

NFH

HNF      Lide D.R.      1963  
(HNF<sub>2</sub>)      J. Chem. Phys., 1963, 38, 456.

HNF

XIII-1769

1966

1) 6 Д216. Спектр поглощения радикала HNF. Goodfriend P. L., Woods H. P. The absorption spectrum of the HNF radical. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 3, 258—261 (англ.)

Методом импульсного фотолиза и кинетич. спектроскопии исследован радикал HNF, генерированный импульсным освещением  $\text{HNF}_2$  в газовой фазе. Найдена сильная зависимость положения полос поглощения (4000—5000 Å) радикала HNF от эффекта изотопного замещения молекулы на дейтерий. Полосы поглощения отнесены к  ${}^2A' \leftarrow {}^2A''$ -переходу в HNF. А. Чибисов

09.1967. 68

HNF

XIII-1769

1966

импульсный  
фотолиз

13 B98. Спектр поглощения радикала HNF. Good-  
friend P. L., Woods H. P. The absorption spectrum of  
the HNF radical. «J. Molec. Spectrosc.», 1966, 20, № 3,  
258—261 (англ.)

Методом импульсного фотолиза и кинетич. спектро-  
скопии исследован радикал HNF, регенерированный в  
HNF<sub>2</sub> в газовой фазе. Радикал HNF поглощает в  
области 4000—5000 Å. Найдено сильное смещение  
полос поглощения при изотопном замещении H→D. По-  
лосы поглощения отнесены к <sup>2</sup>A'←<sup>2</sup>A''-переходу.

А. Чибисов

(+)

газ HNF<sub>2</sub> газа. 25-125°C

задержка = 0

высверла 10 к/мин

β=30 μ

X. 1967. 13

6. 1942-43

Им.  
работы  
спектр.  
Смесь  
HN<sup>14</sup>F

7 Д634. Получение и реакция атомов фтора в твердом теле. Колебательный и электронный спектр радикалов HNE. Jacob Marilyn E., Milligan Dolphus E. Production and reaction of atomic fluorine in solids. Vibrational and electronic spectra of the free radical HNE. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 1, 184—191 (англ.)

Исследованы спектры продуктов фотолиза смесей Ar : HN<sub>3</sub> (DN<sub>3</sub>, H<sup>15</sup>N<sup>14</sup>N<sup>2</sup>) и Ar : F<sub>2</sub>, осажденных на подложку при 14° K. Обнаружены радикалы H<sup>14</sup>NF, H<sup>15</sup>NF и D<sup>14</sup>NF, которые рассматриваются как продукты реакции между атомами F и радикалами NH, образующимися в результате облучения осадка ртутной лампой. Получены полосы поглощения с частотами 1000 и 1432 см<sup>-1</sup>, отно-

XIII - 1620

1967



Отмечен / 74

+1



X. 1967. 79

сящиеся к вал. кол.  $N-F$  и деф. кол. радикала  $H^{14}NF$  соответственно. Полосы поглощения в области 3900—5000 Å приписаны электронному переходу в этом радикале. Приведены силовые постоянные и термодинамич. ф-ции для  $HNF$ . Наблюдались также спектры радикалов  $NF$ ,  $NF_2$ ,  $HNF_2$ . Библ. 23. А. Беяева

HN<sup>14</sup>F

спектр  
в матрице,

Fi,  
сим. пост.,  
т. др.

16 Б91. Образование и реакции атомов фтора в твердом теле. Колебательный и электронный спектр свободных радикалов HNF. Jacox Marilyn E., Milligan Dolphus E. Production and reaction of atomic fluorine in solids. Vibrational and electronic spectra of the free radical HNF. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 1, 184—191 (англ.)

Исследованы спектры продуктов фотолиза смесей Ag · NH<sub>3</sub> (NH<sub>3</sub>, HN<sup>15</sup>N<sub>2</sub><sup>14</sup>) и Ag:F<sub>2</sub>, осажденных на подложку при 14° К. Обнаружены радикалы HN<sup>14</sup>F, HN<sup>15</sup>F и DN<sup>14</sup>F, к-рые рассматриваются, как продукты р-ции между атомами F и радикалами NH, образующимися в результате облучения. Получены полосы поглощения

1967

177

0591-1690  
XIII



X. 1967. 16



с частотами 1000 и 1432  $\text{см}^{-1}$ , относящиеся к вал. кол. N—F и деф. кол. радикала  $\text{H}^{14}\text{F}$  соотв. Полосы поглощения в области 3900—5000 Å приписаны электронному переходу в этом радикале. Приведены силовые постоянные и термодинамич. функции для  $\text{HNF}$ . Наблюдались также спектры радикалов  $\text{NF}$ ,  $\text{NF}_2$ ,  $\text{HNE}_2$

А. Беляева

H<sup>14</sup>NF  
H<sup>15</sup>NF

XIII - 1620

1967  
177

comp &  
nature

41954v Production and reaction of atomic fluorine in solids. Vibrational and electronic spectra of the free radical HNF. Marilyn E. Jacox and Dolphus E. Milligan (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 46(1), 184-91(1967) (Eng). The species H<sup>14</sup>NF, H<sup>15</sup>NF, and D<sup>14</sup>NF have been produced in an Ar matrix at 14°K. by the reaction of photolytically produced at. F with NH. Sufficient concns. of these species have been obtained for direct detection of 2 vibrational fundamentals, appearing at 1000 and 1432 cm.<sup>-1</sup> for H<sup>14</sup>NF, as well as of an electronic transition between 3900 and 5000 Å. involving a progression in the upper-state bending frequency. Force consts. and thermodynamic properties have been derived for HNF. Other species observed in these expts. include NF, NF<sub>2</sub>, and HNF<sub>2</sub>. Evidence is presented indicating that the H atom can be abstracted from HN<sub>3</sub> by at. F. RCJQ

+1

C.A. 1967-66-10

81

Watson J. H. G.

1964

Eniob

J. Chem. Phys., 1967, 46, 1935

7

HNF(103)



M. P.

NHF

Gordon M.S.

1968

расчет  
равнов.  
констр.

J. Chem. Phys.

1968, 49, N10, 4643-50

● (Cell  $\text{CH}_2$ , III)

HNF

XIII - 809

1970

61004n Absorption spectrum of HNF in the region 3800-5000 Å. Woodman, C. M. (Div. Pure Phys., Nat. Res. Counc. Canada, Ottawa, Ont.). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 33(2), 311-44 (Eng). An absorption spectrum occurring in the region 3800-5000 Å, obtained in the flash photolysis of  $\text{HNF}_2$ , was investigated at high resolu. The main conclusions of earlier workers are confirmed, namely that the absorption is due to a type-C transition of the HNF mol., which is bent in both ground and excited states. The bond angles for the 2 states are 105 and 125°, resp. Seven members of a progression in the upper-state bending frequency are obsd. Axis-switching effects accompanying the large change in bond angle generate prominent 'Q- and 'Q-branches. Most of the rotational lines are resolved into spin-doublets, and the splitting pattern provides an excellent example of the effects

checked  
upper  
unresolved  
photochem

870  
Dunmuck

C.A. 1970.

72.12

of spin-rotation interaction in a nearly-sym. top. The spin-rotation coupling consts. in the 2 states indicate that they correlate with the same  $^2\Pi$  state of the linear mol. The previously suggested possibility, that the off-diagonal elements of the spin-rotation coupling tensor might not be sym., is considered, and matrix elements for the skew-sym. part of the tensor are given. The 010-000 band shows evidence of rotational coupling between the vibrations  $\nu_2$  and  $\nu_3$  which is diagonal in  $N$  and  $K$  and proportional to  $K^2$ . The theory of this type of coupling is developed.

RCKP

HNF

8 Б92. Спектр поглощения HNF в области 3800—5000 Å. Woodman C. M. The absorption spectrum of HNF in the region 3800—5000 Å. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 33, № 2, 311—344 (англ.)

1970

ном.

структ.

Di

Исследован спектр поглощения продуктов импульсного фотолиза  $\text{HNF}_2$  в области 3800—5000 Å с высоким разрешением (не менее  $0,04 \text{ см}^{-1}$ ). В согласии с данными работы Гудфренда и Вудса (РЖХим, 1967, 13Б98) наблюдавшийся спектр отнесен электронному переходу  $^2A' \leftarrow ^2A''$  (переход типа C) молекулы HNF (I). Найдена прогрессия семи полос с колебательным интервалом ( $1047\text{—}962 \text{ см}^{-1}$ ), соотв-щим частоте деф. кол.  $\nu_2$  в возбужденном электронном состоянии. Проведен вращательный анализ полосы 000—000 с учетом эффектов спин-вращательного взаимодействия, к-рым обусловлено дублетное расщепление большинства вращательных линий, и эффектов центробежного растяжения. Анализ вращательной структуры полосы 000—000 дает два набора вращательных постоянных I; приведенный ниже выбран

XIII-809  
отнесен 870

X. 1971. 8



(+1) Имм.

протокол ☒  
HNF<sub>2</sub>

на основании теоретич. расчета константы спин-вращательного взаимодействия  $\epsilon_{aa}$  (все величины даны в  $\text{см}^{-1}$ ): (состояние  $X^2A''$ )  $\epsilon_{aa} = -0,27 \pm 0,04$ ,  $A = 17,688 \pm 0,008$ ,  $B = 1,0389 \pm 0,0003$ ,  $C = 0,9777 \pm 0,0003$ ,  $\Delta_K = (3,1 \pm 0,3) \times 10^{-3}$ ,  $\Delta_{NK} = (0,141 \pm 0,016) \times 10^{-3}$ ,  $H_K = L_K = 0$ ; (состояние  $A^2A'$ )  $\epsilon_{aa} = 0,67 \pm 0,05$ ,  $A = 27\,570 \pm 0,005$ ,  $B = 1,0329 \pm 0,003$ ,  $C = 0,9920 \pm 0,0003$ ,  $\Delta_K = (38,1 \pm 0,3) \times 10^{-3}$ ,  $\Delta_{NK} = (0,136 \pm 0,011) \times 10^{-3}$ ,  $H_K = -(0,188 \pm 0,004) \times 10^{-3}$ ,  $L_K = (0,71 \pm 0,05) \times 10^{-6}$ , значение электронного терма  $T_{000} = 20141,26 \pm 0,01$ . Из величин вращательных постоянных системы 000—000 определены геометрич. параметры I в основном  $X^2A''$   $r(\text{N—H}) = 1,06$ ,  $r(\text{N—F}) = 1,37$  А,  $\angle \text{HNF} = 105^\circ$  и возбужденном  $A^2A'$   $r(\text{N—H}) = 1,03$ ,  $r(\text{N—F}) = 1,34$  А,  $\angle \text{HNF} = 125^\circ$  электронных состояниях (длина связи  $r(\text{N—H})$  была принята по аналогии с другими молекулами в обоих случаях). Проведен частичный вращательный анализ полосы 010—000. Для этой полосы обнаружено существование эффекта «вращательного резонансного взаимодействия второго порядка» (в номенклатуре Нильсена, Н. Н. Nielsen, Rev. Mod. Phys., 1951, 23, 90) обусловленного вращательным взаимодействием между колебаниями  $\nu_2$  и  $\nu_3$ . Рассмотрена теория резонансного взаимодействия этого типа. Большие изменения в величине валентного угла I для различных электронных состояний приводят к наблюдению в спектре характерных  $^6Q$  и  $^4Q$ -ветвей. Рассмотрение констант  $\epsilon_{aa}$  спин-вращательного взаимодействия для состояний  $X^2A''$  и  $A^2A'$  показывает, что они коррелируют с одним и тем же электронным состоянием  $^2\Pi$  линейной молекулы. Рассмотрено ранее высказанное Рейнсом (РЖХим, 1965, 24Б46) предположение о возможной несимметричности недиагональных элементов тензора спин-вращательного взаимодействия и приведены матричные элементы косо-симметрич. части гамильтониана спин-вращательного взаимодействия.

А. П. Александров.



HNF

HBF

Cm m u e e 1563

1973

XIII - 2343

41147y Electronic structure and geometry of fluoroamidogen and HBF. Brothie, Douglas A.; Thomson, Colin (Dep. Chem., Univ. St. Andrews, St. Andrews Fife, Scot.). *Chem. Phys. Lett.* 1973, 22(2), 338-43 (Eng). The results of ab initio calcns., making use of the restricted Hartree-Fock scheme, on HNF and the postulated species HBF are presented. Geometry predictions made, by using 3 different basis sets of gaussian orbitals are compared, and the bonding is discussed in terms of the Mulliken population anal. The structure of various low-lying excited states is also considered.

M. n.

Kb. m e x.

p a e r e m.

C.A. 1974. 80. N 8



HNF

XIII - 2343

1973

Электр.  
строение  
и геометр.

8 Б27. Электронное строение и геометрия HNF и HBF. Brothie Douglas A., Thomson C. O. In. The electronic structure and geometry of HNF and HBF. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 22, № 2, 338—343 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО проведены расчеты радикалов HNF и HBF. Использовано 3 различных по длине базисных набора гауссовских функций: (5, 2/2), (7, 3/3) и (9, 5/4). Получены следующие равновесные значения геометрич. параметров. Для молекулы HNF в электронном состоянии  $^2A'$ :  $R(\text{H}-\text{N}) = 2,20$  ат. ед.,  $\theta = 103^\circ$ ,  $R(\text{N}-\text{F}) = 2,61$  ат. ед. в базисе (5, 2/2), а при переходе к наибольшему базису длина связи N—F возрастает до 2,66, а величина угла уменьшается до  $101^\circ$ . Отмечено

1563

X. 1974 N 8

+1



также, что уровень энергии, отвечающий однократно заполненной МО, лежит ниже дважды занятого уровня. Анализ заселенностей по Малликену указывает на поляризацию связи N—F вида  $N(+)-F(-)$ . Для HBF проведен аналогичный расчет, приводящий к след. равновесным геометрич. параметрам основного состояния:  $R(H-B)=2,25$  ат. ед.,  $\theta=121^\circ$ ,  $R(B-F)=2,50$  ат. ед. Кроме этого проведен расчет  $A^2A''(\pi)$ ,  $B^2A''$  и  $C^2A''$  возбужденных состояний молекулы HBF. Для возбужденных состояний получена равновесная геометрия и проведен анализ заселенностей. Рассчитанные характеристики молекул сопоставлены с известными данными для изоэлектронных молекул.

А. И. Дементьев

HNF

HBF

электр.  
строение

XIII - 2343  
оттиск 1563

1973

4 Д146. Электронное строение и геометрия HNF и HBF. Brotchie Douglas A., Thomson Colin. The electronic structure and geometry of HNF and HBF. «Chem. Phys. Lett.», 1973, 22, № 2, 338—343 (англ.)

Неэмпирическим ограниченным методом ССП МО ЛКАО исследовано электронное строение радикалов HNF (I) и гипотетич. соединения HBF (II). Использованы базисы гауссовых ф-ций: по 5 s-типа и 2 p-типа для атомов B, N и F и по 2 s-типа для атомов H (базис (5,2/2)), базис (7,3/3), оба сгруппированные в минимальный (2,1/1) и базис (9,5/4), сгруппированный в (4,3/2); последний по точности примерно соответствует двух-

(41) 12

ф. 1974 N 4

экспонентному слэтеровскому. Рассчитаны: равновесная геометрия, энергетич. характеристики и распределения электронной плотности, а для II рассмотрены также некоторые возбужденные состояния. Полученные результаты сопоставлены с данными аналогичных расчетов изоэлектронных систем:  $\text{NO}_2$  и  $\text{HCO}$ , а также  $\text{HVO}$  и  $\text{HCN}^-$ , и на их основе детально обсуждена природа химич. связи в I и II. Рассчитанная равновесная геометрия согласуется с опытными данными.

В. Л. Лебедев

BeH; BH<sup>+</sup>; BO; CN; CO<sup>+</sup>; N<sub>2</sub><sup>+</sup>; 1, E, 1973  
HN<sub>3</sub>; HO<sub>2</sub>; FO<sub>2</sub>; FCO; F<sub>2</sub>CN

Čásky P., Macháček M.,  
Zahradník R., 1x4377

Collect. Czech. Chem. Commun, 1973,  
38, N10, 3067-3073 (Russ.)

Open shell CNDO treatments on  
small inorganic radicals.

Бхе Хем, 1974, 5534 Осн 10 (Ф) 9

30711.8704  
TE, CH

NHF<sup>+</sup>

XIII-2218

1973

40771

2d. emp

\*

Harrison James R., Eakers Charles W.

Electronic structure of reactive intermediates. The nitrenium ions  $\text{NH}_2^+$ ,  $\text{NHF}^+$ , and  $\text{NF}_2^+$ .

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, N 11,  
3467-3472.

(англ.) 0913 шик

894 897

0906

С.И.Тараканов

$\text{NH}_2^+$ ; III

ВИНИТИ

HNF

Nakatsuji Hiroshi

1973

"J. Amer. Chem. Soc."

1973, 95, N2, 354-61.

рефер.

Синтез

"форма молекулы в осн. и возб. состояниях"

• (сер. BeH<sub>2</sub>; III)



$BH_2$ ;  $NH_2$ ;  $NHF$ ;  $BF_2$ ;  $NF_2$ ;  $NO_2$ ;  $HCF$ ;  $CF_2$ ;  $OF_2$ ;  $HNO$  ( $\bar{x}14054$  M.H., praeem) 1974

Brown R.D., Williams G.R., 4-4/64  
Chem. Phys., 1974, 3, N1, 19-34 (ann.)

Ab initio calculations on some  
small radicals by the unrestric-  
ted Hartree-Fock method.

Britus, 1974, 8A172

HO

Ⓢ

17

1974

ИИФ

Отчет по научно-исслед.  
работе ИВТАИ, тема №8

и.п.

"Периодичность св-ва  
аэрта водорода и их соедине  
ний"

$BH_2; BF_2; NF_2; CO_2^-; ClNO_2^-;$   
 $ClO_2; HCO; FCO; FBH; FNH;$   
 $XAB_2$

(вещ. сирокт.) 1974.  
 рачем  
 XI 4125

Takahata Y., Gu T., I' Haya Y. J.,

Chem. Phys. Lett., 1974, 26, N4, 557-  
 - 560 (англ.)

Why not use point charge models  
 for the determination of bond  
 angles?

Butcher, 1975, 1523

10

Ⓢ

17

ННФ

1976

Бедкова В.А. и др.

рук. деп. в ВУМВ  
№ 3679-76 деп.

(м.и.  
ссыл. посл.)

(ссыл. МСФ, III)

HNF

[Оттиск 16034]

1977

Бобкова В. А., Соло-  
монов В. Г.

Сред. иосит.,

Среднеквадр.  
амплитуды  
колебан.

Исхрм. прикл. спектро-  
скоп., 1977, 26, вып. 1,  
169 - 170.

NHF - number 6753 1978.

Hopkinson A. C.  
et al.

rev. sec.

fractet  
trans.

Int. J. Accant

chemistry. Chem., 1978, 13,

349- ● 366

CHMURK 7857

1979

HNF

11588

4.11

смерь

в пламени

90: 195082s An analysis of the hydrazine-fluorine flame. The  $A^2A' - X^2A''$ -emission spectrum of fluoroamidogen radical (HNF) and its relation to other HAB compounds. Lindsay, D. M.; Gole, J. L.; Lombardi, John R. (Coop. Inst. Res. Environ. Sci., Univ. Colorado, Boulder, Colo.). *Chem. Phys.* 1979, 37(3), 333-42 (Eng). The chemiluminescent reaction  $N_2H_4 + F_2$  is dominated by visible emission from  $NH^*(A^3\Pi - X^3\Sigma^-)$ ,  $HNF^*(A^2A' - X^2A'')$  and vibrationally excited  $HF^+(X^1\Sigma^+)$ . Possible mechanisms for formation of these species are discussed with ref. to previous results from similar flame reactions. The A-X emission spectrum of HNF contains the heretofore unreported progression  $(0,0,0) \rightarrow (0,\nu''_2,0)$  to vibrational levels  $\nu''_2 = 0-3$  of the  $X^2A''$  state. Each vibrational transition shows well resolved K-type subbands characteristic of a near sym. rotor. A partial rotational anal. gives band origins and effective rotational consts. for the 1st 4 vibrational levels of the ground state. The measured ground state vibrational consts. are  $\omega_0 = 1441.1 \pm 1.0$   $cm^{-1}$  with  $\omega_0 x_0 = 10.9 \pm 0.5$   $cm^{-1}$ . The substantial differences in the A-X emission spectra of HNF and its isoelectronic analog HOO are discussed as they relate to bonding trends in HAB mols. The concepts presented are extended to other HAB systems.

C.A. 1979, 90 N24

HNF

отмечено 7857

1979

8 Д623. Анализ фторгидразинового пламени. Полоса  $A^2A' - X^2A''$  в спектре испускания радикалов HNF и их сопоставление с другими соединениями типа HAB. Lindsay D. M., Gole J. L., Lombardi John R. An analysis of the hydrazine—fluorine flame. The  $A^2A' - X^2A''$  emission spectrum of HNF and its relation to other HAB compounds. «Chem. Phys.», 1979, 37, № 3, 333—342 (англ.)

Показано, что в хемилюминесцентной реакции  $N_2H_4 + F_2$  образуются главным образом излучающие в видимой области спектра радикалы  $NH(A^3\Pi - X^3\Sigma^-)$  и  $HNF(A^2A' - X^2A'')$  и колебательно-возбужденные молекулы  $HF(X^1\Sigma^+)$ . Обсуждены возможные механизмы образования этих продуктов. В спектре  $HNF(A-X)$  обнаружены до сих пор не наблюдавшиеся полосы прогрессии  $(0, 0, 0) - (0, v_2'', 0)$  с  $v_2'' = 0-3$ . Выполнен

М.Н.

отмечено 1979

Ф. 1949/18



411 вращательный анализ полос системы  $\text{HNF}(A-X)$ .  
Для основного состояния определены колебательные  
( $\nu_2''$ ) постоянные  $\omega_0 = (1441 \pm 1,0) \text{ см}^{-1}$  и  $\omega_0 \chi_0 = (10,9 \pm$   
 $\pm 0,5) \text{ см}^{-1}$ , а также вращательные постоянные четы-  
рех колебательных уровней  $\nu_2'' = 0-3$ . Показано, что  
радикал  $\text{HNF}$  является почти симметричным ротором.  
Обсуждены существенные различия спектров  $\text{HNF}(A-X)$   
и  $\text{HOO}(A-X)$ . Выводы распространены на другие  
радикалы типа  $\text{HAB}$ . Библ. 41. В. С. Иванов

HNF

оттиск 7857

1979

17 Б166. Анализ пламени гидразин-фтор. Спектр испускания  $\tilde{A}^2A' - \tilde{X}^2A''$  HNF и его связь с другими соединениями HAB. Lindsay D. M., Gole J. L., Lombardi John R. An analysis of the hydrazine-fluorine flame. The  $\tilde{A}^2A' - \tilde{X}^2A''$  emission spectrum of HNF and its relation to other HAB compounds. «Chem. Phys.», 1979, 37, № 3, 333—342 (англ.)

спектр  
переходов.

Измерены спектры хемилюминесценции, возникающие при р-ции сгорания гидразина во фторе. Наблюдаемые полосы отнесены к испусканию NH ( $A^3\Pi - X^3\Sigma^-$ ), HNF ( $\tilde{A}^2A' - \tilde{X}^2A''$ ) и колебательно возбужденного HF ( $X'\Sigma^+$ ). Предложен возможный механизм образования этих соединений при р-ции  $N_2H_4 + F_2$ . В спектре испускания HNF наблюдается прогрессия по частоте  $\nu_2$  возбужденного состояния, а также новая прогрессия по основному состоянию  $X^2A''$  ( $0, 0, 0 - 0, \nu_2'', 0$ ) с  $\nu_2 = 0, 1, 2, 3$ . Кроме того, наблюдается переход  $0, 1, 0 - 0, 1, 0$ . В каждом колебательном переходе хорошо разрешены подполосы К-типа, характерные для почти симм. волчка. Проведен:

оттиск 11588

X. 1979, N14

предварительный анализ колебательной структуры измеренных полос. Определены эффективные вращательные постоянные  $B''_{\text{эфф}}$  для  $v''=0, 1, 2, 3$ , равные  $15,8 \pm 0,9$ ,  $17,6 \pm 0,3$ ,  $19,2 \pm 0,6$ ,  $18,5 \pm 0,5$   $\text{см}^{-1}$  соотв. Определены также колебательные постоянные  $\omega_0 = 1441,1 \pm 1,0$   $\text{см}^{-1}$ ,  $\omega_0 X_0 = 10,9 \pm 0,5$   $\text{см}^{-1}$  и начало полосы  $T_{00} = 20141,6$   $\text{см}^{-1}$ . Обсуждены существенные различия в спектрах испускания  $A-X$  молекулы  $\text{HNF}$  и его изоэлектронного аналога  $\text{HOO}$ . В рамках теории МО и концепции электроотрицательности предложена схема, объясняющая наблюдаемые различия. Схема распространена на другие системы типа  $\text{HAB}$  и ее применимость показана на ряде примеров. С. Б. Осин

FNH

1980

Hinde Alan L. et al.

J. Comput. Chem. 1980, 1(2),  
118-28

rb. ex.  
page.



cell. Li - NH<sub>2</sub> - III

HNF

1981

6 Д633. Динамика реакций  $F + \text{HNCO}$  и  $F + \text{HNF}$ .  
The dynamics of the  $F/\text{HNCO}$  and  $F/\text{HNF}$  reactions.  
Sloan J. J., Watson D. G., Wright J. S. «Chem. Phys.», 1981, 63, № 3, 283—292 (англ.)

В области  $2500\text{—}4500\text{ см}^{-1}$  получены спектры хемилюминесценции молекул HF, являющихся продуктами газофазной реакции  $F + \text{HNCO} \rightarrow \text{HF}^*(v') + \text{NCO}$  (I). Описана методика получения и контроля чистоты паров HNCO. Поток атомов F получали в результате воздействия СВЧ-разряда на пары  $\text{CF}_4$ . Получены зависимости распределения молекул  $\text{HF}^*$  по колебательным уровням от скорости потоков исходных реагентов в интервале  $7\text{—}30\text{ мкмоль/с}$ . Помимо спектра испускания молекул HF, образующихся в реакции I, обнаружено испускание HF, отнесенное авторами к второй стадии двухступенчатой реакции  $F + \text{HNF} \rightarrow \text{HF}^*(v') + \text{NF}(X^3\Sigma^-)$ . Сравнение эксперим. результатов с ab initio-расчетами авторов позволили оценить теплоту образования радикала HNF:  $157\text{ ккал/моль}$ . Библ. 30.

М. Т.

 $\Delta H_f$ 

Ф. 1982, 18, IV

NMF

10M. 19632  
18901

1983

Dixit A. N.,

равновесн.  
геометр.,  
теорет.  
расчет.

Indian J. Pure and  
Appl. Phys., 1983, 21,  
542-543.

MNF

[Om. 16886]

1983

Farrell L., Pople J. A.,  
et al.

ab initio  
calculations

J. Phys. Chem., 1983,  
87, N 1, 79-82.

HNF

[Om. 18277]

1983

99: 184128w An ab initio study of the  $A^2A' - X^2A''$  vibronic transition in the free radical fluoroamidogen. Peric, Miljenko; Peyerimhoff, Sigrid D.; Buenker, Robert J. (Fac. Sci., Univ. Belgrade, 11001 Belgrade, Yugoslavia). *Can. J. Chem.* 1983, 61(11), 2500-5 (Eng). Potential energy curves for the 2 lowest electronic states  $X^2A''$  and  $A^2A'$  ( $^2\Pi$  in linear geometry) of HNF are calcd. employing CI. A vibrational anal. of the  $A^2A' - X^2A''$  transition is undertaken: stretching and bending modes are treated sep. but vibronic coupling and large-angle bending is taken into consideration explicitly. The various vibronic levels including their  $K$ -type structure are compared with measured data wherever available and the results indicate that the prediction of vibronic spectra in small mols. on the basis of purely ab initio data is now with reach.

номен.

поврхн., жм

уноу,

$A^2A' - X^2A''$  нрехг  
(ab initio паен)

с. А. 1983, 99, 122



HNF

Om. 18277

1983

5 Д128. Неэмпирическое изучение вибронного перехода  $A^2A' - X^2A''$  в свободном радикале HNF. An ab initio study of the  $A^2A' - X^2A''$  vibronic transition in the free radical HNF. Perić Miljenko, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «Can. J. Chem.», 1983, 61, № 11, 2500—2505 (англ.; рез. фр.)

расчет М.П.,  
И;

С использованием конфигурац. взаимодействия вычислены кривые потенц. энергии для двух самых нижних электронных состояний  $X^2A''$  и  $A^2A'$  ( $^2\Pi$  в линейной геометрии) свободного радикала HNF. Найденное значение разности энергий указанных состояний составляет  $20\,600\text{ см}^{-1}$ , согласно измерениям это значение  $20\,141\text{ см}^{-1}$ . В предположении, что колебания, ответственные за растяжение и за изгиб, не зависят друг от друга, выполнен колебательный анализ перехода  $A^2A' - X^2A''$ . При этом учтена связь электронных волн. ф-ций с вращением и колебаниями с большими амплитудами, соответствующими изгибу. Результаты расчета,

ср. 1984, 18, № 5

включая структуру перехода  $K$ -типа, хорошо согласуются с данными измерений. Незначительные различия наблюдаются лишь в распределении интенсивности. По мнению авторов, результаты указывают, что предсказание вибронной структуры спектров малых молекул на основе неэмпирич. расчетов является теперь выполнимой задачей. Библ. 22. Б. Д. Ф.

HNF

Om. 18277

1983

8 Б1022. Неэмпирическое исследование электронно-колебательного перехода  $A^2A' \rightarrow X^2A''$  для свободного радикала HNF. An ab initio study of the  $A^2A' \rightarrow X^2A''$  vibronic transition in the free radical HNF. Perić Miljenko, Peyerimhoff Sigrid D., Buenker Robert J. «Can. J. Chem.», 1983, 61, № 11, 2500—2505 (англ.; рез. фр.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к набору исходных конфигураций с отбором и экстраполяцией по энергии рассчитаны Пв потенциальной энергии молекулы HNF. Использованы базисные наборы Хузинаги—Даннинга, дополненные поляризац. орбиталями. Построены кривые зависимости энергии от валентного угла для состояний  $^2A''$  и  $^2A'$ , коррелирующих с состоянием  $^2\Pi$  линейной молекулы. Равновесные расстояния и энергия возбуждения  $T_e$  хорошо согласуются с эксперим. данными. Уровни энергии, отвечающие вал. кол., рассматриваемым независимо от деф. кол., рас-

$\nu_i, m \cdot \nu_i, \nu_i$

X. 1984, 19, N 8

считаны вариациям методом в базисе функций гармонического осциллятора. Дефекты рассмотрены с учетом электронно-колебательного взаимодействия в рамках приближения Хоугена—Банкера—Джонса. Вибронные уровни энергии сопоставлены с экспериментальными данными. Проведены также оценки факторов Франка—Кондона. Некоторые расхождения между экспериментальными и теоретическими энергиями объяснены недостаточным учетом связи с валовыми колебаниями. Тем не менее, общая картина спектра правильно передается данной теоретической моделью.

А. В. Немухин

HNF

1985

Lee H.Y., Jaffé' H.H.

Расчет  
геометр.  
структ.

J. Mol. Struct., 1985,  
123, N 3-4, Suppl.: Theo-  
chem, 24, N 3-4, 301-315.

●  
(сис.  $\text{BH}_2$  ; III)

UNF

[OM 24345]

1985

Perić M., Peyerimhoff S. D.,  
et al.,

ab initio  
расчет  
энергетика  
Рейнер-  
Темпера

Int. Rev. Phys. Chem.,  
1985, 4, N 2, 85-124.



HNF

1987

106: 220294w Evaluation of partition functions of triatomic molecules using data obtained by ab initio calculations - sums of states of molecules with spatially degenerate lowest electronic states. Radic-Peric, Jelena; Peric, Miljenko (Inst. Phys. Chem., Fac. Sci., 11000 Belgrade, Yugoslavia). *Z. Naturforsch., A: Phys. Sci.* 1987, 42(1), 103-12 (Eng). A method for obtaining partition functions for triat. mols. (esp. those showing the Renner-Teller effect) is described, in which the required energy-level data are obtained from ab-initio calcns. Various approx. approaches for the calcns. of partition functions are explicitly considered. Results are given for HNF, NCO, and BH<sub>2</sub>.

(сумма по  
состояниям)

(72) 

C.A. 1987, 106, N26

FHN  
(MNF)

[Om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti; J. Phys. and Chem. Ref.  
Di; Data, 1988, 17, N 2, 303.



ННФ

[30 353]

1988

Краснов К. С.,  
Рыжикова Н. В.,

и. н.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. N 378-ХП-86,  
Черкассы, 1988.



УНФ

1992

719 Б1276. Спектроскопия и динамика возбужденного состояния молекул HNF (DNF). Spectroscopy and excited state dynamics of the HNF (DNF) molecule /Chen Jing, Dagdigian P. J. //J. Chem. Phys. .—1992 .—96 ,№ 10 .—С. 7333—7343 .—Англ.

Методом спектроскопии лазерного возбуждения ФЛ зарегистрированы молекулы HNF (DNF), получающиеся по реакции  $F + HN_3(DN_3) \rightarrow HNF(DNF) + N_2$ . Наблюдали полосы  $(0, v'_2=0-6, 0) \rightarrow (000)$  перехода  $A^2A' - X^2A''$  (область 400—500 нм). В случае DNF идентифицированы также полосы  $(021) \rightarrow (000)$  и  $(031) \rightarrow (000)$  и рассчитаны следующие молек. постоянные (в  $cm^{-1}$ ):  $T_{00}=20168,4$ ,  $\omega_2+0,5x_{12}=837,4$ ,  $x_{22}=-6,5$ ,  $\omega_3+2x_{33}+0,5x_{13}=1124$ ,  $x_{23}=-8,8$ . Выполнен частичный анализ вращат. структуры полос DNF и получены след. значения колебательно-усредненных геометрич. параметров  $R(NH)$ ,  $R(NF)$  (в Å) и  $\angle H(D)F$ : состояние  $\bar{X}_2A''-1,09$ ; 1,364;  $109^\circ$ ; состояние  $\bar{A}^2A'-1,01$ ;

М.А.

Х. 1993, N 19

1,343; 124°. С ростом  $v'_2$  К-структура полос упрощается. Измерены излучат. времена жизни ( $\tau$ ) уровней  $(0, v'_2=0-4, 0)$  HNF и  $(0, v'_2=0-6, 0)$ ,  $(021)$ ,  $(031)$  DNF,  $\tau$  зависят от  $v'_2$ , а также от  $N'$  и  $K'$ . Скорость распада уровней в исследуемой области, пропорциональная приблизительно  $v^3$ , скачкообразно увеличивается при энергиях выше  $23\,800 \cdot 500 \text{ см}^{-1}$  (относительно  $\tilde{X}^2A''(000)$ ). Это объясняется наличием канала преддиссоциации, напр., с образованием  $NH(X^3\Sigma^-) + F(^2P)$  или  $NF(X^3\Sigma^-) + H(^2S)$ . Оценена теплота образования  $\Delta H^\circ_0(\text{HNF}) = 149 \pm 7 \text{ кДж/моль}$ . Основное и возбужденное электронные состояние HNF образуют реннер-теллеровскую пару (при линейной геометрии их энергии совпадают). Динамика возбужденных состояний HNF (DNF) сопоставлена с данными по хорошо исследованным реннер-теллеровским молекулам HCO и HNO. Библ. 31.

В. М. Ковба

HNF

1992

laser-based F/HN<sub>3</sub> -  
DNF.(A<sup>2</sup>A' - X<sup>2</sup>A'')

④ DNF

C. A. 1992, 117,  
N2

117: 16429s Spectroscopy and excited state dynamics of the fluoroamidogen(deutero fluoroamidogen) molecule. Chen, Jing; Dagdigan, Paul J. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Chem. Phys.* 1992, 96(10), 7333-43 (Eng). Laser fluorescence excitation was employed to detect HNF and its isotopomer DNF in the F/HN<sub>3</sub>(DN<sub>3</sub>) system. The observation of this mol. in the F + HN<sub>3</sub> reaction has confirmed that this reaction proceeds to form HNF + N<sub>2</sub>, as well as the well-known HF + N<sub>3</sub> products. Laser fluorescence excitation scans were taken for a no. of HNF and DNF A<sup>2</sup>A'(0,  $\nu_1$ , 0) - X<sup>2</sup>A''(0,0,0) bands. For DNF, excitation of the A (0,2,1) and (0,3,1) levels were also detected. A partial rotational anal. of the DNF bands was carried out. With the derived A rotational consts. and previously detd. HNF rotational consts., it was possible to derive ground and excited state vibrationally averaged geometries. The K structure of the bands was obsd. to become simpler with increasing  $\nu_1$ , reflecting the redn. in the highest K' levels observable by fluorescence excitation. Decay lifetimes for variety of HNF and DNF A<sup>2</sup>A' excited levels were detd. It was found that the decay rate, scaled approx. by the  $\omega$  factor, increases abruptly at an energy of  $23,800 \pm 500$  cm<sup>-1</sup> above the HNF (X<sup>2</sup>A'') zero-point level. This threshold is tentatively assigned to the onset of a predissocn. channel. The ground and excited states of HNF form a Renner-Teller pair, whose energies become degenerate at linear geometries. The excited state dynamics of HNF (DNF) is compared with the dynamics of the well-studied Renner-Teller mols. HCO and HNO.

1993

HNF

DNF

$$(A^2A' - X^2A'')$$

$$(\omega_c)$$

119: 258784n Spectrally resolved fluorescence in the fluoroamidogen (HNF, DNF)  $A^2A' - X^2A''$  band system. Chen, Jing; Dagdigan, Paul J. (Department of Chemistry, The Johns Hopkins University, Baltimore, MD 21218 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 213(5-6), 586-92 (Eng). Selectively detected fluorescence excitation spectra have been employed to find and assign Q-type subband heads in the HNF  $A^2A' - X^2A''$   $2^1_03^1_0$  and  $2^2_03^1_0$  bands, which are obscured because of the near equality of the  $\omega'_2$  and  $\omega'_3$  vibrational frequencies by the stronger  $2^2_0$  and  $2^3_0$  bands, resp. A no. of previously unobserved heads in the corresponding DNF band system are also reported. Dispersed fluorescence spectra were also taken for excitation of a variety of HNF and DNF  $A^2A'$  vibrational levels, and the energies of vibrational levels in their ground  $X^2A''$  electronic states were derived. These energies were fit to det. vibrational consts. The following values (in  $\text{cm}^{-1}$ ) were derived for the harmonic consts.  $\omega_1^{0''}$ ,  $\omega_2^{0''}$ , and  $\omega_3^{0''}$ : 3167(6), 1455(2), 1036(7) for HNF and 2339(4), 1084(3), 1013(6) for DNF.

C.A. 1993, 119, N 24

$NHF^+$

1993

Loeb A., Frenking R.,

численные  
вычисления  
и

Bull. Chem. Soc. Jpn.,  
1993, 66 (11), 3153-65

пример  
составлен,  
теоретический  
расчет

(an.  $NF_2^+$ , III)

HNF

Om 37591

1994

21 Б1197. Преддиссоциация в состоянии  $\tilde{A}^2A'$  HNF (DNF). Спектроскопия возбуждения фотофрагмента NH(ND). Predissociation in the  $\tilde{A}^2A'$  state of HNF (DNF): NH (ND) Photofragment excitation spectroscopy /Chen Jing, Dagdigan P. J. //J. Chem. Phys. — 1994. — 100, № 7. — С. 4884—4893. — Англ.

д.н.

X. 1994, № 21

HNF

1997

ab initio  
Hacrm,  
Pugfem  
eocm,  
Do

✓ 128: 133816d Ab initio study of the potential energy surfaces for the valence and Rydberg doublet electronic states of HNF. Fang, Wei-Hai; Peric, M.; Peyerimhoff, S. D. (Wegelerstrasse 12, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Bonn, 53115 Bonn, Germany). *Chem. Phys.* 1997, 223(2,3), 119-129 (Eng), Elsevier Science B.V.. Results of large-scale CI calcns. of the bending and N-F stretching potential curves for the low-lying doublet electronic states of HNF are presented. Special attention is paid to the study on valence and Rydberg character of the electronic states as well as the disso. of HNF into NH and F atom.

CA. 1998, 128, N11