

TEN

TE NO₂ (Te)

VH48

1955

Cavalca L., Nardelli M., Bassi J.W.

Gazz. chim. ital., 1955, 85, N1-2, 153-160 (utax.)

La struttura del nitrito talloso.

P.R.X. 1955, N20, 45336.

TEL N

Margrave G.L.,
Staphitanonda P.

1955

J. Phys. Chem., 59, N12, 1231

Do

A-169

ST.

Газообразное неметаллическое
металлов. I. Теоретическая рас-
четы энергии диссоциа-
ции двухатомных не-
металлов.

(См. SiN) III

TiN₃

1972

7 Б230. Низкотемпературный фазовый переход в TiN₃. Инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние. Iqbal Zafar, Malhotra M. L. Low temperature phase transition in TiN₃. Infrared absorption and Raman scattering study. «J. Chem. Phys.», 1972, 57, № 7, 2637—2641 (англ.)

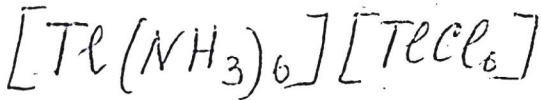
(ч.к.сп.)

С помощью ИК- и КР-спектров в области частот 30—2500 см⁻¹ исследован механизм фазового перехода TiN₃. Обнаружено усложнение спектров при понижении т-ры от 298 до 90° К вследствие орторомбич. искажений решетки во время перехода молекулы из фазы I в фазу II. Установлено, что симм. вал. кол. иона N₃⁻, присутствующее в соответствии с правилом отбора только в спектре КР, появляется в ИК-спектре при 1323 см⁻¹ с понижением т-ры до ~225° К. Это значение близко к т-ре фазового перехода, полученного ранее из дифференциального термич. анализа TiN₃ (~233° К). Из

X. 1973. № 7

т-турной зависимости частот в КР-спектре обнаружено изменение в структуре молекулы при $\sim 278^\circ \text{ K}$. Для нек-рых низкот-турных частот в ИК- и КР-спектрах обнаружено нарушение альтернативного запрета, указывающее на нецентросимм. структуру молекулы в фазе II. Сделано отнесение частот и показано, что фазовый переход включает смещение положения Ti^+ из центра инверсии при $\sim 278^\circ \text{ K}$ и послед. искажение N_3^- при

$\sim 225^\circ \text{ K}$, что приводит к изменению симметрии молекулы от D_{4h} до C_{2v} .
Е. С. Ефремов



1976

(Vi)

85:200214q Infrared absorption spectra of coordination compounds of thallium(III) with ammonia. Barsukov, A. V. (Leningr. Inst. Sovetskoi Torg. im. Engel'sa, Leningrad, USSR). *Koord. Khim.* 1976, 2(9), 1213-15 (Russ). The ir spectra for $\text{TlX}_3 \cdot 3\text{NH}_3$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) were recorded at 700-3600 cm^{-1} and the $\nu(\text{NH})$, $\delta_e(\text{NH}_3)$, $\delta_s(\text{NH}_3)$, and $\rho(\text{NH}_3)$ frequencies were assigned. Based on the spectral data, $\text{TlCl}_3 \cdot 3\text{NH}_3$ can be formulated as $[\text{Tl}(\text{NH}_3)_6][\text{TlCl}_6]$.

C.A. 1976. 85 N26

(FeN_3)

1976

Choi C.S., et al.

J. Chem. Phys., 1976, 64,
N 11, 4510-16.

(уел.
структ.)

(all NaN_3) III

ТЛ NO₂

1980

Шановалов А. А.

и.к. секрет
в матрице

Авторсер. диссерт.
на соискание учен.
степени КХН.

М., МГУ, 1980

Азид таллия

1980

№1 Д692. Фотолиз азид-таллия в электрическом поле. Захаров Ю. А., Кулагин Д. Г., Суровой Э. П. «Химия тверд. состояния». Кемерово, 1980, 42—47

Изучен характер влияния постоянного электрич. поля на фотохимич. чувствительность азид-таллия в области 300—550 нм. Установлено, что внешнее поле (независимо от полярности) в интервале напряжений 0—300 В не приводит к заметному изменению фоточувствительности азид-таллия. С увеличением значений прикладываемого напряжения (до 800 В) при освещении положит. электрода фоточувствительность азид-таллия увеличивается в 10—12 раз. При освещении отрицат. электрода заметного увеличения скорости фотолиза не наблюдается. Автореферат

фотолиз

Ф. 1983, 18, №1

TeN_3

спектр КР



8 Б186. Взаимодействие молекулярных мод с модами кристаллической решетки в энергоемких твердых телах. Исследование методом спектроскопии комбинационного рассеяния. Iqbal Z., Owens F. J. Coupling of molecular to lattice vibrational modes in energetic solids. Raman spectroscopic studies. «Fast React. Energ. Syst. Proc. NATO Adv. Study Inst., Preveza, July 6—19, 1980». Dordrecht e. a., 1981, 461—471, Discuss. 711—742 (англ.)

Изучены низкочастотные (область $0-300 \text{ см}^{-1}$) спектры КР кристаллов TiN_3 (I) и S_4N_4 (II) при различных т-рах ($T=20-350 \text{ K}$) и давлениях (до $\sim 22 \text{ кбар}$). Исследованные кристаллы взрываются при повышении т-ры или ударе. В спектре I найдена полоса либрац. колебания иона N_3^- и мода, связанная со смещением подрешеток катионов и анионов друг относительно друга. Анализ зависимости вида спектра

X. 1982, 19, 28.

от давления и т-ры указывает на сильное взаимодействие этих мод, а также на влияние дебаевских релаксирующих мод. В кристалле II сильное взаимодействие межмолек. мод и вал. кол. S—S не проявляется. Однако, при плавлении кристалла частота либрац. моды уменьшается на ~60 %, что свидетельствует о сильном ангармонизме этого колебания. Он, по-видимому, и приводит в определенных условиях к взрыву II.

А. В. Бобров

Спрукмупа

1984

TELNO₂

Rambidi N. G.,

TELNO₃

Stepanov N. F.,

et al.

(обзор) Khim. Svyaz Stz.

Mol. 1984, 5-20.

(суд. Спрукмупа MNO₂; III)

TlN₂

1986

104: 215477n Metal-nitrogen complexes in low temperature matrix. Froben, F. W.; Haimberger, T. V.; Moeller, K. (Inst. Molekuelphys., Freie Univ. Berlin, 1000 Berlin, 33 Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Struct.* 1986, 141, 447-50 (Eng). In addn. to the well known Ni-, Pd-, and Pt-N complexes, new Cd-, Ti-, and Pb-N complexes were detected. Their frequencies are Tl¹⁴N₂: 2236 cm⁻¹, Cd¹⁴N₂: 2230 cm⁻¹ and Pb¹⁴N₂: 2226 cm⁻¹. For Tl and Cd, there are lines around 1800 cm⁻¹ which might be due to the ionic form M⁺N₂⁻. No mononitrenes were found.

(1)

(72) ~~104~~ CdN₂, PbN₂

C.A. 1986, 104, N24

$TiNH_2^+$

1991

№ 2 Д169. Электронное строение ионов переходный металл — амид $+TiNH_2$, $+VNH_2$, $+CrNH_2$ и $+MnNH_2$. Electronic structure of transition-metal amide ions $+TiNH_2$, $+VNH_2$, $+CrNH_2$, and $+MnNH_2$ / Kapellos Sotirios, Mavridis Aristides, Harrison James F. // J. Phys. Chem.— 1991.— 95, № 18.— С. 6860—6865.— Англ.

Обобщенным методом валентных схем в среднем по величине базисе гауссовых ф-ций с учетом конфигурац. взаимодействия исследовано электронное строение ионов MNH_2^+ , $M=Ti, V, Cr, Mn$. Полученные результаты сопоставлены с аналогичными данными для ионов Sc. Приведены равновесная геометрия, энергии диссоциации, потенц. кривые, проведен анализ заселенностей по Малликену для различных состояний. Во всех случаях в основном состоянии образуется двойная связь $M=N$ с участием неспаренного электрона M и неподеленной пары электронов N . Низколежащие высокоспиновые состояния связаны благодаря электростатич. взаимодействиям, причем различия энергий низко- и высокоспиновых состояний убывают при увеличении атомного номера M .

дд.п.

⊞

43

ср. 1992, № 2.

VNH_2^+ , $CrNH_2^+$, $MnNH_2^+$

F: $[\text{Tl}(\text{CN})_2]^+$

P: 3

132:1

13306 Theoretical study on linear dicyanide and dicarbonyl complexes the metals Au, Hg, Tl. On the possible existence of a $[\text{Tl}(\text{CO})_2]^{3+}$ cation. Jonas, Volker; Thiel, Walter Organisch-Chemisches Institut, Universitat Zurich Zurich CH-8057, Switz. J. Chem. Soc., Dalton Trans., (21), 3783-3790 (English) 1999 DFT-BP86, MP2, and CCSD(T) calcns. on the cyanide complexes $[\text{Au}(\text{CN})_2]^-$, $[\text{Hg}(\text{CN})_2]$, and $[\text{Tl}(\text{CN})_2]^+$ and the isoelectronic carbonyl complexes $[\text{Au}(\text{CO})_2]^+$,

C. A. 2000, 132

[Hg(CO)₂]²⁺, and [Tl(CO)₂]³⁺ are presented using effective core potential wave functions in conjunction with polarized double- and triple-zeta basis sets. Geometries, vibrational frequencies, IR intensities, internal force fields, and charge distributions are discussed. For the Au and Hg systems, the calcd. data are in very good agreement with exptl. data. For the complexes [Tl(CO)₂]³⁺ and [Tl(CN)₂]⁺, the calcns. predict metal-C force consts. comparable to those in the resp. Hg species: The dissocn. of these complexes into Tl⁺ and CO⁺ or CN is computed to be endothermic by about 60 kcal mol⁻¹ for [Tl(CN)₂]⁺ and exothermic by more than 200 kcal mol⁻¹ for [Tl(CO)₂]³⁺, with a barrier of 15-20 kcal mol⁻¹ (UBP86) in the latter case.

F: $[Tl(CN)_2]^+$

P: 3

132:1

13306 Theoretical study on linear dicyanide and dicarbonyl complexes the metals Au, Hg, Tl. On the possible existence of a $[Tl(CO)_2]^{3+}$ cation. Jonas, Volker; Thiel, Walter Organisch-Chemisches Institut, Universitat Zurich Zurich CH-8057, Switz. J. Chem. Soc., Dalton Trans., (21), 3783-3790 (English) 1999 DFT-BP86, MP2, and CCSD(T) calcns. on the cyanide complexes $[Au(CN)_2]^-$, $[Hg(CN)_2]$, and $[Tl(CN)_2]^+$ and the isoelectronic carbonyl complexes $[Au(CO)_2]^+$, $[Hg(CO)_2]^{2+}$, and $[Tl(CO)_2]^{3+}$ are presented using effective co potential wave functions in conjunction

with polarized double- and triple zeta basis sets. Geometries, vibrational frequencies, IR intensities, internal force fields, and charge distributions are discussed. For the A and Hg systems, the calcd. data are in very good agreement with exptl. data. For the complexes $[Tl(CO)_2]^{3+}$ and $[Tl(CN)_2]^+$, the calcns. predict metal-C force consts. comparable to those in the resp. Hg species. The dissocn. these complexes into Tl^+ and CO^+ or CN is computed to be endothermic by a 60 kcal mol⁻¹ for $[Tl(CN)_2]^+$ and exothermic by more than 200 kcal mol⁻¹ for $[Tl(CO)_2]^{3+}$, with a barrier of 15-20 kcal mol⁻¹ (UBP86) in the latter case.

2000

9.40403

F: TlNO

P: 3

133:327063 Matrix Infrared Spectra and Density
Functional Calculations for GaNO, InNO, and TlNO.

Andrews, Lester; Zhou, Mingfei; Wang, Xuefeng
Department of Chemistry, Univ. Virginia
Charlottesville, VA 22904-4319, USA J. Phys.

Chem. A, 104(37), 8475-8479 (English) 2000. Laser-
ablated Ga, In, and Tl atoms react with NO during
condensation in excess Ar at 10 K to give 1 major

product, which absorbs at 1578.5 cm^{-1} for Ga, 1524.9 cm^{-1} for In, and 1454.6 cm^{-1} for Tl. IR spectra of $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{16}\text{O}$, $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$, and mixed isotopic samples show that this product is the metal nitrosyl MNO . D. functional calcns. provide good agreement for 3.SIGMA.- GaNO and InNO , but higher level MP2 calcns. are required to explain the bent structure and decreased N-O frequency for 3A'' TlNO . Model DFT calcns. are also reported for $\text{Li}[\text{NO}]$ and $\text{Li}[\text{NO}]\text{Li}$.

Tl_2N
 Tl_3N

(PM. 40641)

2000

Minghui Zhou et al.,

J. Phys. Chem. 2000,
A104, 1648 - 1855.

Reactions of Laser-Blatted
Ga, In, and Tl Atoms with
Nitrogen Atoms and Molecules

Infrared Spectra and Density
Functional Calculations
of GaN, NGaN, N₂GaN, and
M₃N and MN₃ Molecules

TE NO

2000

F: GaNO, InNO, TlNO

(+2)

P: 3

ЗБ1151. — Матричные инфракрасные спектры и теория функционала плотности для GaNO, InNO и TlNO. Matrix infrared spectra and density functional calculations for GaNO, InNO, and TlNO / Andrews Lester, Zhou Mingfei, Wang Xuefeng // J. Phys. Chem. A. - 2000. - 104, 37. - С. 8475-8479. - Англ.

Место хранения ГПНТБ России В матрицах из аргона изучены реакции продуктов лазерного испарения металлических галлия, индия и таллия с молекулами монооксида азота. Среди довольно большого числа полос найдено по одной для молекул GaNO (1578,5), InNO (1524,9) и TlNO (1454,6 см⁻¹). Изучены изотопные эффекты по азоту и кислороду, проведен расчет методом функционала плотности, предложена геометрия и колебательные частоты для этих молекул.