

Ni-N

V 1321

1951

$\text{CdSO}_4 \cdot 8/3\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$,
 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4(\text{NH}_3)_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$; $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$;
 $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$, $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (We.)

Matsumara O.

Met. Faculty Sci. Kynsyu Univ. 1951, 1B, 1-3
Infrared absorption bands of water of crystallization.

Chem. Abstr. 1952, 46, N10
4365i

J.

BP - V - 1064

1960

$Mn(N_2H_4)_2Cl_2, Fe(N_2H_4)_2Cl_2, Co(N_2H_4)_2Cl_2,$
 $Ni(N_2H_4)_2Cl_2; Cu(N_2H_4)_2Cl_2; Zn(N_2H_4)_2Cl_2$ (Vi.

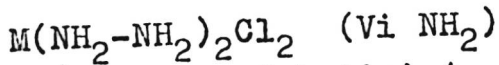
Sacconi L., Sabatini A.

Nature, 1960, 186, N 4724, 549

Ряд Ирвинга-Вильямса в расположении
металлов по частотам металл-тиланд в
некоторых комплексах с гидразинном

РХ., 1960, N 22, 87453

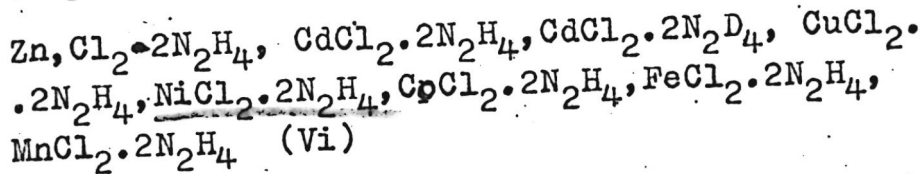
J



Sacconi L., Sabatini A.

Inorg. and Nucl. chem., 1963, 25, N 11, 1389-93

The infra-red spectra of metal (II) -hydrazine complexes.

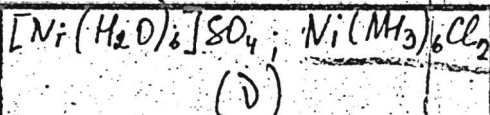


PJX, 1964, 165123

J.

50514.1513

Ch, Ph

1964
VI 3958

Ancarani Rossiello Laura. Spettri di luminescenza di complessi del nichel. "Ricerca scient.", 1964, Parte 2, Sez. A, 6, N 2, 437-442

(итал.; рез. франц., англ., нем.)

Есть оригинал

Рех, 1966, 3584

10

ВИНИТИ 788

A-677

1964



M=Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Cd, X=Cl, Br, I)

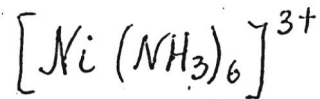


Sacconi L, Sabatini A., Gans P.

Inorgan. Chem, 1964, 3, N12, 1772-74.

Infrared spectra from 80 to 2000 cm^{-1}
of some metal-ammine complexes.

RX., 1965, 186159 J



A-679 | 1964

Terrasse J.M; Poulet H.

Mathies J.P.

(vib; c.n) "Spectrochim acta"

1964, 20, N3, 305-315

$Ni(NH_3)_3CS_3$

1985

16 Б213. Изучение неорганических соединений при помощи колебательных спектров. IX. Инфракрасные спектры $Ni(NH_3)_3CS_3$ и $Zn(NH_3)_2CS_3$. Krebs Bernt, Müller Achim. Schwingungsspektroskopische Untersuchungen anorganischer Festkörper. IX. Infrarotspektren von $Ni(NH_3)_3CS_3$ und $Zn(NH_3)_2CS_3$. «Z. Naturforsch.», 1965, 20a, № 12, 1664—1667 (нем.; рез. англ.)

Табулированы частоты ИК-спектров поглощения ($4000-300\text{ см}^{-1}$) кристаллич. образцов $Ni(NH_3)_3CS_3$, $Ni(ND_3)_3CS_3$, $Zn(NH_3)_2CS_3$ и $Zn(ND_3)_2CS_3$. Предложено отнесение полос поглощения и обсуждено положение частот по сравнению со спектрами нек-рых других комплексов амина и несвязанных комплексно тиокарбонатов. Сообщ. VIII см. РЖХим, 1966, 9Б143. Резюме

+1

X. 1987. 16



Vi, m-fürre nritpaung

V1-4028

1965

$(/Ni(NH_3)_6/X_2,$ $X=Cl-, Br-, I-, ClO_2-, BrO_3-,$
 $ClO_4-, NO_3-, SO_4^{2-}, S_2O_8^{2-}, C_2O_4^{2-},$
 $MoO_4^{2-}, WO_4^{2-}, SCN-)$

Viltange M.

Mikrochim.acta, 1965, N4, 609-20.

Stude des metallohexamines. II Etude par
thermogravimetric et spectrogr. d'absorption
infra-rouge des nickelo-hexamines.

RX., 1966, 13 174 J, Be

$Ni(NH_3)_6 X_2$ Bp - 4028 - VI 1965

$X = Cl^-, Br^-, I^-$ Viltange M.

$ClO_2^-, BrO_3^-, ClO_4^-$ Mikrochim Acta

$NO_3^-, SO_4^{2-}, S_2O_8^{2-}$ 1965, N⁴, 609-20.

$C_2O_4^{2-}, MoO_4^{2-}$

$WO_4^{2-}, SCN^-(I_1)$

A 673

1966

Vi (MX₂·2NH₃), *vgl* M=Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Cd, Hg, Pd,
Pt; X=Cl, Br, I.

M'(SCN)₂·2NH₃, *vgl* M'=Pd ili Pt)

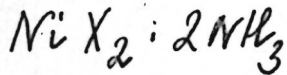
Clark R.J.H., Williams C.S.

J.Chem. Soc., 1966, AN 10, 1425-30

Infrared and electronic spectrae study of me-
tal-ammonia complexes.

PJX, 1967, 105204
J.

Cu. Pt.....) II



Clark R. F. H. 1966
Williams C.S. A-673



J. Chem. Soc., A, n 10,
1425.

ИК и элементарные
спектры анионо-катион-
ных комплексов ● метасиликатов.
(Сили. Рт ...) III

$Ni(NO_3)_2$

1968
20 Б231. Изучение тетрагидрата нитрата никеля методом ИК-спектроскопии. Gallezot P., Mathieu M. V., Weigel D., Imelik B. Etude du nitrate de nickel tetrahydrate par spectrometrie infrarouge. «Bull. Soc. chim. France», 1968, № 3, 882—885. (франц.; рез. англ.).

Изучение ИК-спектра тетрагидрата $Ni(NO_3)_2$ подтверждает результаты структурного анализа этого соединения. Отсутствие оси симметрии 3-го порядка иона нитрата объяснено существованием частично ковалентной связи между нитрат-ионами и атомом Ni, с которым они образуют координационную связь. Интерпретация наблюдаемых полос в ИК-спектре подтверждает эту гипотезу. Помимо этого, частоты вал. кол. молекул воды удовлетворительно совпадают с расчетными частотами, найденными для восьми расстояний O—H...O, определенных рентгенографич. методом. Резюме

VI-5416 -

г. 1968. 20

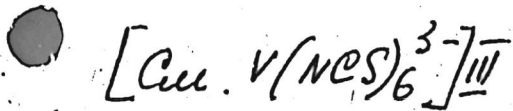


Clark R. Y. H.;
Goodwin A. D. Y.

1970

Di,
сис. ност.

Spectrochim. Acta,
Part A, 1970, 26, n2,
323.



$Ni(NO_3)_2$

1968

11 Д314. Исследование тетрагидрата нитрата никеля с помощью ИК-спектроскопии. Gallezot P., Mathieu M. V., Weigel D., Imelik B. Etude du nitrate de nickel tétrahydraté par spectrométrie infrarouge. «Bull. Soc. chim. France», 1968, № 3, 882—885 (франц.; рез. англ.)

Исследован ИК-спектр поглощения ($10\,000\text{--}400\text{ см}^{-1}$) тетрагидрата нитрата никеля. Подтверждены результаты, полученные с помощью структурного анализа. Обнаружено, что связи никель — ион нитрата в значительной степени ковалентны. Исследование вал. кол. воды, входящей в состав комплекса, показало наличие водородных связей. Положение полос поглощения вал. кол. воды соответствует частотам, вычисленным на основании восьми значений длин водородных связей, определенных рентгенографически. Библ. 11. А. Белозеров

09. 1968 . 110

фшц 829

1973

 $Ni(N_2)_n$

6 Д369. Комплексы переходных металлов с молекулярным азотом. I. Спектры комбинационного рассеяния, ИК-спектры, структура и связь в $Ni(N_2)_n$ и $Pd(N_2)_m$ ($n=1-4$, $m=1-3$), изолированных в матрицах. Huber H., Kündig E. P., Moskovits M., Ozin G. A.

Binary transition metal dinitrogen complexes. I. Matrix infrared and Raman spectra, structure, and bonding of $Ni(N_2)_n$ and $Pd(N_2)_m$ ($n=1-4$ and $m=1-3$). «J. Amer. Chem. Soc.», 1973, 95, № 2, 332-344 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния продуктов реакций, происходящих при одновременной конденсации Ni или Pd и N_2 (или смеси $N_2:Ar$) на подложку при 4,2—10°K. Анализ спектров в области вал. кол. азота показывает, что в системах $Ni(Pd):N_2:Ar$ существуют соединения $Ni(N_2)_n$ ($n=1-4$) и $Pd(N_2)_m$ ($m=1-3$). Проведено отнесение наблюдаемых частот и

 $Ni; c.n$

ф. 1973. № 6

(+1) Δ

показано, что наиболее стабильными комплексами являются $\text{Ni}(\text{N}_2)_4$ с симметрией T_d и $\text{Pd}(\text{N}_2)_3$ с симметрией D_{3h} . В системах $\text{Ni}(\text{Pd}) : \text{N}_2$ существуют только комплексы $\text{Ni}(\text{N}_2)_4$ и $\text{Pd}(\text{N}_2)_3$, однако их симметрия понижена до C_2 . В спектре $\text{Ni}(\text{N}_2)_4$ в Аг обнаружены полосы, соответствующие вал. кол. $\text{Ni}-\text{N}_2$: 303 и 283 см^{-1} в рассеянии и 283 см^{-1} в поглощении, что согласуется с симметрией молекулы T_d . Рассчитаны силовые постоянные и интенсивности ИК-спектра всех исследуемых молекул с различным изотопным составом. Библ. 22.

Ю. М. Л.

NiN₂

1973

117251j Matrix infrared spectroscopic evidence for end-on bonded dinitrogen in nickel monodinitrogen, NiN₂, and its relation to dinitrogen chemisorbed on nickel. Moskovits, M.; Ozin, G. A. (Erindale Coll., Univ. Toronto, Toronto, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1973, 58(3), 1251-2 (Eng). The matrix (Ar)

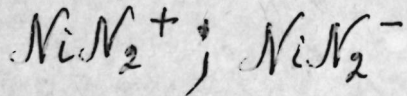
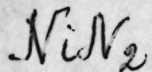
far-ir spectra of the product of cocondensation of Ni atoms with ¹⁴N₂, ¹⁴N¹⁵N, and ¹⁵N₂ indicated that only 1 N₂ mol. was bonded to 1 Ni atom in an end-on fashion. The force consts., f_{NiN} 2.38, f_{NN} 17.66, and $f_{\text{NiN.NN}}$ (stretch-stretch interaction) 0.26 mdyne/Å which are compatible with a modified valence force field approxn. were derived by assuming a linear triat. mol. The obsd. frequencies were 2020.6, 2053.6, 2057.4, and 2089.9 cm⁻¹ for Ni¹⁵N₂, Ni¹⁴N¹⁵N, Ni¹⁵N¹⁴N, and Ni¹⁴N₂, resp. Results are compared with literature data for N₂ adsorbed on Ni.

Ni; chem. info.

и.к. спект
в манускрипте

C.A. 1973, 78, 18

1973



Vinogradova, S.M. Borodko Yu.G.
Zh. Fiz. Khim. 1973, 47(4), 789-93.

Id. copyright
page

(comp. TiN_2 ; III)

1974

NiN_2

$Ni(N_2)_2$

структ.,

кв. мех.

расчет.

Братушко Ю. И.,
и др.

Приз. лит. метод.
Кооп. ж. и. ч. Методы
докл. Всесоюз. совещ.
5, 1974, Труд. 1974,
58-9.

Реш. NiO_2 ; III)

40329.4575

Ph, Te, Ch

31603 02
[Ni(NH₃)₆]²⁺

1974

1966

Müller A., Schmidt K.H., Vandrish G.

Vibrational spectra and pseudo-exact

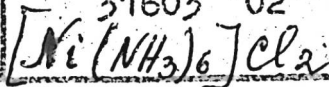
force constants of [Ni(NH₃)₆]²⁺, [Zn(NH₃)₄]²⁺, and [Zn(CN)₄]²⁻ with ⁵⁸Ni/⁶²Ni, ⁶⁴Zn/⁶⁸Zn and H/D isotopic subs-titution. "Spectrochim. acta", 1974, A30,
N 3, 651-663 (англ.)

060 061 067 0074 ВИНИТИ

40329.4575

Ph, Te, Ch

31603 02



1974.

1966

Müller A., Schmidt K.H., Vandrish G.

Vibrational spectra and pseudo-exact
force constants of $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$, $[\text{Zn}$ $(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, and $[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$ with ^{58}Ni
 ^{62}Ni , $^{64}\text{Zn}/^{68}\text{Zn}$ and H/D isotopic subs-stitution. "Spectrochim. acta", 1974, A30,
N 3, 651-663 (англ.)

060 061

067

0074

ВНИИТИ

Ni(N₂)₄

Tanzen H. B.

1974

Kb. Mex.
pacer

Chem. and Biochem.
Reactiv. Proc. Int. Symp.,
Jerusalem, 1973, Jerusalem,
1974, 199-205

Call BF ; III)

NiF_2NO

1974

и.к. спектр.
поиск новизны.
и.к.

Van Leirsburg D.A.
"J. Phys. Chem." 1974,
78, (2), 134-142

(см NiF_2CO ; III)

1974

$\text{Ni Cl}_2 \text{NO}_2$

И.К. спектр
полосы поглощения.

Van Leirsburg D.A.
"J. Phys. Chem." 1974,
78, (2), 134-142

● (all. $\text{Ni F}_2 \text{CO}$; III)

1974

$NiCl_2 \cdot N_2$

и.к. спектр

полосы поглощ.
и.к.

Van Leirsburg D.A.
"J. Phys. Chem." 1974,
78, (2), 134-142

● (all NiF_2CO ; III)

$NiF_2 \cdot N_2$

1974

и.к. спектр
полосе погло-
щения.

Van Leirsburg D.A.
"J. Phys. Chem." 1974,
78, (2), I34-I42

(см NiF_2CO ; III)

го кислорода у атома металла в комплексах MO_2 и $\text{M}(\text{O}_2)_2$ расширенным методом Хюккеля. Братушко Ю. И. «Теор. и эксперим. химия», 1975, 11, № 4, 461—469

Рассчитаны энергетич. характеристики и электронная структура координационных соединений никеля, кобальта и железа с молекулярным кислородом. Для сравнения проведен расчет соединений NiN_2 и $\text{Ni}(\text{N}_2)_2$. Для молекул MO_2 и NiN_2 рассчитаны конфигурации: перпендикулярная (C_{2v}), линейная ($C_{\infty v}$) и ряд промежуточных (C_s). Для координационных соединений $\text{M}(\text{O}_2)_2$ и $\text{Ni}(\text{N}_2)_2$ проведен расчет конфигураций — перпендикулярной плоской (D_{2h}), линейной ($D_{\infty h}$) и промежуточных (C_{2h}). В случае $\text{Ni}(\text{O}_2)_2$ рассчитаны также перпендикулярная неплоская (D_{2d}) и ряд угловых конфигураций симметрии C_2 . Для $\text{M}(\text{O}_2)_2$ энергетически наиболее выгодной оказалась перпендикулярная конфигурация D_{2h} , а для $\text{Ni}(\text{N}_2)_2$ — угловая C_2 ($\angle \text{Ni}-\text{N}-\text{N} \approx 120^\circ$). Установлено, что у комплексов NiO_2 и NiN_2 миним. энергия, характеризует угловые конфигурации C_s , но $\angle \text{Ni}-\text{O}-\text{O}$ ($\sim 105^\circ$) меньше, чем $\angle \text{Ni}-\text{N}-\text{N}$ ($\sim 120^\circ$). Расчет подтверждает, что для молекулярного кислорода предпочтительна близкая к «перпендикулярной» конфигурация, а для молекулярного азота — близкая к линейной. Библ. 21. Резюме

NiN_2

$\text{Ni}(\text{N}_2)_2$

расчет
геометр.

Ф 1976 N2

1975



MO_2
 $\text{M} = \text{Ni}$
 Co, Fe

(+3)

50624.1814

DB, TC, Ch

$Ni(N_2)_n$
48771
 $n = 1-4$

1975

*4-9295

Klotzbücher W., Ozin G.A. Binary transition metal dinitrogen complexes. III. Metal-nitrogen stretching modes of $Ni(N_2)_n$, $Pd(N_2)_m$, and $Pt(N_2)_m$ (where $n=1-4$ and $m=1-3$).

"J. Amer. Chem. Soc.", 1975, 97, N 10,
2672-2675

8390

365 367

0302

ВИНИТИ

1975

7 Б26. Природа активации молекулярного азота в комплексах. Захаров И. И., Авдеев В. И., Болдырев А. И. «Докл. АН СССР», 1975, 225, № 1, 126—129

На примере рассмотрения электронного строения бинарных комплексов NiN_2 и CoN_2 методом ССП МО ЛКАО в приближении ПДП показана возможность стабилизации ряда электронных состояний, характеризующихся различной активацией связи $N \equiv N$. Активная форма молек. азота соответствует состоянию комплекса, в котором промотирование электронов на $4p$ π -орбиталь металла способствует преобладанию π -акцепторных св-в азота и переносу электронной плотности на π_g^* -орбиталь N_2 . На основе анализа эксперим. и расчетных данных высказано предположение, что большинство синтезированных нитрогенильных (моноядерных) комплексов имеют электронное строение, для которого характерна неактивная форма азота. Автореферат

NiN_2
 CoN_2

Электр.
Строен.

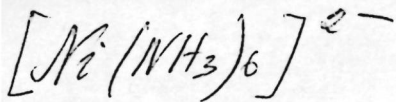
(+1) ☒

X1976 N7

$[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ (X-68 - 13535) 1976

55: 26869v Molecular vibrations of complexes with trigonal ligands. VII: Hexaammines with an octahedral skeleton, application to hexaamminenickel(2+). Cyvin, B. N.; Cyvin, S. J.; Schmidt, K. H.; Mueller, A.; Brunvoll, J. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund-Hombruch, Ger.). *J. Mol. Struct.* 1976, 32(2), 269-78 (Eng). A vibrational anal. is performed for $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$, which has an octahedral framework structure. The D_{3d} structure was assumed for the whole complex. Symmetry coordinates are given for all the vibrational modes, which are classified as (a) ligand vibrations, (b) ligand-framework couplings, and (c) framework vibrations. The correlations with the framework O_h and ligand C_{3v} symmetries are worked out. An approx. force field based on the ligand-framework correlated coordinates is developed. It reproduces satisfactorily the obsd. frequencies for 4 isotopic ions of $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$. Approx. calcs. for the point-mass model (XY_6) are compared with those of the whole complex. The validity of the point-mass model approx. is confirmed.

C. A. 1976, 85 N4



X4-17643

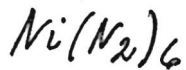
1976

Sanyal N.K; et al.

curr. note.

J. Phys., 1976, 50 A7

-659-67



Busby R. et al

1977

"Inorg. Chem.", 1977,
16, N4, 822-828.

У. К. Зеекмп.
спектр.



(см. $\text{Ti}(\text{CO})_6$) III

1978

$Ni_2(SN)_4$

89: 137720s Vibrational analysis of tetrasulfur tetranitride nickel(II). Rao, P. Bhaskara; Ramaswamy, A.; Agarwala, U. (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Kanpur, India). *Natl. Acad. Sci. Lett. (India)* 1978, 1(5), 169-70 (Eng). The normal coordinate anal. of tetrasulfur tetranitride Ni(II) was carried out using Uray Bradley force field and its vibrational bands were assigned.

Chem. Soc.

Ji

C.A., 1978, 89, N16

1978

NiN₂CoN₂FeN₂

NiCO

Nb. see X.
factor(13) ☒

C.A., 1978, 89 N 18

89: 153065n The interaction of the ligands dinitrogen and carbonyl with transition metals. Veillard, Helene (Univ. Louis-Pasteur, Strasbourg, Fr.). *Nouv. J. Chim.* 1978, 2(3), 215-24 (Eng). The total energies of several electronic states for the mols. NiN₂, CoN₂, FeN₂, NiCO, and TiCp₂N₂ (Cp = cyclopentadienyl ligand) were obtained in ab-initio LCAO-MO-SCF calcs. The bonding between the metal atom and the N₂ and CO ligands is discussed on the basis of the calcs. The ground states of NiN₂, CoN₂, and FeN₂, were assigned as triplet, quartet, and quintet states, resp. The sequence of electronic states of these mols. is detd. mainly by the σ -acceptor and π -donor characters at the metal level. The ground state of the hypothetical TiCp₂N₂ mol. corresponds to the configuration (21 a₁)²(14 b₁)²(7 a₂)²(11 b₂)². Hybridization effects at both the metal and ligand levels are important in the N₂ bonding. Neither side-on nor perpendicular coordination of the N₂ ligand appear energetically favorable. The isocarbonyl coordination metal-OC also appears energetically unfavorable.

000000 8957

1079

NiNO

kb. rec.
pccem

92: 99765n A theoretical investigation of the ground and core-hole states of linear and bent NiNO: a prototype for nitric oxide adsorbed on nickel. Clark, D. T.; Cromarty, B. J.; Scamellotti, A. (Dep. Chem., Univ. Durham, Durham, Engl. DH1 3LE). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 68(2-3), 420-5 (Eng). Nonempirical LCAO MO SCF calcns. within the Hartree-Fock formalism were performed on linear and bent configurations of NiNO (^2II) for the state arising from the Ni $3d^{10}$ configuration. Binding and relaxation energies are computed for the Ni atom, the free ligand (NO) and the prototype system NiNO. Comparison with available exptl. data reveals overall agreement for the shifts in core binding energies for the bent NiNO systems. The main contribution to these shifts is due to relaxation effects, which may be rationalized by ref. to at. population and bond overlap changes accompanying core ionization.

C.A. 1980, 22, 112

NiNO

вмтссс 8957

1979

расчет
полных
энергий
осн. сост.

4 Д198. Теоретическое исследование основного и дырочных остовных состояний линейной и изогнутой NiNO:прототипа NO, адсорбированного на никеле. A theoretical investigation of the ground and core-hole states of linear and bent NiNO. A prototype for NO adsorbed on nickel. Clark D. T., Cromarty B. J., Sgamellotti A. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2—3, 420—425 (англ.)

Неэмпирич. методом ССП в базисе ОСТ-6-33ГФ с включением поляризационных ф-ций (4d, 5s на Ni; 3d, на N и O) рассчитаны полные энергии основного электронного состояния молекулы NiNO и дырочных состояний соответствующего положит. иона, возникающих при удалении электрона с остовных МО. Расчет...

Ф.Р020 N4

ведены как для линейной, так и для двух изогнутых (17° , 34°) геометрич. структур NiNO при фиксированных межъядерных расстояниях. Определены энергии связи, энергии релаксации и орбитальные сдвиги, связанные с ионизацией типа Ni_{1s} , Ni_{2s} и O_{1s} в NO, Ni и NiNO. Проведенный анализ заселенностей указывает, что образование дырочных состояний NiNO связано со значительным переносом электронного заряда с атома никеля, за счет чего наблюдаются достаточно большие энергетич. сдвиги внутренних одноэлектронных уровней.

А. Дементьев

Оттиски 8957

1979

NiNO

10 Б31. Теоретическое исследование основного и осовно-ионизированных состояний линейной и изогнутой молекул NiNO, прототипов комплекса из NO, адсорбированного на Ni. Clark D. T., Cromarty B. J. Sgamellotti A. A theoretical investigation of the ground and core-hole states of linear and bent NiNO: a prototype for NO adsorbed on nickel. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2—3, 420—425 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО проведены расчеты молекулы NiNO для линейной и изогнутой (17,34°) геометрий. Использован базис OCT 6-33 ГФ с включением поляризац. функций. Для осовных АО использованы лучшие атомные одноэкспонентные функции Клементи—Раймонди, аппроксимированные 6 ГФ, для валентных использованы двухэкспонентные функции, каждая из к-рых аппроксимирована 3 ГФ. Поляризац. функции (4d, 5s для Ni и 3d для N и O) представлены каждой разложением по 3 ГФ. Расстояния Ni—N и N—O приняты соотв. 3,477 и 2,173 ат. ед. Расчеты сво-

кв. мех.
расчет

2.1980.1110

свободной молекулы NO проведены при эксперим. расстоянии $\sim (2,173)$. Расчеты проведены как для основного $^2\Pi$ (отвечающего конфигурации $3d^{10}Ni$) и для остовных дырочных состояний. Энергии ионизации оценены как разность полных энергий молекулы и иона, а также для сравнения, по «теореме Купманса», т. е. в приближении замороженного остова. Энергия связи по отношению к конфигурации $3d^{10}$ изолированного Ni найдена равной $-36,2$, $-36,5$ и $-36,4$ ккал/моль для линейной структуры, угла в 17 и 34° соотв. Сделан вывод, что без учета корреляц. эффектов нельзя давать определенных структурных предсказаний, поскольку разности энергий очень малы. Рассчитанные энергии связи остовных электронов свободных Ni и NO, а также NiNO сопоставлены с эксперим. данными и найдено, что в целом рассчитанные сдвиги лучше согласуются с экспериментом в случае изогнутой формы. Проанализирована природа релаксац. эффектов, к-рые сопоставлены с рассчитанными изменениями заселенностей электронных атомов и связей, обусловленными ионизацией.

А. Багатурьянц

1979

$Ni(NH_3)_6Cl_2$ 20 Б658. Протонный [магнитный] резонанс и структура хлорида гексааммиаката никеля. Svare I., Skjæveland S. M. Proton resonance and structure of nickel hexamine chloride. «J. Magn. Reson.», 1979, 34, № 1, 97—102. (англ.)

Спектр ПМР. Изучены спектры ПМР (17,75 МГц) монокрист. образца $Ni(NH_3)_6Cl_2$ при параллельной ориентации оси [100] внешнему полю H_0 при т-рах 1,4—20° К. Найдено, что магнитный момент иона Ni^{2+} расщепляет резонансную линию на 2 основные компоненты с относит. интенсивностями 1:2. Менее интенсивная линия в слабом поле отнесена к протонам NH_3 -групп, для к-рых H_0

1-
оль

2.1979, 120

совпадает с направлением связи Ni—N, а более интенсивная линия (в сильном поле) обусловлена четырьмя NH₃-группами, для которых H_0 перпендикулярно связям Ni—N. Низкопольная линия проявляет мультиплетную структуру 1:2:1, обусловленную дипольным взаимодействием H—H в пределах NH₃-групп с величиной расщепления $\Delta H = 8,5 \pm 0,5$ гс, что отвечает расстоянию H—H = $1,70 \pm 0,03$ А. Наличие расщепления свидетельствует о том, что при т-рах ниже т-ры структурного фазового перехода $T_c = 80^\circ \text{K}$ решетка изменяется слабо. Отсутствие ТС для высокопольной линии связано с отсутствием вращения NH₃-групп, расположенных перпендикулярно к H_0 . При понижении т-ры до $1,6^\circ \text{K}$ интенсивность линий уменьшается и при т-ре Нееля $T_N = 1,47^\circ \text{K}$ линии не наблюдаются. Из зависимости $(\Delta H)^{-1}$ от т-ры определена т-ра Кюри—Вейсса, $Q = -9,6 \pm 1^\circ \text{K}$. Отмечено, что значения T_N и Q хорошо согласуются с полученными из измерений теплоемкости и магнитной восприимчивости. С учетом основного расщепления $\Delta H = 60 \pm 3$ гс (при $4,2^\circ \text{K}$) расстояние Ni—H оценено в $2,80 \pm 0,05$ А.

С. П. П.

Ni₂

Emmick 10002

1980

Bagus P.S., et al

инфр.
спект.

γ. Electron. Spect.

Relat. Phenom., 1980,
20, 253-258.

$[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ [ommuca 10360] 1980

Rai M., et al.

Kh. mex.
Packer,
Zeeuw
Chign

Int. J. Quant. Chem.
1980, 18, 403-408

$Ni \cdot NH_3$ [оттиски 11547] 1981.

равновесн.
растворен.
гид. связь.

Ytoh H., et al.

кв. мет.
раскис
взаимосв.

Z. Naturforsch.,
1981, A36, 347-53.

металл-лиганд.

● (см. Cr...H₂O; III)

$Ni(S_2N_2H)_2$

Оттиск 11473

1981

$Pd(S_2N_2H)_2$

18 Б56. Электронное строение соединений со связью N—S. Исследование методом ППДП тионитрозильных комплексов переходных металлов $Ni(S_2N_2H)_2$ и $Pd(S_2N_2H)_2$. Millefiori S., Millefiori A., Granozzi G. Electronic structure of N—S compounds. A CNDO study of transition metal thionitrosyl complexes $Ni(S_2N_2H)_2$ and $Pd(S_2N_2H)_2$. «Inorg. chim. acta», 1981, 48, № 2, 233—236 (англ.)

электр.
строение

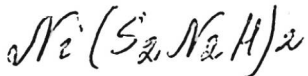
Методом ППДП с использованием эксперим. геометрии проведен расчет электронного строения плоских псевдоквадратных комплексов $M(S_2N_2H)_2$ [$M=Ni(I), Pd(II)$] с хелатными лигандами S_2N_2H . В согласии с экспериментом найдено, что структуры с цис-расположением связанных с металлом групп NH энергетически выгоднее (в случае I — на 73 ккал/моль, в случае II — на 62 ккал/моль) соотв-щих транс-структур. Показано, что вклад электростатич. взаимодействия в стабилизацию цис-структуры составляет всего около 13 ккал/моль, и основной вклад обусловлен различным ковалентным взаимодействием в цис- и транс-

(+) ⊗

Х 1981 N 18

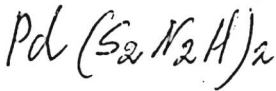
структурах. Приведены рассчитанные орбитальные энергии и атомные эффективные заряды Q_x . Отмечены значительные различия в величинах Q_x неэквивалентных атомов S и N и значительная полярность связей S—N. Рассчитанное распределение электронного заряда качественно согласуется с данными рентгеновских фотоэлектронных спектров.

О. Гриценко



Ommuck 11473

1981

KB, see,
papers

94: 214907r Electronic structure of N-S compounds. A CNDO study of transition metal thionitrosyl complexes $\text{Ni}(\text{S}_2\text{N}_2\text{H})_2$ and $\text{Pd}(\text{S}_2\text{N}_2\text{H})_2$. Millefiori, S.; Millefiori, A.; Granozzi, G. (Ist. Dip. Chim. Chim. Ind., Univ. Catania, 95125 Catania, Italy). *Inorg. Chim. Acta* 1981, 48(2), 233-6 (Eng). Conformational preferences, valence MO's and electronic charge distribution in thionitrosyl complexes $\text{Ni}(\text{S}_2\text{N}_2\text{H})_2$ and $\text{Pd}(\text{S}_2\text{N}_2\text{H})_2$ were studied by CNDO method. Both complexes are predicted to exist in the cis conformation, in agreement with the exptl. data. Valence MO energies and compns. show that covalent interactions between transition metal and ligand are important for the metal-ligand bonding. The population anal. gives evidence of inequiv. N and S atoms and of rather polar S-N bonds in the planar ring.

⊕ ⊗

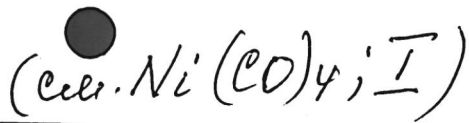
C.A. 1981, 94 v26



1982

эксперим., Wang Zhihong, Shen
уровни Erzhong, et al.

теорет. Fenxi Kexue Xuebao
разреш. 1982, 2 (2), 47-56.



$Ni(O_2)(N_2)$

1983

(*ab initio*
param)

99:165990e Stable geometry and rotation of the dinitrogen ligand in a nickel complex, dinitrogendioxynickel. Hori, Kenzi; Asai, Yoshihiro; Yamabe, Tokio (Fac. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan 606). *Inorg. Chem.* 1983, 22(22), 3218-20 (Eng). The stable geometry and the rotation of a N_2 ligand in $Ni(O_2)(N_2)$ are described. *Ab initio* MO calcns. give reasonable results for the bonding between Ni and the dinitrogen ligand. However, it is necessary to include the correlation effect in order to express the bonding nature between Ni and the dioxygen ligand.

@.A.1983, 99, N20

$Ni(O_2)(N_2)$

1983

10 Б1066. Устойчивая геометрия и вращение молекулы азота — лиганда в комплексе никеля $Ni(O_2)(N_2)$. Stable geometry and rotation of the dinitrogen ligand in a nickel complex, $Ni(O_2)(N_2)$. Hori Kenzi, Asai Yoshihiro, Yamabe Tokio. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 22, 3218—3220 (англ.)

Методом ССП проведен расчет молекулы $Ni(O_2)(N_2)$ в сгруппированном гауссовом базисе для Ni и в валентно-расщепленном базисе 3—21 ГФ для лигандов. При симметрии типа C_{2v} равновесной геометрич. конфигурации ядер отвечает расположение ядер кислорода и никеля в форме треугольника и линейному расположению ядра никеля и молекулы N_2 . Оценены частоты нормальных колебаний комплекса и проанализирована структура переходных состояний для внутреннего вращения молекулы N_2 . Указывается, что использованного приближения достаточно для описания хим. связи в комплексе между Ni и N_2 , тогда как для описания связи Ni— O_2 необходимо привлечение данных о величине корреляц. эффектов.

В. И. Пупышев

расчет И.А.

х. 1984, 19, N10

Ni-N₂

1984

Татарин С.Б., Петтерин
Ю.А., и др.

расчёт
геометр.,
структ.

М. структур. железа,
1984, 25, N1, 8-12.

(см. $\text{Al}^{\bullet}\text{N}-\text{N}_2$; III)

NiN₂

1984

22 Б1047. Теоретическое исследование взаимодействия железа и никеля с азотом. A theoretical study of the interaction of iron and nickel with nitrogen. Siegbahn Per E. M., Blomberg Margareta R. A. «Chem. Phys.», 1984, 87, № 2, 189—201 (англ.)

Расчет электронного строения комплексов с молек. азотом NiN_2 (I), FeN_2 (II), а также нитридов NiN (III), FeN (IV), FeN^+ (V) проведен методом конфигурац. взаимодействия (КВ) в полном активном пространстве валентных орбиталей с послед. использованием полученной волновой ф-ции в схеме КВ с несколькими базисными ф-циями и учетом поправки Дэвидсона. Для расчета использован двухэкспонентный базис с поляризац. ф-циями. Геометрия всех систем оптимизирована, в случае I и II рассматривали симм. линейный и T-образный способы координации N_2 . В случае I для линейной структуры (основное состояние $^1\Sigma^+$) получена энергия диссоциации $D_e = 18$ ккал/моль и межъядерные расстояния $R(\text{Ni}-\text{N}) = 3,37$ ат. ед., $R(\text{N}-\text{N}) = 2,03$ ат. ед.; для T-образной структуры (состояние 1A_1) $D_e = -8,5$ ккал/моль, $R(\text{Ni}-\text{N}) =$

гометр.,
структ., до

44

х. 1984, 19,
N 2.2.

$= 2,17$ ат. ед.; $R(\text{Ni—середина } \text{N}_2) = 3,42$ ат. ед. В случае II для линейной структуры (состояние $^3\Sigma^-$) $D_e = 11$ ккал/моль, $R(\text{Fe—N}) = 3,48$ ат. ед., $R(\text{N—N}) = 2,07$ ат. ед.; для T-образной структуры (состояние 3B_1) $D_e = -22$ ккал/моль, $R(\text{Fe—середина } \text{N}_2) = 3,50$ ат. ед., $R(\text{N—N}) = 2,26$ ат. ед. Во всех системах N_2 является акцептором электронов, для T-образных структур дативный перенос электронного заряда больше, чем для линейных. В случае III (состояние $^2\Pi$) $D_e = 31,6$ ккал/моль, $R(\text{Ni—N}) = 3,43$ ат. ед.; в случае IV (состояние $^2\Delta$) $D_e = 20,9$ ккал/моль, $R(\text{Fe—N}) = 3,15$ ат. ед.; в случае V (состояние $^1\Sigma^+$) $D_e = 23,0$ ккал/моль, $R(\text{Fe—N}) = 2,82$ ат. ед. Взаимодействие N_2 с одним атомом металла качественно отличается от взаимодействия с металлич. Пв: на Пв железа происходит диссоциация N_2 , тогда как на Пв никеля диссоциация не идет. Обсуждены возможные причины отмеченного различия.

О. Гриценко

NiN₂

1985

' 102: 212144z Ab initio cluster-model study of the electronic ground-state and photoemission properties of nickel nitride (NiN₂) and nickel carbonyl (NiCO): models for chemisorption. Kao, C. M.; Messmer, R. P. (Dep. Phys., Univ. Pennsylvania, Philadelphia, PA 19104 USA). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1985, 31(8), 4835-47 (Eng). The ground state of the linear NiN₂ cluster was found, from generalized valence-bond CI calcs., to be a $1\Sigma^+$ state with a short Ni-N distance of 1.64 Å and a Ni-N₂ dissociation energy of 0.8 eV. In this $1\Sigma^+$ state near the calcd. equil. internuclear distance, the electronic wave function may be characterized as arising from a significant admixt. of the Ni 3d¹⁰ configuration, and the bonding of the N₂ mol. to the Ni atom may be characterized as N₂ σ donation and Ni 3d π backward donation. Low-lying excited states ($3\Sigma^+$, 3Δ , and 3Π) arising from the Ni 3d⁹4s¹ configuration were also studied. Mulliken population analyses, dipole moments, and vibrational and photoemission properties were calcd. Parallel calcs. were also performed for the linear NiCO mol. The $1\Sigma^+$ states of both NiN₂ and NiCO are good models for the chemisorption of N₂ and CO on a Ni surface, with regard to the downward shift of the mol. stretching frequency in the interacting systems, the photoemission satellite structure, and the orientation of the dipole moments (with a net electron transfer from Ni to N₂ or CO).

ab initio

расчет, модель

меха, 2 Ni-N

и d (Ni-N₂)

C.A. 1985, 102, N 24.

$H_3 N \dots NiX$

1986

($X = H, F, Cl$)

Sannigrahi A. B.,
Kar Tapas, et al.

ab initio
perim.

Proc. Indian Acad.
Sci., Chem. Sci., 1986,
96 (3-4), 253-62.

($Cl \cdot (LiH)_2$; III)

NiN₂

(Om. 28288)

1987

Dubz R.L., McKoy V.,

Ze,

Chem. Phys. Lett.,

muonm.
pacem

1987, 142, N3-4,

237-240.

Nig Ng

1987

Ubachin I. V.,

Novikov D. G. et al

Защитно-Физ. К'ластеров, No-
воб-60 Vosibirsk 1987, 155-60.

From. Ref. Zh., Fiz. (A-Zh,
1988, ● Abstr. No 3D159.

(see. Pdf19 ; II)

[Om. 31940]

1988

$Ni(NH_3)$

$Ni(NH_3)_2$

Ball D.W., Haege R.H.
et al.,

crkmp

High Temp. Sci., 1988,
25, N2, 95-101.



1988

111:86274n A normal coordinate analysis of monomethylhydrazine and its bidentate nickel(II) chloride complex. Dowling, D. P.; Glass, W. K. (Dep. Chem., Univ. Coll., Dublin, Ire.). *Spectrochim. Acta, Part A* 1988, 44A(12), 1351-7 (Eng). A full normal coordinate anal. (NCA) was carried out on monomethylhydrazine and *N*-deuterated monomethylhydrazine. The C_{3v} symmetry of the Me group is lost; nevertheless the concept of specific Me group modes is still valuable. The N-N stretching mode is relatively pure enabling it to be used as a criteria of coordination. An NCA was also carried out for the bidentate nickel complex $\text{NiCl}_2(\text{NH}_2\text{NHCH}_3)_2$. Interesting effects were obsd. for the wagging and twisting modes of the NH_2 group on coordination.

(*Coord. NoCM*,
Ni)

C.A. 1989, 111, N10

Ni₅N

[om. 29979]

1988

Panas I.; Schüle G., et al.,

meopem.

paczem

Do, Ze

J. Phys. Chem., 1988, 92,
n 11, 3079-3086.

NiN

(DM · 29979)

1988

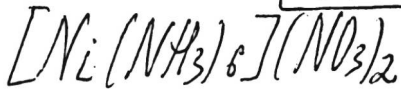
Panas I., Schüle F., et al.,

meopem.
poczem
Do, Ze

J. Phys. Chem., 1988, 92,
N 11, 3079-3086.

[Om. 31415]

1988



Trybula Z., Stankow-
ski J.,

фазов.
переход

Physica B 1988, 154,
N1, 87-92.

$(\text{NO}_2)_2\text{NiF}_6$

(От 31485)

1989

6 Л191. Синтез и колебательные спектры $(\text{NO}_2)_2\text{NiF}_6$ / Артюхов А. А., Красулин С. В., Климов В. Д., Набиев Ш. Ш., Толмачева Н. С. // Координац. химия. — 1989. — 15, № 3. — С. 397—399

Измерены колебательные (ИК и КР) спектры $(\text{NO}_2)_2\text{NiF}_6$ и проведено отнесение наблюдаемых частот колебаний NO_2^+ -катиона и NiF_6^{2-} -аниона. Автореферат

Синтез

и

колеб. спектр

ср. 1989, № 6

NiN_2

1989

12 Б1037. Химическая связь в соединениях с нулевой валентностью; сопоставление NiN_2 и $Ni(N_2)_4$ с $NiCO$ и $Ni(CO)_4$. Bonding in zerovalent Ni compounds: NiN_2 and $Ni(N_2)_4$ compared with $NiCO$ and $Ni(CO)_4$ / Bauschlicher Ch. W., Jr., Langhoff S. R., Barnes L. A. // Chem. Phys.— 1989.— 129, № 3.— С. 431—437.— Англ.

Методом ССП в расширенном базисе гауссовых ф-ций рассчитаны спектроскопич. постоянные NiN_2 в состояниях $^1\Sigma^+$, $^3\Delta$, $^3\Sigma^+$ и $^3\Pi$. Корреляц. эффекты учтены в рамках метода модифицированного функционала связанных электронных пар. Аналогичные расчеты проведены для состояния $^2\Sigma^+$ ионов NiN_2^- , $NiCO^-$ и NiN_2^+ и низколежащих $^2\Delta$ - и $^2\Pi$ -состояний NiN_2^+ , а также 1A_1 -состояний $Ni(CO)_4$ и $Ni(N_2)_4$. Связь в системах $Ni(N_2)_x$ найдена систематически более слабой, чем соотв. связь в системах $Ni(CO)_x$, что обусловлено меньшей способностью лигандов N_2 к π -дативному

M.A.

Х. 1989, N 12.

NiN_2 , NiN_2^+ , $NiCO$

взаимодействию и большим отталкиванием лигандов, по сравнению с CO. Энергия диссоциации $\text{Ni}(\text{N}_2)_4$ в состоянии $^1\text{A}_1$ найдена ~ 45 ккал/моль, что составляет 1/3 часть от энергии диссоциации $\text{Ni}(\text{CO})_4$ в том же состоянии. Обнаружено, что анион NiN_2^- , в отличие от NiCO^- , нестабилен по отношению к распаду на Ni^- и N_2 , что затрудняет исследование низколежащих состояний NiN_2 методом ФЭС.

. И. А. Тополь



1989

$Ni(N_2)_4$ Bauschlicher Charles W.,
Jr, Langhoff Stephen R. et al.

et al.
Chem. Phys. 1989. 129,
N3. C. 431-437.

( $Ca. NiN_2$; III)

NiN_2

1989
6 Д112. Связи в соединениях с нулевой валентностью: NiN_2 и $Ni(N_2)_4$ в сопоставлении с $NiCO$ и $Ni(CO)_4$. Bonding in zerovalent Ni compounds: NiN_2 and $Ni(N_2)_4$ compared with $NiCO$ and $Ni(CO)_4$ / Bauschlicher Charles W., Jr, Langhoff Stephen R., Barnes Leslie A. // Chem. Phys.— 1989.— 129, № 3.— С. 431—437.— Англ.

С использованием большого гауссова базиса проведены неэмпирич. расчеты состояний $^1\Sigma^+$, $^3\Delta$, $^3\Sigma^+$ и $^3\Pi$ молекулы NiN_2 . Метод модифицированного функционала связанных пар использовался для учета эффектов электронной корреляции. Рассмотрены также состояния $^2\Sigma^+$ ионов NiN_2^- , $NiCO^-$ и NiN_2^+ , низколежащие состояния $^2\Delta$ и $^2\Pi$ в NiN_2^+ и состояния 1A_1 в $Ni(CO)_4$ и $Ni(N_2)_4$. Найдено, что связи в системах $Ni(N_2)_x$ являются систематически более слабыми, чем в аналогичных системах $Ni(CO)_x$, в основном вследствие того, что лиганды N_2 не являются такими хорошими акцепторами π -орбиталей, какими являются лиганды CO . В частности, в отличие от стабильной молекулы $NiCO^-$, NiN_2^- не связана относительно Ni^- и N_2 . Получены значения энергии диссоциации связи металл—лиганд для различных состояний вышеуказанных молекул. Н. В. В.

м.п.

ф. 1989, № 6

(41) X

NiN₂

1989

/ 110: 219340j Bonding in zerovalent nickel compounds: (dinitrogen)nickel (NiN₂) and tetrakis(dinitrogen)nickel (Ni(N₂)₄) compared with nickel monocarbonyl and nickel tetracarbonyl (Ni(CO)₄). Bauschlicher, Charles W., Jr.; Langhoff, Stephen R.; Barnes, Leslie A. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035 USA). *Chem. Phys.* 1989, 129(3), 431-7 (Eng). Ab initio calcns. have been carried out on the ¹Σ⁺, ³Δ, ³Σ⁺ and ³Π states of NiN₂ using a large Gaussian basis set and an MCPF treatment of electron correlation. In addn., the authors have considered the ²Σ⁺ states of NiN₂⁻, NiCO⁻ and NiN₂⁺, the lowlying ²Δ and ²Π states of NiN₂⁺, and the ¹A₁ states of Ni(CO)₄ (Ni(N₂)₄). The bonding in the Ni(N₂)_x systems is systematically weaker than in the comparable Ni(CO)_x systems, primarily because the N₂ ligands do not accept π back-donation kcal/mol of NiN₂ is about half that obtained for NiCO. The ²Σ⁺ state of NiN₂⁺ has a calcd. D_e of 23.7 kcal/mol, which is about 9 kcal/mol lower than the ²Σ⁺ state of NiCO⁺. Unlike NiCO⁻, which is a stable mol., NiN₂⁻ is predicted to be unbound with respect to Ni and N₂. The disocn. energy of the ¹A₁ state of Ni(N₂)₄ is ~45 kcal/mol, or about 1/3 the value of the ¹A₁ state of Ni(CO)₄.

low. n. com -
do, meop. pacet

(+6)

C.A. 1989, 110, N24



1989

Bauschlicher Ch. W., Jr.,
Landhoff S. R. et al.

возб.

94. еоеи;
Do, мюр.
раери

Chem. Phys. 1989, 129(3),
431-7.

(сери.  Ni N_2 ; III)

NiN₂

1991

116: 28450u On the relative stability of side-on and end-on coordination of dinitrogen to nickel(0): "ab initio" calculations on the model compounds (dinitrogen)nickel and bis(phosphine)=(dinitrogen)nickel ([NiN₂] and [Ni(PH₃)₂N₂]). Ciullo, Giovanni; Rosi, Marzio; Sgamellotti, Antonio; Floriani, Carlo (Dip. Chim., Univ. Perugia, 06100 Perugia, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 185(5-6), 522-8 (Eng). "Ab initio" calcns. have been performed on the systems NiN₂ and Ni(PH₃)₂N₂ to investigate the relative stability of end-on and side-on coordination of dinitrogen to Ni⁰. The results indicate that both the π -back-donation and the redn. in the σ repulsion are important factors in the description of the Ni-N₂ bonding. In NiN₂, it is possible to reduce efficiently the repulsion by π polarization and the dinitrogen can come close enough to nickel to reach the best overlap in the π space for end-on coordination; this favors the end-on bonding with respect to the side-on one. When ligands are present on both sides of nickel, polarization is no longer possible and N₂ cannot come close enough to nickel to allow the best overlap; this disfavors mainly the end-on coordination where a shorter $r(\text{Ni-N})$ is required, and explains the preference for side-on coordination in Ni(PH₃)₂N₂.

meop. param

(*)

C.A. 1992, 116, N 4

Ni(PH₃)₂N₂

$NiNH_3^+$ Langhoff S. R., 1991
 $Ni(NH_3)^{2+}$ Bauschlicher Ch. W. Jr.,
et al.

расчет Do, J. Phys. Chem. 1991,
Серия Кипер 95(26), 10677-81.

(ср. $\bullet ScNH_3^+$; III)

$N_2 N_2$

[OM-36153]

1991

Siegbahn E. M.

J. Chem. Phys. 1991, 95,
N1, 364-372.

Электрон.

струк-
тура

Side-on binding of the
nitrogen molecule to first-
row transition metal
dimers.

1994

$NiNH_3$

Terra Joice, Guenzburger
Diana.

8th Int. Cong. Quantum
Chem., June 18-23, Pra-
gue, 1994: Book Abstrs.
[Prague] 1994. c. 409.
(see $FeNH_3$; iii)

$Ni^+(N_2O)$

1995

Хелм
Шварц,
Структура

124: 127468t Comment on: "The binding energy of $Ni^+ \cdot N_2O$ ". Heinemann, Christoph; Schwarz, Joseph; Schwarz, Helmut (Institut fuer Organische Chemie der Technischen Universitaet Berlin, Straesse des 17. Juni 135, D-10623 Berlin, Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1995, 247(4,5,6), 611-13 (Eng). A polemic is given on the work of D. Bellert, et al., (ibid. 1995, 240, 495) concerning the bind energies of $Ni^+(N_2O)$ and $Ni^+(CO_2)$. It is demonstrated that the electronic ground states of $Ni(N_2O)^+$ and $Ni(CO_2)^+$ should be linear based on electrostatic considerations and a comparison of their binding energies. The earlier conclusion of T-shaped ground state structures is repudiated.

④ $Ni^+(CO_2)$

C. A. 1996, 124, N10

NO + Ni

DM 38626

1996

Fary K. Ruschel, Thomas
cremp M Nemetz et al.

^b
Br
Mampane 384, N2-3, 101-14.
J. Mol. Struct., 1996,

Matrix isolation and dense-
ty functional studies
of novel transition

metal complexes. $\text{NO} + \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni},$
 Cu and Zn in argon matrices.

NiN₆

1996

126: 80258y Bonding and decomposition of NiN. Sood, R. K. (Dept of Chemistry, University of Calabar, Calabar, Nigeria). *Global J. Pure Appl. Sci.* 1996, 2(2), 137-142 (Eng), Global Journal of Pure and Applied Sciences. The results of infra red spectra and DTA of NiN₆ are presented. On the basis of the infra red spectra, the Ni-N bond is proposed to be largely covalent. A tentative mechanism of decompn. of NiN₆ whereby an excited azide ion interacts with another azide ion in the immediate neighborhood is suggested.

(UK chemist)

Ni-N chiefly

C.A. 1997, 126, N 6

NiNO

(Dm 39121)

1997

констан-
та

Julie L.C. Thomas, Charles W.
Nauschlicher, H., et al,

NiNO⁺

J. Phys Chem.

1997, 101

теоретическая

8580-39.

обсуждение

ошибка

содержит

Binding
to first -



of Nitric Oxide
Transition-Row

Metal Cations: An ab Initio
Study

$Ni^{+}-NaO$

1998

Burda, Jaroslav V.,

составлен
ОКР. А. СОСН.
25+ смущен.
составлен,
теор. paper

Chem. Phys. 1998, 230 (1),
13-22

(ср. $Co^{+}-\bullet NaO$; III)

(NiNb₂)

1998

Andrews, Lister; et al;

crkmp, g. Phys. Chem. A1998,
cmp. 102 (5), 2561-2571.

(Cu₂CoN; III)

NiN₂

1998

129: 46848t Infrared matrix isolation and DFT study of NiN₂. Manceron, L.; Alikhani, M. E.; Joly, H. a. (Lab. Spectrochimie Moléculaire, CNRS URA, Univ. Pierre Mari Curie, 75252 Paris, Fr.): *Chem. Phys.* 1998, 228(1-3), 73-80 (Eng), Elsevier Science-B.V.. The IR spectrum of NiN₂ isolated in solid Ar at low temp. was restudied. New isotopic data on ν_1 , ν_2 , ν_3 , $\nu_1 + \nu_2$ and $2\nu_1$, were gathered in the near- and far IR regions. This information led to a reassignment of the metal-ligand vibrations, and, consequently, to a reassessment of the Ni-N bond force const. which is in good agreement with previous theor. prediction on NiN₂. D. functional calcns. of the geometrical, electronic and vibrational properties of NiN₂ are also presented and compared to the exptl. values.

UK &
manuscript
Pi, empty.

C.A. 1998, 129, N4



(Dep. 39886)

1999

суп-ра,
стабильн,
колебам-
тастост

Itai Panas et al.,

Phys. Lett. 1999,
302, 431-436

NiNO
(мононитрозил?)

(Om- 39820)

1999

(ск в матрице)

130: 344394u Vibrational Spectra and Structures of Nickel Mononitrosyl Complexes. An IR Matrix Isolation and DFT Study. Krim, Lahouari; Manceron, Laurent; Alikhani, M. Esmail (LADIR/ Spectrochimie Moléculaire, Université Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, Fr.). *J. Phys. Chem. A* 1999, 103(15), 2592-2598 (Eng), American Chemical Society. The IR spectra of nickel mononitrosyl complexes isolated in solid argon at low temp. have been reinvestigated. Concn. and photochem. studies show the existence of two isomeric forms of NiNO. Analyses of the $^{58}\text{Ni}/^{60}\text{Ni}$, $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$, and $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ isotopic effects indicate that a first form has an end-on bent configuration, and a second form has a cyclic structure, in which the NO ligand is significantly more perturbed. D. functional calcns. of the geometrical, electronic and vibrational properties of these two forms are also presented and compared to the exptl. values. Isomerization energies have been estd.

C.A., 1999, 130, N25

Br Ni NN

(Om 40388)

2000

Mohua Chen, Mingbei Zhou
et al.,

J. Phys. Chem. 2000, A104,
8627-31.

Matrix- Isola
Spectroscopic



tion FTIR
and DFT

Studies of the $XNNN$ ($X =$
 $Cl, Br, N=Al, Ni$) Molecules.

Cl Ni NN

(om 40388)

2000

Mohua Chen, Mingpei Zhou
et al.,

J. Phys. Chem. 2000, A104,
8627-31.

Matrix- Isolated • ion FTIR
spectroscopic and DFT

studies of the XMNN ($X = \text{Cl}, \text{Br},$
 $\text{M} = \text{Cu}, \text{Ni}$) Molecules.

F: NiNO+

P: 3

Qm. 40601

2000

132:285593 Reactions of Laser-Ablated Fe, Co,
and Ni with NO: Infrared Spectra and Density
Functional Calculations of MNO^+ and M(NO)_x ($\text{M} = \text{Fe}$,
 Co , $x = 1-3$; $\text{M} = \text{Ni}$, $x = 1, 2$), and M(NO)_x^- ($\text{M} =$
 Co , Ni ; $x = 1, 2$). Zhou, Mingfei; Andrews,
Lester Department of Chemistry, University of Virginia
Charlottesville, VA 22904-4319, USA J. Phys.
Chem. A, 104(17), 3915-3925 (English) 2000 -

C.A. 2000

~~... Related Properties~~
Laser-ablated Fe, Co, and Ni atoms, cations, and electrons were reacted with NO mols. during condensation in excess Ne and Ar. The end-on bonded $\text{Fe}(\text{NO})_{1-3}$, $\text{Co}(\text{NO})_{1-3}$, and $\text{Ni}(\text{NO})_{1-2}$ nitrosyls and side-bonded $\text{Fe}-(\eta^2\text{-NO})$, $\text{Co}-(\eta^2\text{-NO})$, and $\text{Ni}-(\eta^2\text{-NO})$ species are formed during sample deposition or on annealing. The FeNO^+ , CoNO^+ , and NiNO^+ mononitrosyl cations are also produced via metal cation reactions with NO. Evidence is also presented for the $\text{Ni}(\text{NO})_{1,2}$ - and $\text{Co}(\text{NO})_{1,2}$ - anions. The product absorptions are identified by isotopic substitution ($^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$, and mixts.), electron trapping with added CCl_4 , and d. functional calcs. of isotopic frequencies. This work provides the 1st vibrational spectroscopic characterization of Fe, Co, and Ni nitrosyl cations and anions.

Ni (η^1 -NO)₂

DM. 41 021

2001

135: 295471j Infrared Spectra and Structures of Nickel and Palladium Dinitrosyl Complexes Isolated in Solid Argon. Alikhani, Mohammad Esmail; Krim, Lahouari; Manceron, Laurent (LADIR/Spectrochimie Moléculaire, UMR 7075 CNRS Université Pierre et Marie Curie, 75252 Paris, Fr.). *J. Phys. Chem. A* 2001, 105(33), 7817-7822 (Eng), American Chemical Society. The IR spectrum of Ni and Pd dinitrosyls formed by reaction of ground-state Ni or Pd atoms with NO during condensation in solid Ar was restudied, and the energetic, structural, and spectroscopic properties of these compds. were calcd. using d. functional theory. The Pd(η^1 -NO)₂ mol., already characterized in reactions of laser-ablated Pd, is the only product formed in the reaction between one Pd atom and two nitric oxide mols. With Ni, in contrast, two different isomeric forms are evidenced; Ni (η^1 -NO)₂ and Ni (η^2 -NO)₂, differing by the metal coordination modes and electronic structures. For the M(η^1 -NO)₂, M = Ni and Pd, species, four addnl. fundamentals

UK &
MAMPAGE,
CMP-pa, Vi

C. A. 2001, 135, N20

were measured in the mid- and far-IR regions for various isotopic species. If the exptl. results only show that the complex is centrosym., the existence of two IR-active vibrations in the far-IR region and the data for the asym. isotopomers are consistent with a linear structure predicted by DFT calcns. For the $\text{Ni}(\eta^2\text{-NO})_2 \rightleftharpoons \text{Ni}(\eta^1\text{-NO})_2$ conversion, ests. of the transition state energetic and structural properties are consistent with the exptl. data. The changes in electronic structure and the reinforcement of the coordination bond when going from mono- to dinitrosyls are discussed in light of the results of a topol. anal. of the bonding.