q_4 = \pm 0,00171 \text{ см}^{-1}$) — найденных из МВ-спектра в возбужденных колебательных состояниях $\nu_3=1$ и $\nu_4=1$, с учетом колебательно-вращательного взаимодействия и центробежного искажения вычислены вращательные контуры ИК-полос ν_3 и ν_4 NF_3 . Путем сравнения теоретич. контуров с наблюдаемыми контурами определены знаки q : $q_3 = -0,00405$ и $q_4 = +0,00171 \text{ см}^{-1}$. М. Р. Алиев

X. 1981. 6

NF₃

1970

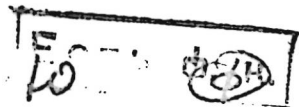
u. b.
чек

(71610s) Signs of l-doubling constants in nitrogen trifluoride. Stone, J. M. R.; Mills, Ian M. (Dep. Chem., Univ. Reading, Reading, Engl.). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 35(3), 354-8 (Eng). Computed ir band contours are presented for the 2 degenerate fundamentals of the NF₃ mol. by using the l-resonance band contour program described by Cartwright and Mills, with values of the vibration-rotation consts. detd. from the microwave spectrum by Morino and coworkers. Computed contours are presented for both possible signs of the l-doubling const.; comparison with the obsd. band contours leads to the conclusion that $q_3 = -121.4$ and $q_4 = +51.4$ MHz. RCKP

C.A. 1970. 73. 14

$O_3, F_2O, Cl_2O, Bf_3, (cur. noem.)$ 1970
 NF_3, PCl_3, CF_4 XI 518
Thakur S.N., Rai S.N., 11 13 14
J. Mol. Spect., 1970, 5, No 4, 320-2 (ans.)

Force constants of molecules with
strongly coupled vibrations.



CA 1970, 73, N2, 8864n

Fe(CO)₅ (we, am. nocm.) 13 6 1970
NF₃ (V4) Weiner R. S. XIII 1520

Diss. Abstr. Int., 1970, B31, N4, 2196-7
(anal.)

Calculation of the perpendicular
infrared band contours - appli-
cation to the V₄ band of nitrogen
fluoride. Harmonic frequencies and
force constants of iron pentacar-
bonate. Acid catal Coriolis reso-
nance in symmetric top molecules
10 2 ⊕ CA, 1971, 75, N10, 69056P

NF₃

1977

спосіб
L
апарат
45754t Basicity of nitrogen trifluoride in the gas phase by ion cyclotron resonance. Beauchamp, Jessie L.; Holtz, David; Henderson, William George; Taft, R. W. (Dep. Chem., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *Inorg. Chem.* 1971, 10(1), 201-3 (Eng). The gas-phase proton affinity (basicity) of NF₃ was quant. detd. on the basis of the ion cyclotron resonance spectroscopy of the course of the ion-mol. reactions occurring in binary mixts. of NF₃ with CH₄ and HCl and is 151 ± 10 kcal/mole, which is 56 kcal/mole less than that of NH₃. CJJN

C.A. 1971 44. 10

NF₃

сродство
к протону

12 5504. Изучение основности NF₃ в газовой фазе методом ионного циклотронного резонанса. Holtz David, Beauchamp J. L., Henderson W. G., Taft R. W. Basicity of nitrogen trifluoride in the gas phase by ion cyclotron resonance. «Inorg. Chem.», 1971, 10, № 1, 201—203 (англ.)

Изложено колич. определение основности NF₃ в газовой фазе, полученное при исследовании методом ионного циклотронного резонанса (ИЦР) ионно-молек. р-ций, возникающих в бинарных смесях NF₃ с CH₄ и HCl в диапазоне 10⁻⁷ и 10⁻³ мм при 70 эв. ИЦР показал, что идут р-ции CH₅⁺ + NF₃ → NF₃H⁺ + CH₄; H₂Cl⁺ + NF₃ → NF₃H⁺ + HCl. Определено сродство к протону для NF₃, равное 151 ± 10 ккал/моль, что соответствует ΔH_f⁰ (NF₃H⁺) = 185 ± 10 ккал/моль. Оцениваются различные факторы, дающие вклад в разницу основностей между NH₃ и NF₃. Сделан вывод, что различие в основности для многих серий функционально схожих молекул с хорошей точностью равно разности потенциалов ионизации.

М. Г. Еделев

X. 1974.

12

⊕(I)

65



1971

NF₃

Labarre Jean Francois, 1971
Leibovici Claude.

geom. |
comp. | " J. Chim. phys. et phys.-chim. biol.,
1971, 68, n 11-12, 1618-1620.

(sur F₃NO, III K.)

NF₃

XIII-1990-BP

1971

7 Б315. «Псевдопараллельные» инфракрасные полосы сплюснутых симметричных волчков NF₃ ν_4 и $(\nu_4 + \nu_2)$ и CF₃H ν_6 . Masri F. N., Blass W. E. «Pseudo-parallel» infrared bands of oblate symmetric tops NF₃ ν_4 and $(\nu_4 + \nu_2)$, and CF₃H ν_6 . «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 39, № 1, 98—114 (англ.)

м.н

Проведен анализ структуры полос в ИК-спектрах высокого разрешения симм. волчков NF₃. (I) (полосы ν_4 и $\nu_4 + \nu_2$ в области $\sim 470-530$ и $1099-1170$ см⁻¹ соотв.) и CF₃H (II) (полоса ν_6 , $\sim 480-540$ см⁻¹) с использованием ЭВМ и с учетом резонанса *l*-типа. С помощью моделирования на ЭВМ воспроизведены контуры наблюдавшихся *P*, *Q*, *R*-ветвей и воспроизведены частоты линий тонкой структуры *P* и *R* ветвей. В анализе использовались значения след. молек. постоянных:

х, 1972,

4

(+1)



для I (полоса ν_4) $C_0=0,1949$, $B_0=0,3563$, $C_e=0,1961$ см⁻¹,
 $\zeta^z = -0,895$, $\alpha_1^\beta = 0,00015$, $q_4 = \pm 0,00171$, $D_0^j = 4,8 \times 10^{-7}$,
 $D_0^{jk} = -7,6 \times 10^{-7}$, $D_0^k = 3,4 \times 10^{-7}$ см⁻¹, (полоса $\nu_4 + \nu_2$)

$\zeta_{4+2}^z = -0,895$, $\alpha_{4+2}^\beta = 0,00144$, $q_{4+2} = \pm 0,00171$ см⁻¹; для
 II (полоса ν_6) $C_0=0,1889$, $B_0=0,3452$, $C_e=0,190$, $\alpha_6^\beta =$
 $= -0,00014$, $q_6 = \pm 0,00121$ см⁻¹, $\zeta_6^z = -0,802$, $D_0^j =$
 $= 3,77 \times 10^{-7}$, $D_0^{jk} = -6,0 \times 10^{-7}$, $D_0^k = 3,3 \times 10^{-7}$ см⁻¹.

Установлено, что постоянные I, II l -удвоения q_4 , q_{4+2} , q_6
 имеют положит. знак. Определены начала полос: для

I $\nu_4=493,51$, $\nu_4+\nu_2=1137,58$; для II $\nu_6=507,82$ см⁻¹.

Исследование структуры полос показывает, что наблю-
 давшиеся «линии» P и R ветвей представляют собой
 кластеры близко расположенных линий ${}^P P_k(J)$ и ${}^R R_k$
 (J) данного J и что в этих полосах пики P и R «линий»
 соответствуют компонентам $K \simeq J^P P(J)$ и ${}^R R(J)$ класте-
 ров соотв. Определенные молек. постоянные I и II со-
 поставлены с лит. значениями 2.

А. П. Александров

C₂H₂

XIII 1947

1971

NF₃

(4)

156364f Isotopic substitution and the choice between alternative sets of force constants, with special reference to the cases of ethylene, ketene, diazomethane, and formaldehyde. McKean, D. C.; Duncan, J. L. (Dep. Chem., Univ. Aberdeen, Old Aberdeen, Scot.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1971, 27(9), 1879-91 (Eng). Attention is drawn to the often-neglected alternative sets of force consts. which may reproduce equally well data which in no. and precision are otherwise adequate to define all the parameters of the general force field. An empirical survey of (2 × 2) vibrational problems illustrate some of the circumstances under which these arise. Where sym. isotopic substitution or phys. intuition fails to provide evidence for discriminating between the alternative sets, asymmetric substitution succeeds in specified cases. Examples studied in detail include the E species of NF₃, the B₂ species of ketene and diazomethane and

Chem. H.

71

(+)

(+1) X

C.A. 1971. 75

26

the A_g species of C_2H_4 . In the latter case, 2 different force fields are current in which k_{c-o} is either ~ 11 or ~ 9 mdyne/Å. That the 2nd of these is the correct one, is now shown by a study of ^{13}C frequency shifts in H_2CCD_2 . This result has important implications for the totally symmetric force consts. of other mols. contg. the methylene group, such as CH_2O , allene, ketene, diazomethane, all of which exhibit the phenomenon of 2 equally plausible force fields.

NF₃

XIII-856

1971

Vi

555192 Spectroscopic study of nitrogen fluorides. Moskvi-
tina, E. N.; Kuzyakov, Yu. Ya. (USSR). *Kolebatel'nye*
Spektry Neorg. Khim. 1971, 101-15 (Russ). Edited by Khari-
tonov, Yu. Ya. "Nauka": Moscow, USSR. A review con-
cerning in detail ir and Raman spectra of NF₃, N₂F₂, N₂F₄, NF₂H,
NF₂D, and NF₂Cl and methods and results of the calcn. of integral
intensities and electrooptical parameters of these compds. 46 refs.
V. Bekarek

14

C.A.

1971

15.8

X

NF₃

1971

XIII - 856

9 Б197. Спектроскопическое изучение фторидов азота. Москвитина Е. Н., Кузьяков Ю. Я. В сб. «Колебательн. спектры в неорганич. химии». М., «Наука», 1971, 101—115

Изучены ИК-спектры поглощения фторидов азота в различном агрегатном состоянии в области 400—4000 см⁻¹. Дано отнесение частот. Проведен расчет частот и форм колебаний молекул NF₃, NF₂Cl, NF₂H, NF₂D, N₂F₄, CH₃NF₂. Измерены интегральные интенсивности поглощения, относящихся к основным колебаниям молекул NF₃, NF₂H, NF₂D, NF₂Cl, N₂F₄. Резюме

(содержит также NF₂Cl) XIII

X.1971. 9

IX

NF₃

суд. нов.

Vi

нов.

нов.

132599q Determination of the structure of pyramidal molecules of XY₃ type during the solution of a vibrational problem using centrifugal distortion constants. Ponomarev, Yu. I.; Khovrin, G. V. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1971, 30(2), 230-3 (Russ). A method for combined detn. of the intramol. force field and geometry of pyramidal XY₃ mols. (without using isotope substitution) during the soln. of a vibrational problem, using rotational and centrifugal distortion consts., was studied; NF₃ was used as a test model. The effect of exptl. data on the accuracy of the valence angle detn. was examd. New results concerning the AsF₃ mol. structure as well as more reliable systems of force consts. for PCl₃, PF₃, and AsF₃ mols. were obtained, the geometry of PF₃ was detd. more accurately, and the Coriolis interaction consts. of all mols. cited were calcd. In the XY₃ mols. (X = P, As; Y = H, F, Cl), the valence angle values increase in the series H < F < Cl and As < P. The method examd. needs highly accurate centrifugal distortion consts. and is less sensitive to the frequencies of normal vibrations. J. Moravec

1971

828

111

+3

C. A. 1971. 44. 24

+1 III, 004

X

XI - 1136

1971

NF3 4 gp. (curr. rec., M. H.)

Redington R. L., Aljibury A. L.,

J. Mol. Spectrosc., 1971, 37, (3),
494-516

10

№3

XIII - 1992

194

Vi,

М. П.

9 Б294. Изучение l -резонанса в полосе ν_4 трехфтористого азота с высоким разрешением. Reichman Sandor, Ginn S. G. W. High resolution study of l -type resonance in the ν_4 band of nitrogen trifluoride. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 40, № 1, 27—32 (англ.)

С разрешением $\sim 0,03 \text{ см}^{-1}$ исследована вращательная структура ИК-полосы ν_4 молекулы NF_3 . Анализ спектра проведен с учетом колебательно-вращательного l -резонанса. Показано, что линии переходов с $\Delta K = +1$ смещены в высокочастотную, а линии переходов с $\Delta K = -1$ — в низкочастотную область, а величина смещения $\sim (I^2 - K^2)^2$. Определены значения колебательной частоты ($\nu_4^0 = 493,43 \text{ см}^{-1}$), постоянные колебательно-вращательного взаимодействия ($\alpha_4^c = 5,3 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$) и l -резонанса ($q_4 = 1,71 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$). Обнаружены также горячие полосы $2\nu_4 \leftarrow \nu_4$ и $\nu_4 + \nu_2 \leftarrow \nu_2$. М. Р. Алиев

РЖХ, 1972, №9

NF₃

XIII - 1992

1971

5 Д376. Исследование с высоким разрешением *l*-резонанса на полосе трехфтористого азота. Reichman Sandor, Ginn S. G. W. High resolution study of *l*-

type resonance in the ν_4 band of nitrogen trifluoride. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 40, № 1, 27—32 (англ.)

• Получены ИК-спектры газообразного NF₃ в области 470—520 см⁻¹ с разрешением 0,025—0,05 см⁻¹ в слое 3 м при давл. 10 мм рт. ст. Наблюдаемая колебательно-вращательная структура отнесена к полосе $\nu_4(e)$, возмущенной *l*-резонансом. Влияние резонанса выражается в усилении линий $^R P(27) - ^R P(11)$ и $^R R(6) - ^R R(29)$; сдвигах линий, расщеплении Q-ветви, ослаблении ее R-компоненты и усилении *p*-компоненты. Произведенный расчет спектра подтверждает положит. знак постоянной *l*-резонанса $q = 1,71 \cdot 10^{-3}$ см⁻¹. Вычислены колебательная частота $\nu_0 = 493,43$ см⁻¹ и постоянная $\alpha_4^c = 5,3 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹. Обнаружено наложение полосы горячего перехода с уровня ν_2 . Библ. 8.

(м.н.)

Ф. 1972

59

PF_3 , NF_3 , NH_3 , BF_3 , RuO_4 (curr. n. / 13 16 15 19 + 2)

Ananthakrishnan T.R., Aruldhas G.,
XIII 2293

J. Mol. Struct., 1972, 13, N2, 163-169
(curr.)

The calculation of unique force
constants.

PzH Puz, 1973, PD166

10

6

1972

15 Б149. Фотоэлектронные спектры галогенидов. III.

Трифториды и окситрифториды азота и фосфора и окситрихлорид фосфора. Bassett P. J., Lloyd D. R. Photoelectron spectra of halides. Part III. Trifluorides and oxide trifluorides of nitrogen and phosphorus, and phosphorus oxide trichloride. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1972, № 3, 248—254 (англ.)

Получены фотоэлектронные спектры NF_3 , PF_3 , NOF_3 и POF_3 с высоким разрешением и с использованием источников излучения He-I (5844) и He-II (304A), а также спектр POCl_3 с низким разрешением. Приведены измеренные адиабатич. и вертикальные потенциалы ионизации исследованных молекул и графики спектров, на к-рых наблюдается тонкая колебательная структура. Найденные потенциалы ионизации сопоставлены с энергиями МО, полученными при расчетах неэмпирич. методом МО ЛКАО ССП (РЖХим, 1971, 3Б28). Хотя точного колич. согласия не наблюдается, такое сопоставление под-

 NF_3 PF_3 NOF_3 $\left(\begin{smallmatrix} \text{N} \\ \text{O} \end{smallmatrix}\right)$

(+2)



X. 1972. 15

тверждает предложенное отнесение потенциалов ионизации (колич. согласие улучшается при введении в вычисленные энергии эмпирич. поправочного уровня коэф. 0,92). Исключение составляет молекула NOF_3 , для которой предложенное ранее отнесение опровергается отсутствием полос в спектре в области 21—25 эв. Сопоставление спектров тригалогенидов и их окислов позволяет сделать вывод, что в окислах происходит стабилизация орбиты неподеленной электронной пары молекулы-донора за счет образования связи с O, тогда как остальные МО стабилизируются в меньшей степени. Проведено также сопоставление уровней POCl_3 с SiCl_4 и POF_3 с SiF_4 , но обнаружить аналогичную корреляцию между уровнями NOF_3 и CF_4 или NF_3 не удастся. Сообщ. II см. РЖХим, 1971, 21Б111.

М. Дяткина

NF₃

1972

4 Б110 Д. Теоретические и экспериментальные исследования в области фотоэлектронной спектроскопии газообразных молекул. Griebel Rudolf. Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur Photoelektronen-Spektroskopie gasförmiger Moleküle. Diss., Dokt. Naturwiss. - Fak. Allg. Wiss. Techn. Univ. München, 1972, 137S., ill. с (нем.)

Дан обзор лит. работ по относит. интенсивностям фотоэлектронных спектров и проведены расчеты сечений ионизации для нек-рых модельных потенциалов. Рассмотрены эксперим. данные для NF₃ и пр-ных фенилацетилена, а также вопросы расчета коэф. Франка — Кондона. Дана схема фотоэлектронного спектрометра новой конструкции.

В. И. Нефедов

фотоэл.
спектроскопии}

X/974N4



(+1) общ. разд.

BF_3 , PF_3 , AsF_3 , NF_3 (cur. nocu.) 1972 ^{13 15}

Hey A.R., Stone J.M.R., Watson J.K.G.

J. Mol. Spectrosc, 1972, 42, N2, 393-
- 9 (ann.)

Ambiguities in the harmonic
force fields of XY_3 molecules.

10  



CA, 1972, 77, N2, 115477

$\text{NF}_3, \text{O}_3^+, \text{O}_3, \text{O}_3^-, \text{CF}_3$ (реакт. структура; расчет) 1972

McCain D.C., Palke W.E. $\bar{x}$ 2984

J. Chem. Phys., 1972, 56, N10, 4957-
- 4965 (англ.)

Calculation of hyperfine
coupling constants in inorganic
radicals.

РР72
ЖХХХ, 1972, 21524

Учен. зап. Казан. ун-та.
Физ.-математ. науки.
1972, 21524

OsO_4 ; RuO_4 ; BF_3 , NF_3 , SF_6 , MoS_4^{2-}
 $\text{MoO}_2\text{S}_2^{2-}$ (di, cum. n.) XII 1075 1972

Müller A., Schmidt K.H., Mo-
han N., J. Chem. Phys., 1972,
57, N4, 1752-1757

10

1972

 NF_3 NH_3

геометр.

18 Б225. Оценка структуры молекул с использованием постоянных центробежного растяжения. Пономарев Ю. И., Ховрин Г. В. В сб. «Материалы 1-го Всес. симпоз. по вращательн. спектрам молекул. 1969». Баку, 1972, 144—146

На примере молекул NF_3 (I) и NH_3 (II) рассмотрено определение ~~структурных параметров~~ отдельной молекулы без привлечения спектроскопич. данных о вращательных постоянных изотопич. молекул. Структурные параметры (длина связи r и угол между связями α) I и II определяются совместно с шестью силовыми коэф. из частот нормальных колебаний $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4$, постоянной корриолисова взаимодействия ξ_3 или ξ_4 , постоянных центробежного искажения D_J и D_{JK} и вращательной постоянной B . Для упрощения задачи в расчетах используются не D_J и D_{JK} , а отношения D_J/B^3 и D_{JK}/B^3 , к-рые не зависят от длины связей. Приведены результаты расчета для I и II при использовании гармонич. и фундаментальных значений частот колебаний.

А. П. Александров

X. 1972 № 18

XIII-2328



④1

NF₃

1942

Prophet H, Syberud A.N.

V; Govt. Rep. Announce, 1942,
72, 76-77.

● (ccu H₂ Br₆) III

NF_3

2001 m m m m

Kalman Berry L. 1973

"J. Chem. Phys."

1973, 59, N9,

5184-88.
Self-consistent extended
Hückel theory; I

NF₃

A. Müller, N. Mukan

1973

ср. анал.
калеб.

с. н.

"J. Chem. Phys.", 1973, 58, n 7
2994-3000.

NF₃

спектр

XIII - 2596

Ф. 1974
N 6

6 Д449. Резонанс *l*-типа в полосах обертонов. Спектр в области полосы $2\nu_4$ трехфтористого азота. Reichman Sandor, Schatz Jan. *l*-type resonance in an overtone band. The $2\nu_4$ spectrum of nitrogen trifluoride. «J. Mol. Spectrosc.», 1973, 48, № 2, 277—282 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразного NF₃ в области полосы $2\nu_4$ с разрешением $0,05 \text{ см}^{-1}$. Проведен вращательный анализ низкочастотного крыла полосы, свободного от перекрывания с ν_1 . Определены колебательная частота и константа колебательно-вращательного взаимодействия α_4 . Отмечен случай *l*-резонанса. Рассмотрен *l*-резонанс для обертонов и показано, что при небольших величинах g_u резонанс может быть даже сильнее, чем на соответствующем основном тоне. Возмущения интенсивностей могут приводить к возникновению запрещенных полос. Применение выводов теории позволило определить параметры резонанса q_4 и g_{44} и отношение колебательных интенсивностей перпендикулярной и парал. компонент полосы: Библ. 9.
М. В. Тонков

1973

1870

Физический

оттиск 1870

1973

MF₃

13 Б282. Резонанс *l*-типа в оберточной полосе. Спектр трифторида азота в области полосы $2\nu_4$. Reichman Sandor, Schatz Jan. *l*-type resonance in an overtone band. The $2\nu_4$ spectrum of nitrogen trifluoride. «J. Mol. Spectrosc.». 1973, 48, № 2, 277—282 (англ.)

м.п. *vi*

Исследован с высоким разрешением ($\sim 0,050 \text{ см}^{-1}$) ИК-спектр поглощения NF_3 (I) (газ) в области полосы $2\nu_4$ ($\sim 960\text{—}1000 \text{ см}^{-1}$). Рассмотрены недиагональные матричные элементы колебательно-вращательного гамильтониана H для молекулы симметрии C_{3v} , ответственные за резонанс *l*-типа для полос обертонов, в частности для полосы $2\nu_4$ I. Показано, что при достаточно малых значениях постоянной gll эффект *l*-резонанса в полосе обертона может быть столь большим или даже большим, как и в соотв-щей основной полосе. В результате резонанса *l*-типа в полосе обертона возможно по-

9652-
XIII

2. 1974 N 13

явление линий запрещенных переходов. Путем расчета на ЭВМ с использованием специально написанных программ воспроизведен ИК-спектр поглощения I в области полосы $2\nu_4$. При этом большинство молек. постоянных I взято из предшествующих работ. Путем варьирования определены след. молек. постоянные I (полоса $2\nu_4$): $\nu = 983,74 \pm 0,02$, $C'' - C' = (1,06 \pm 0,05) \times 10^{-3}$, $q_4 = (1,66 \pm 0,03) \times 10^{-3}$, $g_{44} = 0,729 \pm 0,005 \text{ см}^{-1}$, отношение колебательной интенсивности перпендикулярной и параллельной компонент полосы $I_{\perp} / I_{\parallel} = 0,30 \pm 0,05$.

А. П. Александров

УФ₃

Дудин А. В.

1974

Сатенин А. М.

Д. Р.

"Второй Всес. конф. по ин-
фракрасной оптике, 1974, Тбили-
си" 1, "Наука" 1974, 159-160.

(см. УФ; III)



NF₃

Omnick 3995

1974

BF₃

Harland P. W. et al.

CF₄

J. Chem. Phys., 1974,
61 N5, 1621-35.

Partitioning of excess energy
in dissociative resonance ...

41031.95

Ph, Ch, TC

41125

NF₃ - фотолиз

1974

*4-7106

Jacox Marilyn E., Milligan Dolphus E.,
Guillory William A., Smith Jerry J. Mat-
rix-isolation study of the vacuum-ultra-
violet photolysis of NF₃. The electronic
spectrum of the NF₂ free radical. "J. Mol.
Spectrosc.", 1974, 52, N 2, 322-327
(англ.)

198 199 216 0224 ПИК ВИННИТИ

40919.6340

Х,ТС

NF₃

00394 01

1974

образ

при и.и.и.

2395

Исследование реакции тетраэторгидразина
с азотистоводородной кислотой методом
импульсного фотоллиза. Москвитина Е.Н.,
Заманский В.М., Кузяков Ю.Я.

"Вестн. Моск. ун-та. Химия", 1974, 15,
№ 4, 486-487 (рез. англ.)

0193

I77 I80 185

ВИНИТИ

1974

№ 3

Отчет по научно-иссл.
работе ИВГАН отряда № 8

"Периодиками" сие св-ва
азота, водорода и их
соединений.

м. п.

IX 4856

1974

$\text{RbCl}, \text{MgCl}_2,$

$\text{NF}_3, \text{SF}_4, \text{HF}, \text{SCl}_2, \text{Cl}_2\text{O}, (\text{CH}_3)_2\text{O}(\text{D}_2\text{O})$

Sanderson R. T.

Educ. Chem., 1974, 11(6), 208-9

10, 11

40626.8159

TC, Ph, Ch

NF₃

41125 02

XIII - 2656

1974

2190

Sawodny Wolfgang, Pulay Péter. Ab
initio study of the force constants of
inorganic molecules ONF and NF₃. "J.
Mol. Spectrosc.", 1974, 51, N 1, 135-141

(англ.) (см. ONF; III)

0133-1117

115 117

ВИНИТИ

40919.6332

NF₃

00394 01

1974

X, TC

образ. при плавлении. 2396

фотолиз

Исследование [] реакции тетрафторгидра-
зина с водородом методом импульсного
фотолиза. Заманский В.М., Москвитина
Е.Н., Кузяков Ю.Я.

"Вестн. Моск. ун-та. Химия", 1974, 15,
12-4, 458-460 (рез. англ.) 0193

177 180 185

ВИНИТИ

XIII-3547

1975

Docum. M.N., D(BH, BH₂, BH₃, CH, CH₂,
CH₃, NH, NH₂, NH₃, NO, NO₂, NO₃, NF,
NF₂, NF₃)

Accoly C.S.R., Vyanna J.D.M.,

J. Phys B: Atom. and Mol. Phys, 1975,
2, 1143, 2987-2994

10

8

FNO

*13-10886

1975

Chong Delano P.

(I)

"J. Electron Spectrosc and
Relat Phenom" 1975, I,
N6, 445-455 (a.u.)

(see HNO; III)

51118.1856

TC, Ch, Ph

NF₃ (в у. т.)

(в N-F)

40892

1975

3501

Dorko Ernest A., Grimm U.W., Scheller K.,
Mueller Gerhard W. Shock tube decomposition of dilute mixtures of nitrogen trifluoride in argon.

"J. Chem. Phys.", 1975, 63, N 8, 3596-
3601 (англ.)

0489 ПАК

476 478

ВИНИТИ

50715.252

TC, Ch

29547 GR

NF₃

1975

X-4-9472

Glidewell C. Bond angles in halides and hydrides of nitrogen and oxygen. "Inorg. and Nucl. Chem. Lett.", 1975, 11, N 5, 353-357

(англ.)

0409 пик

379 381

ВИНИТИ

$N\overline{F}_3$

OMM. 4468

1975

$N\overline{F}_4$

Kulkarni K.S., et al.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1975, 13,
N11, 780-2.

(partially
in. edge)

(on CF_3) 11

K_2F_2 , N_2F_4 , NF_3 XI4526 1975
(спектр поглощ., фтп.)

Макеев Т. Н., Синянский В. Ф.,
Эмиров Б. М., 11.

Докл. АН СССР, 1975, 222 (1), 151-4.

Спектр поглощения некоторых
гидридов вблизи ультра-
фиолетовой области.

С. А. 1975. 83 п 10. 87757 п 10

1975

раскел
л.

"Mol. Phys.", 1975,
29 N2, 641-43.

Рассетт уиу. ллссскнк

50905.1303

Ph, TC, MGU

34469

MF₃ XIII-3480*

1975

4-10011

Ramaswamy K., Sridharan T. Unique force fields of some XY₃-type molecules.

"Indian J. Pure and Appl. Phys.", 1975,

13, N2, 98-100. (англ.)

0444 1975

(рус. NH₃; III)

414

414

ВИНИТИ

NF₃

10 Д273 Энергетика процессов ионизации и распадов молекулы трехфтористого фосфора под воздействием электронного удара. Torgerson David F., Westmore John B. Energetics of the ionization and fragmentation of phosphorus trifluoride by electron impact. «Can. J. Chem.», 1975, 53, № 6, 933—938 (англ.; рез. франц.).

1975

(У, А. Р.)

Масс-спектрометрич. способом получены кривые эффективности выхода основных положит. ионов, которые являются продуктами электронной бомбардировки PF₃. Найдены потенциалы появления (в электрон-вольтах): PF₃⁺ ($11,65 \pm 0,07$); PF₂⁺ ($15,5 \pm 0,2$); PF⁺ ($20,5 \pm 0,2$); PF₂⁺⁺ (~ 40); P⁺ ($32,3 \pm 0,5$); PF⁺⁺ (~ 40) и F⁺ (~ 36). Приводится также кривая выхода иона F⁻, единственного отрицат. иона, который образуется в заметных кол-вах. Обсуждаются возможные механизмы диссоциативной ионизации. Проводится сопоставление измеренных и известных потенциалов ионизации следующего ряда молекул и радикалов: NF₃, NF₂, NF; PF₃, PF₂, PF; PCl₃, PCl₂, PCl; PBr₃, PBr₂, PBr; PJ₂; AsCl₃.
Г. А. Вомпе

(+14) ☒

(+1) м.с

ф. 1975

N 10

60412.1282

Ex-AR/KP-z, TC, Ph, MGU

(неограниченно)

N_{F3} 100

F (1)

1976

3999

Bigio Irving J., Begley R.F. High-
power visible laser action in neutral
atomic fluorine. "Appl. Phys. Lett.", 1976,
28, N5, 263-264 (англ.)

0590 мм

576 577 582

ВИНИТИ

N⁷₃

1976

Böding Mainz

Z. Chem. 1976, 10 N11,
430-5

(car. ucr.)

(car. H₂O; III).

N⁷3

1976

Burdett J. K.

Street. and Blvd. 31
Berlin, e.g.; 1976, 67-105.

(recall)

(au. BeT₂; III).

60312.8779

Ch, Ph, TC, MGU

41125

NF₃ (м.н.)

1976

057. 4396

Duncan J. Lindsay.

The centrifugal distortion constant D_K
of symmetric top molecules.

"J. Mol. Spectrosc.", 1976, 60, N 1-3,
225-233 (англ.)

646-658

0678
ВИНИТИ

61206.4314

Ch, Ph, TC, E-0

+ 40892

NF_3

(суд. газете)

1976

84-15594

Hudson Reggie L. Williams Francon

The ESR spectrum and structure of BF_3^- .

"J.Chem.Phys.", 1976, 65, N 6, 3381-3382

(англ.)

0760 пмк

739 746 7 5 8

ВИНИТИ

* 62-13546

1976

$$NF_3$$

NF5

$$NCl_3$$
$$\overline{NCL}_5$$

22 Б26. Расчеты три- и пентагалогенидов элементов 5 группы неэмпирическим методом молекулярных орбиталей самосогласованного поля в валентном приближении. Murrell John N., Scollary Carole E. Non-empirical valence-shell self-consistent field molecular-orbital calculations on group 5 tri- and penta-halides. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1976, № 9, 818—822 (англ.)

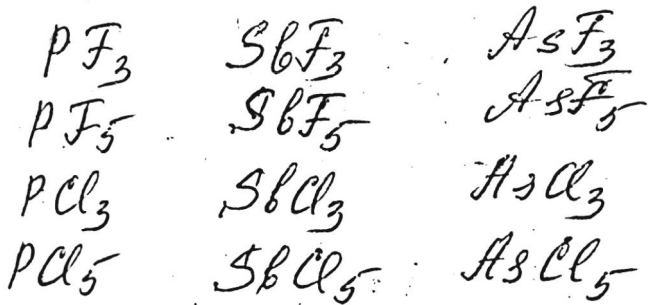
Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении (J. Chem. Soc. Far. Trans., 1975, 890) проведены расчеты электронного строения три- и пентафторидов и -хлоридов азота, фосфора, мышьяка и сурьмы. В расчетах использован минимальный базис с включением d -АО для элементов 5 группы. Рассчитанные геометрии тригалогенидов согласуются с эксперим. данными. Рассчитаны энергии диссоциации для процесса $MX_5 \rightarrow MX_3 + 2X$, к-рые найдены отриц. для NF_5 , NCI_5 , и $AsCl_5$. Расчеты смешанных пентагалогенидов Р с тригонально-бипирамидальной структурой показали, что атом F во всех случаях по энергии предпочтительно занимает экваториальное положение. По резюме

Кв. мет.
расчет
д. европ.

~~5/5~~

2. 1976 N 22.

См. На-отгъѣе



NF₃

Slanina L.

1976

"Collect Creek Chem Compounds"

1976, 41, NF, 1864-1874 (aww)

нам.
маленьк.

(см NF₂; III)

*43-14806

61227.2137

Ch. MGU. Ph. TC

41125

NF3

Р476

X 4-15924

van Straten A.J., Smit W.M.A. Bond
charge parameters from integrated infrared
intensities. "J. Mol. Spectrosc.", 1976,
62, №3, 297-312 (англ.)

077.8 мик

734 739 170

ВИНИТИ

NF₃

[num 5237]

1977

Evans P. J., et al
J. Chem. Phys., 1977,
66, N9, 4253-4.

Reply to comments on the shock-
-induced decomposition of NF₃
in argon.

NF₃

Index 5315 - 1947

Fontal B, et al

Spectrochim. Acta, 1947,

(Калиб-спектр,
исследования.)

33A, 507-15

оттиск 5833

1977

MF₃

спектр
ИК.

4 Д361. Интенсивность обертонов и комбинационных полос ИК-спектра NF_3 . Golden William G., Jeannotte A. C., II, Blackburn Carol C., Overend John. Intensities of binary overtone and combination bands in the i. r. spectrum of NF_3 . «Spectrochim. acta», 1977, A 33, № 10, 901—906 (англ.)

Получены спектры ИК-поглощения NF_3 и его раствора в жидком аргоне в области 900—2100 см^{-1} . Измерены интенсивности полос обертонов и комбинационных полос. Выполнен расчет этих интенсивностей в предположении равенства нулю вторых производных дипольного момента по норм. координате. Первые производные дипольного момента определены по литературным данным об интенсивностях. Интенсивность обертонов и

ф. 1978 N 4

комбинационных полос полносимметричных колебаний близка к нулю, что согласуется с нулевым значением соответствующих констант аугармоничности. Точность определения остальных интенсивностей составляет $\sim 10\%$. Результаты расчета интенсивности деформационных колебаний хорошо согласуются с опытными данными, для валентных колебаний согласие несколько хуже. Обсуждена применимость модели полярного тензора к расчетам интенсивности основных полос. Библи. 15.

М. Тонков

№ F₃

оттиски 5833

1974

(4 B212.) Интенсивность двойных обертонов и составных полос в инфракрасном спектре NF₃. Golden William G., Jeannotte A. C., II, Blackburn Carol C., Overend John. Intensities of binary overtone and combination bands in the i. r. spectrum of NF₃. «Spectrochim. acta», 1977, A 33, № 10, 901—906 (англ.)

(2i)

Измерены в области частот от 980 до 2050 см⁻¹ абс. интенсивности всех первых обертонов и парных составных полос колебаний ν_1 , ν_2 , ν_3 и ν_4 NF₃ в газ. и жидк. фазах. Измеренные интенсивности сопоставлены с вычисленными в ангармонич. приближении. При расчетах вторые пр-ные дипольного момента по нормальным координатам положены равными нулю и использованы первые пр-ные дипольного момента по безразмерным нормальным координатам и кубич. силовые по-

д. 1978, N 4

стоянные в пространстве нормальных координат. Получено хорошее согласие между измеренными и вычисленными интенсивностями для $2\nu_1$, $2\nu_2$, $\nu_1 + \nu_2$, $\nu_1 + \nu_3$, $\nu_1 + \nu_4$, и $\nu_2 + \nu_3$ полос. Однако для обертонов вырожденных колебаний и составных мод. ($2\nu_3$, $2\nu_4$ и $\nu_3 + \nu_4$) наблюдается расхождение между измеренными и вычисленными интенсивностями, что м. б. связано с пренебрежением в расчетах высшими членами дипольного разл. или с неточностью модели ангармонич. силового поля.

С. Н. Мурзин

NF₃

1977

N₂O

u.v. chem
liq. Ar.

Di

89: 50750c Infrared spectra of simple molecules in liquid-argon solution. II. Nitrogen trifluoride and nitrous oxide. Jeannotte, A. C., II; Overend, John (Dep. Chem., Univ. Minnesota, Minneapolis, Minn.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1977, 33A(12), 1067-71 (Eng). The IR spectrum was measured of NF₃ in liq. Ar at 0.10-2.35M. The IR spectrum of the N₂O impurity was also measured in liq. Ar to aid band assignment. For NF₃, 29 overtone and combination bands were identified in addn. to the vibrational fundamentals. The wave nos. of the NF₃ bands were used to est. the anharmonic coeffs. x_{ij} and g_{ij} , which are compared with the corresponding gas-phase quantities. 89: 50751d Two high pressure modifications of lithium tungstate (Li₂WO₄). Hauck, J.J.; Rosenhauer, M. (Inst. Festkörperforsch., Kernforsch. Jülich, Jülich, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1977, 33A(12), 1103-4 (Ger).

(+1) 18

C. A. 1978. 89 iv 6

NF₃

44-18930

1977

Schmiedeknecht A. et al.

(review
u.n.)

"J. Chem. Phys." 1977, 66,
N12, 5469-5476 (ans.)

see NH₃; II)

NF₃

smmcc 5792 1974

matamora

Ji

Shimanoeki T.

U. S. Navy. Glion. Land Soc. Data.
1977. G. 995-1202.

1978

NF₃

16 Б1545. Реакции трифторида азота, инициируемые инфракрасным излучением. Адамова Ю. А., Зубков В. И., Каграманова Э. М., Кузнецова Т. В., Панкратов А. В., Скачков А. Н., Со-
снина Г. Ф. «5-й Всес. симпоз. по химии неорган. фторидов, Днепропетровск, 1978». М., 1978, 25

Обнаружены р-ции $\text{NF}_3 + 3/2\text{CO} = 3/2\text{COF}_2 + 1/2\text{N}_2$, $\Delta H = -157$ ккал/моль (1), $\text{NF}_3 + 3/2\text{SO}_2 = 3/2\text{SO}_2\text{F}_2 + 1/2\text{N}_2$, $\Delta H = -148,9$ ккал/моль (2), $\text{NF}_3 + \text{NO} = \text{FNO} + 1/2\text{N}_2\text{F}_4$, $\Delta H = -7,8$ ккал/моль (3), протекающие при инициировании излучением лазера на CO_2 на частотах 907 или 1031 см^{-1} , возбуждающим вал. кол. N_2F_4 . Измерены пороговые плотности излучения, составившие для р-ций (1) — (3) 130, 350 и 400 Вт/см^2 соотв. Р-ции (1), (2) протекают с колич. конверсией CO и SO_2 от одного импульса излучения и сопровождаются видимым свечением. Выход N_2F_4 в р-ции (3) растет с числом импульсов излучения, достигая за 300 импульсов 80% при квантовом выходе 10^{-2} . На основе термоди-

колебат.
возбужд.
масскул.

Х. 1978 N 16

налич. расчетов предполагается, что в р-циях участвуют колебательно-возбужденные молекулы NF_3 .

Г. В. Шмерлинг

1948

NF₃PF₃numerical
6 errors

89: 97448a G-intensity sum rule applications: XY₃ molecules. Bruns, Roy E.; Bassi, A. B. M. S. (Inst. Quim., Univ. Estad. Campinas, Campinas, Brazil). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(12), 5448-50 (Eng). Using the pyramidal XY₃ (X = N, P; Y = H, F) mols. as examples, the G-intensity sum rule of B. L. Crawford (1952), expressed in terms of effective charges, is shown to be an effective test of the numerical results of vibrational analyses. Errors in previously reported effective charge values for NF₃ and PF₃ are cor. Values for the as yet unreported polar tensors of these mols. are presented. Comparisons of these results with those previously reported for other mols. are made.

①

CA: 1948, 80, N12

1948

Cordeman R.R. et al
Inorg. Chem., 1948, 17,
N6, 1585-88

NF₃

Am+

20



(See PF₃;) III

NF₃

J.
Kopelman,
Nov 5

88: 112828z The Raman spectrum of nitrogen trifluoride: Coriolis coupling and transition dipole interaction in the liquid. Gilbert, M.; Nectoux, P.; Drifford, M. (Serv. Chim. Phys., CEN Saclay, Gif-sur-Yvette, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(2), 679-81 (Eng). First order Coriolis coupling in an e-symmetry mode of a sym. top and its consequences on the assocd. Raman line in the liq. were investigated for classical rotations and a classical harmonic vibration. Except for quantum asymmetries, the overall features of the Raman line are reproduced. The 2nd and 4th classical moments of the e-symmetry Raman line are given together with an expression of the linewidth for Debye diffusion. The relevant autocorrelation function $\langle Tr\beta(0)\beta(t) \rangle$ was obtained for free rotation and J rotational diffusion. The Raman spectrum of gaseous NF₃ was recorded and the band contours of $\nu_3(e)$ and $\nu_4(e)$ were analyzed to det. the intensity ratio between the contributions of γ_{+1} and γ_{+2} . The Raman profiles were studied in the plastic crystal and in the liq. between 60 and 185 K. The intense IR lines $\nu_1(a_1)$ and $\nu_3(e)$ show complex structures made up of 2 peaks at low temp. similar to the LO-TO structures of the intense IR lines of crystals and which are due to a particularly strong transition dipole coupling. The sepn. between peaks, which is proportional to the integrated IR intensity of the lines, can be reasonably well predicted by the theory of cubic crystals. The isotropic part of

1978
6038
mmmm

CA, 1978, 88, 116

ν_1 loses its pseudo-LO-TO structure >100 K and narrows as the temp. increases, due to rotational averaging of transition dipole couplings. The weak IR lines $\nu_2(a_1)$ and $\nu_4(e)$ have temp.-sensitive, sym. Raman spectra which were analyzed in terms of mol. rotations. The NF_3 mols. rotate more easily about the main axis with a ratio between the mean angles $\Phi_{\parallel}$ and $\Phi_{\perp}$ of rotation about the main axis and the other axis, resp., equal to ~ 3 at 78 K. The Coriolis perturbation reduces the contribution of the spinning motion to the linewidth of ν_4 , by a factor of 3 owing to the large value of the Coriolis const. $\zeta_4 = -0.895$.

NF_3

(те; об)

спектр
к. р., ж.

2-1973, N/3

1078
13 Б184. Спектр комбинационного рассеяния NF_3 .
Кориолисово взаимодействие и взаимодействие моментов переходов в жидком состоянии. Gilbert M., Nestoux P., Drifford M. The Raman spectrum of NF_3 : Coriolis coupling and transition dipole interaction in the liquid. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 2, 679—691 (англ.)
Теоретически рассмотрен вопрос о проявлении кориолисова взаимодействия для колебаний e -типа молекул типа симм. волчка. Найдено выражение, описывающее форму контура линии КР, относящейся к колебаниям e -типа. Получены спектры КР и ИК-поглощения NF_3 в газ., жидк. и крист. (пластич. кристалл) состоянии. Линии, относящиеся к кол. $\nu_1(a_1)$ и $\nu_3(e)$ при низких T -рах имеют структуру аналогичную структуре при TO—LO -расщеплении, что указывает на сильное взаимодействие моментов переходов; величина расщепления пропорциональна интенсивности полос ИК-поглощения (как в куб. кристалле). Повышение T -ры приводит к усреднению межмолек. взаимодействий и сужению линии, относящейся к колебанию ν_1 . В рамках представлений о периориентац. движениях молекул проанализирована T -зависимость контуров линий спектра ИК-поглощения, относящихся к колебаниям $\nu_2(a_1)$ и $\nu_4(e)$.
А. В. Бобров

6038
отмечен

№ 53

выпущен 6038

1948

спектр
К.Р., Д.

8 Д429. Спектр комбинационного рассеяния NF_3 : кориолисово взаимодействие и взаимодействие переходных диполей в жидкости. Gilbert M., Nestoux P., Drifford M. The Raman spectrum of NF_3 : Coriolis coupling and transition dipole interaction in the liquid. «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 2, 679—691 (англ.)

Получены спектры комб. рас. NF_3 в области основных полос в газовой (3 атм, 300° K), жидкой фазах и фазе пластич. кристалла в интервале т-р 60—185° K. При переходе от жидкости к кристаллу скачкообразных изменений в спектре не наблюдалось. Показано, что на форму полос ν_2 типа A_1 и ν_4 типа E, малоинтенсивных в спектре ИК-поглощения, существенно влияет вращательное движение молекул, которое при низких т-рах можно описать моделью дебаевской диффузии, а при высоких — моделью J-диффузии. Сложная форма полос $\nu_1(A_1)$ и $\nu_3(E)$ приписана проявлению продольных и поперечных квазикристаллич. колебаний. Рассчитанная по ф-лам для кубич. кристалла структу-

ср. 1943, № 8

ра этих полос удовлетворительно согласуется с наблюдаемой. Показано, что причиной квазикристаллич. поведения жидкой фазы NF_3 является сильное взаимодействие переходных дипольных моментов, которые очень велики для колебаний ν_1 и ν_3 . Для объяснения некоторых деталей контуров исследованных полос развита теория кориолисова взаимодействия 1-го порядка колебаний E симметричного волчка, совершающего классич. вращение и гармонич. колебание. Получены выражения для 2-го и 4-го вращательных моментов полос вырожденных колебаний. Библи. 63. М. Тонков



№ 3

1978
9 Б230. Спектры ЭПР катион-радикалов $^{14}\text{NF}_3^+$ и $^{15}\text{NF}_3^+$. Goldberg I. B., Crowe H. R., Christie K. O. Electron spin resonance of the $^{14}\text{NF}_3^+$ and $^{15}\text{NF}_3^+$ radical cations. «Inorg. Chem.», 1978, 17, № 11, 3189—3194 (англ.)

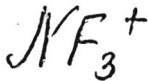
спектр
ЭПР

В интервале $t = 15$; 340 К исследованы спектры ЭПР катион-радикалов $^{14}\text{NF}_3^+$ и $^{15}\text{NF}_3^+$. Катион-радикалы получали при γ -облучении солей NF_4^+ или при низкотемпературной УФ-фотолизе смесей $\text{NF}_3-\text{F}_2-\text{AsF}_5$; $\text{NF}_3-\text{I}_2-\text{BF}_3$. Анизотропия спектров NF_3^+ при повышении t -ры значительно уменьшается. Спектры при высоких t -рах свидетельствуют об аксиальной симметрии катион-радикалов. При анализе спектров применяли сопоставление эксперим. спектров с рассчитанными на ЭВМ. Определены параметры спин-гамильтониана спектров ЭПР $^{14}\text{NF}_3^+$ при 26 К: $g_{\parallel} = 2,003$; $g_{\perp} = 2,006$; $g_{\text{изо}} =$

2.1979/19

$= 2,005$; $\tilde{a}_{\parallel}(\text{F}) = 30,8$; $a_{\perp}(\text{F}) = (-)3,3$; $a_{\parallel}(\text{N}) = 11,49$;
 $a_{\perp}(\text{N}) = 7,8$; $a_{\text{изо}}(\text{F}) = 8,1$; $a_{\text{изо}}(\text{N}) = 9,0$ мТ и при 240 К:
 $g_{\parallel} = 2,0073$; $g_{\perp} = 2,0040$; $g_{\text{изо}} = 2,0051$; $a_{\parallel}(\text{F}) = 2,00$;
 $a_{\perp}(\text{F}) = 12,48$; $a_{\parallel}(\text{N}) = 8,70$; $a_{\perp}(\text{N}) = 9,36$; $a_{\text{изо}}(\text{F}) =$
 $= 8,99$; $a_{\text{изо}}(\text{N}) = 9,14$ мТ. Определены также парамет-
 ры спин-гамильтонна спектров катион-радикалов
 $^{15}\text{NF}_3^{+\cdot}$. Оценено распределение спиновой плотности в
 $\text{NF}_3^{+\cdot}$ и обсуждается их структура. $\text{NF}_3^{+\cdot}$ имеют пи-
 рамидальную структуру, однако, степень пирамидаль-
 ности уменьшается в след. последовательности изо-
 электронных радикалов: $\text{BF}_3^{-\cdot}$; $\text{CF}_3^{\cdot}$; $\text{NF}_3^{+\cdot}$. В. В. Жуков

1978



infrared;
D. A. Crowe
permanence.

C.A. 1978, 80,
N24

S9: 206909z Electron spin resonance spectra of the $^{14}\text{NF}_3^+$ and $^{15}\text{NF}_3^+$ radical cations. Goldberg, I. B.; Crowe, H. R.; Christe, K. O. (Rockwell Int. Sci. Cent., Thousand Oaks, Calif.). *Inorg. Chem.* 1978, 17(11), 3189-94 (Eng). The ESR spectra of the $^{14}\text{NF}_3$ and $^{15}\text{NF}_3$ radical cations were obsd. over the temp. range 15-340 K. The radical cations were generated either by γ irradiation of NF_4^+ salts or by low-temp. UV photolysis of NF_3 - F_2 -Lewis acid mixts. For NF_3 , 2 different types of spectra were obsd. At the lower temps., a highly anisotropic spectrum was obtained which is attributed to a rigid radical. At the higher temps., a more isotropic spectrum was obsd. which is attributed to NF_3 of axial symmetry. At the lower temps., a highly anisotropic spectrum was obtained which is attributed to a rigid radical. At the higher temps., a more isotropic spectrum was obsd. which is attributed to NF_3 of axial symmetry. An anal. of the obsd. spectra was carried out and was supported by computer simulations and the obsd. ^{15}N isotopic data. The previously reported value of the isotropic F hyperfine splitting is incorrect. The resulting spin d. distributions indicate that NF_3^+ is pyramidal but that within the isoelectronic series BF_3^+ , CF_3^+ , NF_3^+ the planarity of the radicals increases from BF_3^+ toward NF_3^+ .

№ 73

Стена 6316, XIII-4302 1978

10 Д148. Расчеты изменений в значениях среднеквадратичных амплитуд некоторых пирамидальных молекул типа XY_3 . Ramaswamy K., Palaniappan P. Rm. On the calculation of the change in the mean-square amplitude values of some XY_3 pyramidal type molecules. «Acta phys. pol.», 1978, A53, № 4, 613—618 (англ.)

Расчет
ср. квадр.
амплит.
колебаний

Метод Цивина, позволяющий рассчитывать матрицу среднеквадратичных амплитуд колебаний молекулы по известной матрице средних амплитуд колебаний родственной ей молекулы, применен для расчета среднеквадратичных амплитуд колебаний молекул NF_3 , AsF_3 , PH_3 , AsH_3 , NH_3 и SbH_3 . Рассчитанные значения среднеквадратичных амплитуд хорошо согласуются с значениями, найденными методом газовой электронографии.

А. Дементьев

(43) X

ср. 1978, № 10

Оттиск

6316

1948

NF₃

22 Б61. К расчету изменения в значениях средне-
квадратичных амплитуд некоторых пирамидальных мо-
лекул типа XY₃. Ramaswamy K., Palaniar-
an P. I. Rm. On the calculation of the change in the
mean-square amplitude values of some XY₃ pyramidal
type molecules. «Acta phys. pol.», 1978, A53, № 4,
613—618 (англ.)

Для пирамидальных молекул NF₃, AsF₃, PH₃, AsH₃,
NH₃ и SbH₃ с помощью предложенного ранее метода
(см. «Acta Phys. Pol.», 1977, A51, 777) рассчитаны из-
менения среднеквадратичных амплитуд при переходе от
одной молекулы этого ряда к другой, и результаты
сопоставлены с электронографич. данными. На основа-
нии полученных среднеквадратичных амплитуд колеба-
ний методом параметрич. представления найдены на-
боры силовых постоянных. Рассчитанные величины со-
поставлены с соотв-щими силовыми полями, вычислен-
ными ранее из постоянных кориолисова взаимодействия,
постоянных вращательного искажения и средних ам-
плитуд колебаний, а также с силовыми полями, найден-

□

2-1978, N22

XIII - 4302

ными др. авторами. С целью дополнительной проверки
указанного метода для перечисленных молекул рассчиты-
ваны постоянные вращательного искажения D_j , D_{jk}
и D_k , постоянные кориолисова взаимодействия ξ_3 и ξ_4
и частоты нек-рых изотопозамещенных молекул ($^{15}\text{NF}_3$,
 NL_3 , PD_3 , AsD_3 , SbD_3). Отмечено хорошее согласие всех
рассчитанных молек. параметров с эксперим. данными.

Ю. Н. Панченко

рич.
ент

NF₃

1949

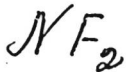
Chen C.

Int. J. Quantum Chem., 1980
18, N1, 199-204.

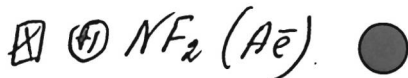
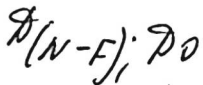
125.000.
pwr.

cur. NF-III

1979



92: 1156an Mass-spectrometric study of nitrogen trifluoride by electronic impact. Dudin, A. V.; Baluev, A. V.; Gorokhov, L. N. (Inst. Nov. Khim. Probl., Chernogolovka, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim.* 1979, (10), 2172-7 (Russ). From mass spectral data, the electron-impact ionization of NF_3 with formation of pos. and neg. ions was studied, and the appearance potentials and initial kinetic energies of the ions were detd.; the N-F bond energies, the heat of dissociation of NF_3 , and the electron affinity of the radical NF_2 were calcd.



C. A. 1980.92, N2

NF₃

Commen 9315 | 1979

механика
взаимо-
дейст-

Jameson C. F.; et al.

J. Phys. Chem., 1979,
83 (26), 3372-78.

NF₃

1979

Крутков А. Ф. и др.

(1 Vc)

Изв. Всес. учеб. завес.
1979, 22 (7), 901-2.

(сост. АС F₃; III)

NF
3

(21712) в журнале Hargittai

1949

17 B25. Исследование базиса в модели отталкивания электронных пар валентной оболочки путем эмпирического расчета изменений геометрии в рядах тетраэдрических и родственных молекул. Schmiedekamp Ann, Cruickshank D. W. J., Skaarup Steen, Pulay Péter, Hargittai István, Boggs James E. Investigation of the basis of the valence shell electron pair repulsion model by ab initio calculation of geometry variations in a series of tetrahedral and related molecules. «J. Amer. Chem. Soc.», 1979, 101, № 8, 2002—2010 (англ.)

2-я геометр.

В рамках модели отталкивания электронных пар валентной оболочки, проведены неэмпирич. расчеты равновесной геометрии (NH_3) , NF_3 , H_2O , F_2O , PH_3 , PF_3 , SH_2 , SF_2 , SO_2 , SO_2F , SOH_2 , SO_2H_2 , HSF , SH_3^+ , NH_2^- , NF_2^- и NH_4^+ . Использован базис сгруппированных гауссовых ф-ций $(7,3,1) \rightarrow [5,3,1]$ N, O, $(10,6,1) \rightarrow [7,4,1]$ P, S и 3 s-AO H (базис spd), а также полученный из него исключением d-ф-ций (базис sp). Геометрия молекул оптимизирована градиентным методом. Результаты расчетов в базисе spd хорошо воспроизвели эксперим.

8287
оттиски

(+14) X

2.1949, N14

NF₃

ommunen N2 в науке
Hargittai

1979

Sriedewamp A.
et al.

кв. лех.
факт
конструкция

J. Amer. Chem. Soc.
1979, 101, p2002-10

NF₃

оттиск 8795

1979

So S. P.

Chem. Phys. Lett. 1979,
67, N2-3, 516-18.

р.б. мех.
процесс
вак.р.

coll. CF₃ + - III

5474-III

NF_3^+

ОТЧЕТ 8795

1979

S. S. P.

Chem. Phys. Lett., 1979,
64, N23, 515-18.

к.б. всех.
перевод.
вместе

XIII-4745

св. $CF_3^+ - III$