

HNO

1981

Adams G.F., et al.

Potential Energy Surf.

Dyn. Calc. Chem. React.

Mol. Energy Transfer,

[Expanded Proc. Symp.] 1980
(Pub. 1981), ● 133 - 167.

(see HCO; III)

потенц.
поверхн.,
кв. мех.
расч. и.

HNO

Ommuck 12780

1981

200mp.

Baird N.C., Taylor K.F.,

Chem. Phys. Lett. 1981,
80 (1), 83-86.

HNO

DM MUCK 11539 1981

no mems.

p-uc,

Do

(95:15324u The mechanism of nitroxyl predissociation. An interpretation using analytical potential energy functions for the $\tilde{A}^1A''$, $\tilde{a}^3A''$ and $\tilde{X}^1A'$ states. Dixon, R. N.; Jones, K. B.; Noble, M.; Carter, S. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl. BS8 1TS). *Mol. Phys.* 1981, 42(2), 455-73 (Eng). The excitation spectrum of the laser-induced fluorescence of

HNO revealed 5 vibronic transitions of the $\tilde{A}^1A''$ - $\tilde{X}^1A'$ band system. The onset of predissocn. was detected by breaking-off in the rotational structure of many of the branches. Rotationally induced predissocn. was also obsd. for 2 vibronic levels above the dissocn. limit. Potential energy functions were calcd. for the $\tilde{X}^1A'$, $\tilde{a}^3A''$, and $\tilde{A}^1A''$ states in order to elucidate the predissocn. mechanism. At threshold, dissocn. occurs by crossing from the $\tilde{A}$ to the $\tilde{X}$ state. The breaking-off energy is a function of J' , but not of K' or the vibrational quantum nos., in quant. agreement with calcs. using the potential surface of the $\tilde{X}^1A'$ state. The dissocn. energy for $\text{HNO} \rightarrow \text{H} + \text{NO}$ is $16,450 \text{ cm}^{-1}$, 550 cm^{-1} lower than the previous upper limit.

C.A. 1981, 95, N2.

оттиски 11539 1981

HNO

10 Д99. Механизм преддиссоциации молекулы HNO. Интерпретация с использованием аналитических функций потенциальной энергии для состояний $\bar{A}^1A''$, $\bar{a}^3A''$ и X^1A' . The mechanism of HNO predissociation. An interpretation using analytical potential energy functions for the $\bar{A}^1A''$, $\bar{a}^3A''$ and X^1A' states. Dixon R. N., Jones K. B., Noble M., Carter S. «Mol. Phys.», 1981, 42, № 2, 455—473 (англ.)

Получены спектры флуоресценции молекулы HNO, соответствующие колебательно-вращательным переходам 011—000, 020—000, 100—000, 101—000 и 030—000 системы полос $\bar{A}^1A''$ — X^1A' . Анализ распределения интенсивностей переходов свидетельствует о том, что преддиссоциация с уровня терма $\bar{A}^1A''$ обусловлена орбитально-вращательным взаимодействием с континуумом основного состояния. Для более подробного обсуждения механизма преддиссоциации построены аналитич. функции потенц. энергии (ПЭ) HNO для состояний X^1A' , $\bar{A}^1A''$ и $\bar{a}^3A''$, основанные на термохимических и спектроскопич. данных и результатах квантовохимич. расче-

М.И. До

Ф. N10. 1981

тов. Показано пересечение поверхностей ПЭ состояний X^1A' и $\bar{a}^3A''$, соответствующих подходу атома Н к NO. Расчетные значения силовых постоянных и энергий колебательных уровней HNO и DNO (состояний X^1A' и $\bar{A}^1A''$) находятся в хорошем согласии с эксперим. данными. Рассчитана зависимость энергии обрыва в спектре испускания от J , находящаяся в количеств. согласии с эксперим. данными, что позволило уточнить значение энергии диссоциации HNO в основном состоянии: $D_0^0(\text{HNO}) = 16450 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ (на 550 см^{-1} ниже D_0^0 по данным Клемента и Рамсея). В. И. Барановск:й

HNO

предиссоц.

(20)

Весты

X 1981 N 18

18 Б1093. Механизм предиссоциации HNO. Интерпретация, использующая аналитические функции потенциальной энергии для состояний A^1A'' , a^3A'' и X^1A' . Dixon R. N., Jones K. B., Noble M., Carter S. The mechanism of HNO predissociation. An interpretation using analytical potential energy functions for the A^1A'' , a^3A'' and X^1A' states. «Mol. Phys.», 1981, 42, № 2, 455—473 (англ.)

Регистрировались спектры лазерно-индуцированной флуоресценции возбужденной на 5 вибронных переходах системы $A^1A''-X^1A'$ молекул HNO, образующихся в результате пиролиза в газовой ячейке при давл. $1 \cdot 10^{-3}$ мм. Канал предиссоциации идентифицировался по исчезновению ветвей во вращательной структуре спектра флуоресценции. Для двух вибронных уровней, лежащих выше предела диссоциации, наблюдалась вращательно-индуцированная предиссоциация. С использованием спектроскопич. и термохим. данных, а также результатов квантовохим. расчетов получены потенциальные функции состояний X^1A' , a^3A'' и A^1A'' молекулы HNO. Потенциальные функции использовались для анализа механизма предиссоциации, к-рый вблизи порога диссоциации объяснялся связью состояний X^1A' A^1A'' . Энергия, при к-рой начинается предиссоциация, зависит только от вращательного квантово-

1981
отмеч 11539

го числа J' (а не K' и колебательных квантовых чисел). Численное моделирование указанной зависимости с использованием потенциальной функции состояния X^1A' позволило определить энергию диссоциации $HNO \rightarrow H + NO$, составляющую $16\,450 \pm 10$ см^{-1} , что на 550 см^{-1} ниже существующей оценки.

А. И. Маергойз

HNO

1981

6 Д625. Исследование с разрешением во времени электронного спектра HNO и влияние на него магнитного поля. Magnetic-field and time-resolved studies of the electronic spectrum of HNO. Dixon Richard N., Noble Marcus, Taylor Caroline A., Delhomme Michel. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 125—142 (англ.)

спектр

Спектры возбуждения флуоресценции молекул HNO исследованы с высоким разрешением с использованием непрерывного и импульсного перестраиваемых лазеров на красителях. В положении линий обнаружено множество возмущений, часто сопровождающихся аномалиями в интенсивности. Установлено, что ширины возмущенных линий, как и ряда линий кажущихся невозмущенными, чувствительны к внешнему магн. полю. По затуханию флуоресценции определены времена жизни колебательно-вращательных уровней возбужденного состояния, $\tau \sim 23$ мкс, и константы скорости ту-

Ф. 1982, 18, №6.

шения флуоресценций $(1.1 \div 15) \cdot 10^{-10}$ см³ молекул⁻¹ · с⁻¹. Показано, что аномальные интенсивности линий в спектре возбуждения обусловлены быстрым селективным тушением возмущенных уровней. Результаты объяснены в рамках модели, предполагающей взаимодействие уровней состояния $\tilde{A}^1A''$ с высокими колебательными уровнями состояния $\tilde{X}^1A'$ с дальнейшим их возмущением за счет взаимодействия с состоянием $\tilde{a}^3A''$.
 Библ. 25.

В. С. Иванов



МНО

1981

11 Б150. Исследования ~~электронного спектра~~ HNO , с временным разрешением и с использованием магнитного поля. Dixon Richard N., Noble Marcus, Taylor Caroline A., Delhoume Michel. Magnetic-field and time-resolved studies of the electronic spectrum of HNO . «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1981, № 71, 125—142 (англ.)

С высоким спектральным разрешением и разрешением во времени измерены спектры лазерного возбуждения флуоресценции молекулы HNO в области 641—758 нм (переход $A'A'' \rightarrow X'A'$). Отдельные участки спектра измеряли также в магнитном поле (до 10,5 кГс). Во вращательной структуре найдены многочисленные возмущения в положении и интенсивности линий. В. М. Ковба

спектр

Х. 1982, 19, N 11.

HNO

Summer 1989 1981.

Huber H.

Кв. мех.
расчет.

J. Mol. Struct., 1981,

Мол. спект.

76, 277-84

E/E_h



(см. H₂O₂, III)

μ

(Theochem)

NH-0 [omnibus 11740] 1981.

Saiton T., Mori K., Itoh R.

Ji Chem. Phys., 1981, 60,
161-180.

(L.-S.) notenguan.

Two-dimensional vibrational analysis of the Lippincott-Schrödinger potential...

ИНО

1981

Саркисов О. И.,

Кинетическая спектро-
скопия многоатомных
радикалов.

спектр

Автореферат на соискание
уч. ● ёмой степени
доктора физ.-мат. наук, Москва
1981.

MNO
равновесная
геометрия

1981
Schweig Armit, et al.
J. Amer. Chem. Soc.,
1981, 103, N 6, 1425-1431.

● (сер. C₂ H₄; III).

HNO

оттиса 11657

1981

9 Д118. Метод ССП в полном активном пространстве (ПАПССП) в формулировке Ньютона—Рафсона с применением к молекуле HNO. The complete active space SCF (CASSCF) method in a Newton—Raphson formulation with application to the HNO molecule. Siegbahn Per E. M., Almlöf Jan, Heiberg Anders, Roos Björn O. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2384—2396 (англ.)

Дано детальное описание метода ССП в полном активном пространстве (CASSCF). Метод существенно отличается от других вариантов методов МК ССП отсутствием выбора конфигураций. Оптимизация орбиталей проводится для волн. ф-ций, записанных в виде разложения по конфигурациям, содержащего несколько тысяч членов. Оптимизация орбиталей проводится с помощью метода Ньютона—Рафсона. Решения вековой задачи конфигурац. взаимодействия находятся в рамках формализма унитарной группы. Развитый метод применен к расчету молекулы HNO в основном и.

расчет
молекулы

ф. 1981 №9

возбужденных состояниях при использовании трех-экспонентного базиса. Исследована зависимость результатов от выбора пространства активных орбиталей. Для основного состояния получены следующие параметры равновесной конфигурации: $R_{\text{NO}}=1,215$, $R_{\text{NH}}=1,079$ Å, $\theta_{\text{HNO}}=108,8^\circ$. Энергия переходов на наимизшие состояния $^3A''$ и $^1A''$ найдена равной 0,67 и 1,52 эВ соответственно. Е. А. Ж.

HNO

19 Б35. Метод ССП в полном пространстве активных орбиталей (ССП ППАО) в формулировке Ньютона — Рафсона с приложением к молекуле HNO. Siegbahn Per E. M., Almlöf Jan, Heiberg Anders, Roos Björn O. The complete active space SCF (CASSCF) method in a Newton — Raphson formulation with application to the HNO molecule. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 4, 2384—2396 (англ.)

м. н.

геометрия

Развита новая версия метода ССП в полном (конфигурац.) пространстве активных орбиталей (ССП ППАО) — разновидности многоконфигурац. приближения ССП («Chem. Phys.», 1980, 48 157). Отличительная черта приближения ССП ППАО — разделение пространства МО на неактивную, активную и вторичную части при построении и отборе конфигураций — сохраняется без изменений. В отличие от исходного варианта на стадии оптимизации орбиталей предполагается использовать метод Ньютона — Рафсона, а не формализм «супер-КВ». С учетом специфики построения конфигураций и проведения процедуры оптимизации выписаны все необходимые первые и вторые производные энергии по параметрам вращения орбитального пространства. При этом предполагается, что унитарная матрица U ,

X. 1981, N 19.

осуществляющая подобное вращение параметризована след. образом: $U = \exp(X)$, где X — кососимм. матрица, содержащая минимально необходимое число параметров. Кратко обсуждены проблемы решения ур-ний метода конфигурац. взаимодействия и вопросы, связанные с двухстадийной (решение векового ур-ния и оптимизация орбиталей по методу Ньютона — Рафсона) орг-цией вычислительной схемы. Предложены приемы, позволяющие ускорить сходимость (или вообще добиться сходимости) в том случае, когда гиперповерхность энергии в зависимости от вращательных параметров не строго квадратичная, а матрица вторых пр-ных энергии по вращательным параметрам имеет отриц. или близкие к нулю собственные значения. В том же случае, когда сходимость почти достигнута, предлагается (для снижения стоимости вычислений) рассчитывать матрицу вторых пр-ных не на каждой итерации, а через установленное число шагов. В кач-ве примера рассмотрено приложение метода к молекуле HNO . Использован трехэкспонентный базисный набор сгруппированных гауссовых ф-ций, дополненный поляризац. орбиталями (всего 42 ф-ции). Размерности вековых ур-ний составляли величины порядка 10^3 для полного валентного активного пространства и 10^4 — для расчетов с расширенным (увеличенным на одну орбиталь) активным пространством. Рассмотрены состояния $1^1A'$, $1^3A''$, $2^1A''$, $3^1A''$. Для основного состояния $1^1A'$ определена равновесная геометр. конфигурация и в этой точке вычислены вертикальные энергии возбуждения. Проведен детальный анализ сходимости моноконфигурац. процедуры ССП, включая время расчета на каждой стадии.

А. В. Немухин

N-OH

1982

Bock Ch.W., Trachtman
Mendel., et al.

ссыл.
носим,
использ.,
структ.

J. Comput. Chem.,
1982, 3, N 4, 512-524.

●
(ссыл. C-OH; III)

HNO.

1982

Boeyens Jan C. A.

Do, u. n. J. Crystallogr. and
Spectrosc. Res., 1982,
12, N3, 245-254.

(cr. C_2H_4 ; III).

HNO

1982

Davidson Ernest R.,
McMurchie Larry E.

Рачен
нормену.
клубов

Excit. States. Vol. 5.
New York e.a., 1982,
1-39.

(св. В Н₂; III)

МНО

[Ommex 13658]

1982

De Alti G., DeClerck P.,
et al.

γ,

кв. мех.
расчет

Chem. Phys., 1982, 66,
N 3, 425-433.



(ср. H₂CO, III)

HNO

Dixon R. N. 1982

Phil. Trans. Roy. Soc. Lon-
don, 1982, A 307,

Итарковское

N 1500, 603-614;

расщепление.

Discuss., 614-615.

(ср. NH_2 ; III).

HNO

1982

Discon R. N.

Phil. Trans. Roy. Soc.

London. 1982, A 307,

N 1500, 603-615. Dis-
cuss., 614-615.

(сс. NH_2 ; III)

штарков.
расцепл.
уровней

HNO [Оттиск 13396] 1982

9 Б34. Расчеты методом ССП в полном пространстве активных орбиталей (ССП ППАО) равновесной геометрии и колебательного спектра молекулы HNO в низших состояниях $^1A'$, $^1A''$ и $^3A''$. Heiberg A., Almlöf J. Complete active space SCF (CAS SCF) calculations on the equilibrium geometry and vibrational spectrum of the HNO molecule in its lowest $^1A'$, $^1A''$ and $^3A''$ states. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 85, № 5—6, 542—548 (англ.)

Методом МК ССП с последующим учетом КВ в трехэкспонентном базисе, дополненном поляризац. орбиталями, рассчитаны равновесные геометрич. параметры молекулы HNO в состояниях $^1A'$, $^1,^3A''$. Точки потенциальной поверхности аппроксимированы полиномами, и в базисе ф-ций гармонич. осциллятора определены колебательные уровни. А. В. Немухин

расчет
геометр;
структур

Х. 1982, 19, №9.

HNO

Ommuck 13396 1982

[96: 94240k Complete active space SCF (CAS SCF) calculations on the equilibrium geometry and vibrational spectrum of the nitrous acid molecule in its lowest $^1A'$, $^1A''$ and $^3A''$ states. Heiberg, A.; Almlof, J. (Dep. Chem., Univ. Oslo, Oslo, Norway). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 85(5-6), 542-8 (Eng). Geometries and vibrational spectra for HNO in its lowest electronic states were calcd. by the CAS SCF method. With a full valence active space, CAS SCF calcns. alone do not agree with expt., whereas a subsequent CI treatment improves the results. Ests. for the structure (r_{NH^0} , r_{NO^0} , θ_{HNO^0}) are (1.059 Å, 1.218 Å, 107.4°), (1.037 Å, 1.253 Å, 113.3°), (1.029 Å, 1.235 Å, 117.9°) for $^1A'$, $^1A''$ and $^3A''$.

смысл.

направлен,

Vi

C.A. 1982, 96, N12

HNO

1982

Pracem

Pi

Hout Robert F, Levi Bever
ly A. , et al.

J. Comput. Chem.; 1982,
3, N2, 234-250.

● (Calc. H₂; III)

NOH^+

[Dmmuck 14816.]

1982

Kutina R. E., Goodman
G. L.
et al.,

ΔH_f ;

J. Chem. Phys., 1982,
77, N4, 1664-1676.

HNO^+

[Ommuck 14816]

1982

Kutina R.E. Goodman

G.L.

ΔH_f ;

et al.,

J. Chem. Phys., 1982,
77, N4, 1664-1676.

HNO

1982

7 Д493. Фотохимическое образование комплексов HNO в низкотемпературных матрицах. Photochemical formation of complexed HNO in low temperature matrices. Müller R. P., Murata S., Huber J. Robert. «Chem. Phys.», 1982, 66, № 1—2, 237—242 (англ.)

Установлено, что при фотолизе N,N-диметилнитрозамина в Ag-, Kr- и N₂-матрицах при t-ре (16+2) К излучением ртутной лампы высокого давления образуются изолированные комплексы HNO с N-метиленметиламином. Исследовано влияние водородной связи с комплексе на ИК-спектры изотопозамещенных молекул HNO, H¹⁵NO, H¹⁵N¹⁸O, DNO, D¹⁵NO и D¹⁵N¹⁸O. Проведено соотнесение спектральных полос с колебаниями водородной связи, а также внеплоскостными деформационными и валентными колебаниями связи N=H в HNO. Установлено, что частота последних испытывает при комплексообразовании КВ-сдвиг до десятков и более см⁻¹. Предположено, что сильное взаимодействие колебаний в HNO является причиной существенного изменения энергии колебательных уровней при образовании комплекса с водородной связью. Библ. 21. С. Литке

спектр
в

матрице

ф. 1982, 18, № 7

HNO
DNO

Оттиск 15023 1982

2 Д564. Комплексы с водородной связью между молекулами HNO и формальдегида. Фотолиз метилнитрита в аргонной матрице. Hydrogen-bonded complex between hno and formaldehyde. Photolysis of methyl nitrite in an argon matrix. Müller R. P., Russegger P., Huber J. Robert. «Chem. Phys.», 1982, 70, № 3, 281—290 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($4000-170\text{ см}^{-1}$) продуктов фотолиза метилнитрита в аргонной матрице при $t = 16\text{ K}$ и облучении светом ртутной лампы мощностью $0,5\text{ кВт}$. Предположено, что молекулы метилнитрита фотодиссоциируют в матрице с образованием нитрокарбонильных групп HNO и молекул формальдегида и стабилизацией комплексов с водородной связью состава 1:1 между продуктами фотореакции. Обсуждены изменения частот колебаний связей в комплексах при

спектр в
матрице,
ΔE

фр. 1983, 18, № 2

DNO

введении 6 изотопич. аналогов в исходные молекулы метилнитрита. Обнаружено эффективное смещение колебательных движений групп N-O и деф. кол. цепочки связей H—N—O в протонированных комплексах. В рамках метода самосогласованного поля для молекулярных орбиталей молекул HNO и DNO вычислены наиболее энергетически устойчивые конформации комплексов этих молекул в аргонной матрице. Библ. 24.
И. В. А.

РНО

[Омск 14927]

1982

Энергия
ионизации,
относит.
интенсив.
(расчет и
эксперимент).

Niessen W., Cederbaum
et al., L.S.,

J. Electron Spectrosc.
and Relat Phenom.,
1982, ● 28, 45-78.

HNO^+

Оттиск 14289

1982

спектр, δ_i ,
м.п.

21 Б201. Теоретическое исследование вибронной структуры в электронном спектре HNO^+ . Perić M., Mladenović M., Fejzo J., Marić S. M., Bruna P. J. A theoretical study of the vibronic structure in the electronic spectrum of HNO^+ . «Chem. Phys. Lett.», 1982, 88, № 6, 547—552 (англ.)

Выполнено исследование вибронной и вращательной структуры в электронном состоянии $^2\Pi$ радикала HNO^+ с учетом эффекта Реннера—Теллера. Методом прямой диагонализации гамильтониана, включающего электрон-
изгибное и вращательное движения, определены

Х. 1982, 19, № 21

энергии вибронных состояний и волновые функции. Вычислены потенциальные кривые изгибных колебаний для двух наинизших электронных состояний ${}^2A'$ и ${}^2A''$, вибронные уровни и факторы Франка—Кондона. Расчеты выполнены в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием и влиянием валентных колебаний. Показано, что спектр поглощения вблизи 7200 Å, наблюдавшийся Г. Герцбергом (Scerzberg G., «Quart. Rev. Chem. Soc.», 1971, 25, 201), может быть отнесен к переходу из основного в первое возбужденное электронное состояние HNO^+ .

С. Н. Мурзин

HNO^+ (Ommuck 14281) 1982

[97: 63460y A theoretical study of the vibronic structure in the electronic spectrum of HNO^+ . Peric, Miljenko; Mladenovic, Mirjana; Fejzo, Jasenka; Marian, Christel M.; Bruna, Pablo J. (Inst. Fiz. Hem., Prir.-Mat. Fak., 11000 Belgrade, Yugoslavia). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 88(6), 547-52 (Eng). The results of an ab initio study of the vibronic and rotational structure in the $2^1\P$ state of HNO^+ are presented. The absorption spectrum at 7200 Å obsd. by Herzberg could be caused by the transition from the ground to the 1st excited electronic state of HNO^+ .

ab-initio
tracium

C. A. 1982, 97, N 8.

HNO^+

Отмеч 14281 1982

11 Д117. Теоретическое исследование вибронной структуры в электронном спектре HNO^+ . A theoretical study of the vibronic structure in the electronic spectrum of HNO^+ . Perić Miljenko, Mladenović Mirjana, Fejzo Jasenka, Marian Christel M., Bruna Pablo J. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 88, № 6, 547—552

исслед.
вибронной
структуры
в электрон.
спектре

Проводится неэмпирич. исследование электронно-колебательной и вращательной структуры $^2\Pi$ состояния иона HNO^+ . Два нижних $^2A'$ и $^2A''$ -состояния этого иона являются компонентами $^2\Pi$ электронного состояния в линейной геометрии и представляют пример реализации эффекта Реннера—Теллера, состоящего в нарушении приближения Борна—Оппенгеймера, вследствие чего волн. ф-ция системы должна представляться линейной комбинацией волн. ф-ций электронного и ядерного движений для обоих состояний. Расчет вибронных энергий и волн. ф-ций проводится методом,

ср. 1982, 18, W11

состоящим в диагонализации гамильтониана, описывающего движение электронов и деформационные колебания молекулы, а также вращение вокруг оси, совпадающей с молекулярной осью в линейном случае. При расчете кривых потенц. энергии использовался базис двойных экспоненц. ф-ций, дополненный поляризационными ф-циями в центре каждой связи. Получена схема вибронных уровней в основном и первом возбужденных состояниях и схема вращательных уровней в основном $^2A'$ состоянии. Показано, что спектр поглощения в области при 7200 Å вызван переходами из основного в первое возбужденное состояние HNO^+ . А. А. Зембеков.



HNO

1982

Sana M.

раб. по
сост. ноем. Theor. chim. acta,
1982, 60, N6, 543-
- 559.

(см. H₂O; III)

HNO^{2+}

HON^{2+}

pacruu

1983

Canuto Sylvio.

Rev. Bras. Fis., 1983,

13, N4, 747-752.

● (cer. HCO^+ ; III)

HNO

От. 18218

1983

7 Б1152. Ровибронная структура и динамика процессов преддиссоциации $\text{HNO}(\bar{A}^1A'') \rightarrow \text{H}(^2S) + \text{NO}(X^2\Pi)$ и $\text{HONO}(\bar{A}^1A'') \rightarrow \text{OH}(X^2\Pi) + \text{NO}(X^2\Pi)$. Rovibronic structure and the dynamics of the predissociation processes $\text{HNO}(A^1A'') \rightarrow \text{H}(^2S) + \text{NO}(X^2\Pi)$ and $\text{HONO}(A^1A'') \rightarrow \text{OH}(X^2\Pi) + \text{NO}(X^2\Pi)$. Dixon R. N. «Bull. Soc. Chim. Belg.», 1983, 92, № 10, 837—842 (англ.)

Проанализированы спектроскопич. данные по низколежащим возбужденным состояниям $\bar{A}^1A''$ молекул HNO и HONO . Для молекулы HNO приведен вид эфф. потенциала состояния $\bar{A}$ вдоль координаты диссоциации, к-рый имеет максимум, лежащий на 2300 см^{-1} выше предела диссоциации $\text{HNO} \rightarrow \text{H} + \text{NO}$, и указано расположение колебательных уровней HNO . Предложена модель, хорошо объясняющая зависимость от квантового числа K уширения спектральных линий для вибронного состояния 101 HNO и отсутствие уширения для более высоколежащих уровней 030 и 110 , а также возмущения вращательных уровней состояний 002 и 003 . В рамках этой модели, связывающий порог преддиссоциации с

Vi;

⊗
⊙ H

X. 1984, 19, n 7

корниолисовым взаимодействием низколежащих уровней состояния $\bar{A}$ и высоколежащих уровней основного состояния, оценены энергии диссоциации HNO и DNO , равные $16\,450 \pm 10$ и $17\,030 \pm 10 \text{ см}^{-1}$. На основании анализа данных для HONO сделаны след. выводы: момент перехода в HONO направлен перпендикулярно к плоскости молекулы, и диссоциация $\text{HONO}(\bar{A}^1A'') \rightarrow \text{OH}(X^2\Pi) + \text{NO}(X^2\Pi)$ осуществляется гл. о. в этой плоскости во временном интервале, сравнимом с временем вращения; спины спаренных электронов и образующихся фрагментах OH и ON остаются связанными и дают синглет, в то время как центральная связь разрывается. Предложено два механизма преддиссоциации в состоянии $\bar{A}$ HONO . Первый обусловлен вибронным взаимодействием с уровнями неплоских торс. кол. ν_6 в основном состоянии, второй предполагает относительно пологую форму потенц. Пв состояния $\bar{A}$ вдоль координаты S_4 ($\text{HO} \dots \text{NO}$) в области Франка — Кондона. Оба механизма хорошо согласуются с имеющимися эксперим. данными.

С. Б. Осин

HNO
HONO

Om. 18218

1983

/ 100: 15213d Rovibronic structure and the dynamics of the predissociation processes $\text{HNO}(\text{A } ^1\text{A}'') \rightarrow \text{H}(^2\text{S}) + \text{NO}(^2\Pi)$ and $\text{HONO}(\text{A } ^1\text{A}'') \rightarrow \text{OH}(^2\Pi) + \text{NO}(^2\Pi)$. Dixon, R. N. (Sch. Chem., Univ. Bristol, UK BS8 1TS). *Bull. Soc. Chim. Belg.* 1983, 92(10), 837-42 (Eng). Exptl. data and deduced predissocn. mechanisms of HNO and HONO are compared. The measurements of line-broadening of lifetimes of excited levels of the parents are described along with the characterization of nascent OH fragment. A unifying framework for understanding the dissocn. dynamics of HNO and HONO is presented.

предиссоци-
азия

IX(4) HONO

C.A. 1984, 100, N2

МНО

[сер. 2014]

1983

Dwivedi C. P. D.,

номери,
серии
св. 24,
сер. 1000.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1983, 21,

• N10, 605-608.

HNO

Om. 17022

1983

1 Л387. Фотоэлектронная спектроскопия ионов HNO^- и DNO^- . Photoelectron spectroscopy of HNO^- and DNO^- . Ellis H. Benton, Jr., Ellison G. Barney. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 11, 6541—6558 (англ.)

Получены фотоэлектронные спектры отрицат. ионов HNO^- и DNO^- в газовой фазе. Фотоотщепление электронов осуществлялось излучением Ar^+ -лазера. В спектрах идентифицированы полосы, относящиеся к процессам образования нейтралей HNO и DNO в электронных состояниях $\tilde{X}^1A'$, $\tilde{a}^3A''$ и A^1A'' . По эксперим. данным рассчитаны величины электронного сродства (в эВ): $0,338 \pm 0,015$ и $0,330 \pm 0,015$ для HNO^- и DNO^- соответственно. Анализ колебательной структуры полос позволил авторам определить частоты фундаментальных колебаний ν_2 (валентное $\text{N}-\text{O}$) и ν_3 (деформационное $\text{H}-\text{N}-\text{O}$) для всех электронных состояний обеих молекул. Определен параметр асимметрии углового распределения фотоэлектронов для различных переходов. Оценена величина длины связи $\text{N}-\text{O}$ в отрицат. ионе HNO^- : $1,33 \pm 0,02$ А. Библ. 62.

М. Т.

IX
+2ф. 1984, 18,
N 1

ДНО(З, м.п.)
КНО^т (м.п.)



HNO

HNO⁻

Ac, Vi;

Om-17022

1983

99: 13401a Photoelectron spectroscopy of nitroxyl (HNO⁻ and DNO⁻). Ellis, H. Benton, Jr.; Ellison, G. Barney (Dep. Chem., Univ. Colorado, Boulder, CO 80309 USA). *J. Chem. Phys.* 1983, 78(11), 6541-58 (Eng). The photoelectron spectra of HNO⁻ and DNO⁻ were obtained by using a recently constructed neg. ion photoelectron spectrometer. Detachment to 3 different electronic states of HNO and DNO were obsd., namely the $\tilde{X}^1A'$, $\tilde{d}^3A''$, and $\tilde{A}^1A''$ states. The electron affinity of HNO is 0.338 ± 0.015 eV while that of DNO is 0.330 ± 0.015 eV. The $\tilde{d}^3A''$ state, which has not been obsd. directly before, is 0.778 ± 0.020 eV above the $\tilde{X}^1A'$ state in HNO and 0.785 ± 0.020 eV in DNO. Vibrational excitation up to $\nu_2 = 3$ of the ν_2 (N-O stretch) mode in the HNO and DNO $\tilde{X}^1A'$ state was obsd. In the $\tilde{d}^3A''$ and $\tilde{A}^1A''$ states, excitation of both ν_2 and ν_3 (H-N-O bend) modes was obsd. The fundamental frequencies for the $\tilde{d}^3A''$ state are $\nu_2 = 1468 \pm 140$ cm⁻¹ and $\nu_3 = 992 \pm 150$ cm⁻¹ for HNO and $\nu_2 = 1452 \pm 140$ cm⁻¹ and $\nu_3 = 750 \pm 140$ cm⁻¹ for DNO. Anal. of transitions from vibrationally excited ionized gives a ν_2 fundamental frequency of 1153 ± 170 cm⁻¹ in HNO⁻. A study of the angular distribution of the photodetached electrons yields the values of β , the anisotropy parameter, for the various transitions in the spectrum. A Franck-Condon factor anal. of the HNO $\tilde{X}^1A'$ band results in an est. of the N-O bond length in the neg. ion of 1.33 ± 0.02 Å.

(X)
(f3)

C.A. 1983, 89, v2

HNO

NOH

H_2NOH

H_3NO

HNOH_2

Испресс

изомеризация,

Di , полимер.,

структура.

1983

Frisch M. J., Raghava-
chari Krishnan, et al.

Chem. Phys., 1983,

78, N 3, 323-329.

(сер. $\bullet$ H_2CNH ; III)

ИНО

10M-18093 1

1983

структура,
спектр,
лазерная
электро-
оптика

Mirota E.,

J. Phys. Chem.,
1983, 87, N 18,

3375-3383.

ANO

[Om. 17602]

1983

UK cncmp

Johns F.W.C., McKellar

A.R.W.,

et al.,

Bull. Soc. Chim. Belg.
1983, ● 92, N6-7, 514.

HNO

1983

3 Б1233. Инфракрасный спектр HNO. The infrared spectrum of HNO. Johns J. W. C., McKellar A. R. W., Weinberger E. «Bull. Soc. chim. belg.», 1983, 92, № 6—7: 16th Int. Symp. Free Radicals, Lausanne—Ottignies, Sept. 12—16, 1983, 514 (англ.)

С высоким разрешением измерены колебательно-вращательные спектры молекул HNO и DNO образующихся в проточной системе при взаимодействии атомов водорода или дейтерия с NO. Полный анализ вращательной структуры выполнен только для полос ν_1 . Значения молек. постоянных ν_1 , A, B, C (в см^{-1}): HNO — 2683,95210; 17,673016; 1,4191542; 1,3069196; DNO — 2025,13854; 10,2362417; 1,2924089; 1,1430626. Наблюдались также полосы ν_2 .

В. М. Ковба

М.А., ν_1

X. 1984, 19, №3

HNO
DNO

Ом. 17546, 17028 1983

1 Л187. ИК-спектр HNO. The infrared spectrum of HNO. Johns J. W. C., McKellar A. R. W., Weinberger E. «Can. J. Phys.», 1983, 61, № 7, 1106—1119 (англ.; рез. фр.)

Получены спектры ИК-поглощения HNO и DNO, образованных в ВЧ-разряде смеси водорода с NO, в области $1500-2750\text{ см}^{-1}$ с использованием фурье-спектрометра с разрешением $\sim 0,004\text{ см}^{-1}$. Приведены частоты колебательно-вращательных линий. Выполнен анализ полос ν_1 , ν_2 и ν_3 молекулы HNO и ν_1 и ν_2 DNO с привлечением данных по лазерной штарковской спектроскопии. Отмечены трудности анализа полос ν_2 и ν_3 , связанные с их низкой интенсивностью и кориолисовым взаимодействием этих состояний.

М. В. Т.

ν_i , м.п;

ср. 1984, 18, N1

HNO

Om. 17546, 17028 1983

22 Б183. Инфракрасный спектр HNO. The infrared spectrum of HNO. Johns J. W. C., McKellar A. R. W., Weinberger E. «Can. J. Phys.», 1983, 61, № 7, 1106—1119. (англ.; рез. фр.)

С разрешением ограниченным доплеровским уширением ($\sim 0,005 \text{ см}^{-1}$) измерены колебательно-вращательные спектры HNO и DNO в области фундаментальных полос ν_1 ($\sim 2680 \text{ см}^{-1}$) и ν_2, ν_3 ($\sim 1500—1570 \text{ см}^{-1}$). Молекулы HNO (DNO) образовывались в проточной системе при взаимодействии атомарного (МВ-разряд) водорода (дейтерия) с NO. Оптим. парц. давл. компонент, соотв., 1 и ~ 2 мм (в случае DNO давления на 50% выше). Использовался фурье-спектрометр и две системы регистрации: охлаждаемый жидким азотом InSb-детектор с несохлаждаемым интерференц. фильтром (полоса ν_1) и низкот-ный ($\sim 4 \text{ K}$) Cu/Ge-детектор с интер-

М.П;

X. 1983, 19, № 22

ференц. фильтром, вмонтированным внутри охлаждаемо-
 го корпуса детектора (область $< 1800 \text{ см}^{-1}$). Приведено
 положение и отнесение линий вращательной структуры
 полос. Полный анализ структуры выполнен только для
 полос ν_1 и ν_2 . Значения мол. постоянных HNO ν_0 , A ,
 B , C , $\Delta_K(10^3)$, $\Delta_{JK}(10^5)$, $\Delta_J(10^6)$, $\delta_K(10^5)$, $\delta_J(10^7)$,
 $\Phi_K(10^6)$, $\Phi_{JK}(10^8)$ (в см^{-1}): основное состояние 0;
 18,4760692; 1,4114035; 1,3064085; 4,2854; 9,4503; 3,9149;
 7,175; 3,0689; 2,893; —; ν_1 2683,95210; 17,673016;
 1,4191542; 1,3969196; 5,0821; 8,145 4,0654; 10,620; 2,615;
 7,535; —5,37; ν_2 1565,3481; 18,573591; 1,401273; 1,29908;
 3,957; 15,04; 5,76; 2,62; —1,11; —1,87. Постоянные ко-
 лебательно-вращательного взаимодействия α_1^A , α_1^B ,
 α_1^C , α_2^A , α_2^B , α_2^C , α_3^A , α_3^B , α_3^C равны соотв. (см^{-1}):
 +0,803053; —0,007751; —0,000501; —0,097522;
 +0,010131; +0,007329; —0,345451; +0,001384;
 +0,014949. Аналогичные данные приведены для DNO .
 Значения ν_0 , A , B , C , для HNO полоса ν_3 1500,8192;
 18,82152; 1,41002; 1,29146.

В. М. Ковба

HNO

Om. 17546
17028

1983

99: 148830k The infrared spectrum of nitroxyl (HNO). Johns, J. W. C.; McKellar, A. R. W.; Weinberger, E. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Can. J. Phys.* 1983, 61(7), 1106-19 (Eng). The vibration-rotation spectra of HNO (DNO) were obsd. in a flow system following the reaction of H(D) atoms with NO. The spectra were recorded at approx. Doppler-limited resolu. with a large Fourier-transform spectrometer. Complete analyses were made of the ν_1 bands of HNO and DNO. The spectra of ν_2 (NO stretching) were also obsd. in both HNO and DNO, but ν_3 (bending) proved too weak to be detected in either mol.

UK chempr

C.A. 1983, 99, N18

HNO

1983

8 Д803. Времена жизни флуоресценции и спектры возбуждения радикала HNO, охлажденного в сверхзвуковой струе. Fluorescence lifetimes and excitation spectra of the jet cooled HNO radical. Ohi Kinichi, Matsumi Yutaka, Takeda Yasuaki, Mayama Shinya, Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 95, № 6, 520—524 (англ.)

Методом возбуждаемой лазером флуоресценции с разрешением во времени получен спектр системы $\tilde{A}^1A'' \leftarrow \tilde{X}^1A'$ радикала HNO и определены времена жизни отдельных колебательно-вращательных уровней состояния $\tilde{A}^1A''$ ($\tau = 22 \div 29$ мкс). Радикалы HNO получали в фотохимич. реакторе, разработанном авторами, и охлаждались до вращательной т-ры ~ 16 К при сверхзвуковом расширении в вакуум. Образование радикалов HNO в реакторе осуществлялось в ходе реакций Hg-фотосинтеза: $\text{Hg} + h\nu$ (253,7 нм) $\rightarrow \text{Hg}^*(6^3P_1)$, $\text{Hg}^* + \text{H}_2 \rightarrow \text{HgH} + \text{H}$, $\text{H} + \text{NO} + \text{M} \rightarrow \text{HNO} + \text{M}$, $\text{HgH} + \text{NO} \rightarrow \text{HNO} + \text{Hg}$.

В. А. Елохин

спектр

сп. 1983, 18, № 8

HNO

1983

98:169881x Fluorescence lifetimes and excitation spectra of the jet-cooled nitrosyl hydride (HNO) radical. Obi, Kinichi; Matsumi, Yutaka; Takeda, Yasuaki; Mayama, Shinya; Watanabe, Hajime; Tsuchiya, Soji (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Chem. Phys. Lett.* 1983, 95(6), 520-4 (Eng). A new nozzle assembly using Hg-photosensitized reaction was developed to obtain a jet-cooled radical beam. This technique was applied to produce a HNO radical beam. Laser-induced fluorescence excitation spectra were obtained for the $\tilde{A}^1A'' \leftarrow \tilde{X}^1A'$ system. Time-resolved measurements yielded fluorescence lifetimes of 22-29 μs for single rovibronic levels of HNO.

photochem.
2

C. A. 1983, 98, N20.

HNO

1983

14 Б1319. Времена жизни и спектры возбуждения флуоресценции радикала HNO, охлажденного в струе. Fluorescence lifetimes and excitation spectra of the jet-cooled HNO radical. Ohi Kinichi, Matsumi Yutaka, Takeda Yasuaki, Mayama Shinya, Watanabe Hajime, Tsuchiya Soji. «Chem. Phys. Lett.», 1983, 95, № 6, 520—524 (англ.)

: Создана новая сопловая установка (СУ) для получения пучка охлажденных радикалов. Смесь H_2 и NO при давл. несколько десятков Торр и Ar при давл. 200—300 Торр пропускали над Пв Hg и впускали в СУ. Радикалы HNO получали в р-ции NO с атомами H, генерируемыми в р-ции H_2 с фотовозбужденными (253,7 нм, Hg-лампа низкого давл.) атомами $Hg(6^3P_1)$, приводящей к HgH и H. Пучок, содержащий HNO, освещали лучом перестраиваемого лазера на красителе; длительность импульса 5 нс, накачка лазером на N_2 . Измерены спектры возбуждения флуоресценции (Фл) HNO в диапазоне 620—710 нм. Наблюдали пе-

спектр,
м.п.;

х. 1983, 19, № 4.

переходы с уровня (000) основного состояния на вибронные уровни (100), (020), (010) и (001) состояния $\bar{A}^1A''$. Для индив. ровибронных уровней измерены бесстолкновительные времена жизни Φ_l , меняющиеся от 22 до 29 мкс. Уровень 010, $K'=1$, $J'=2$ дает две компоненты затухания с временами 12 и 40 мкс. Результаты хорошо согласуются с экстраполяцией по зависимости Штерна—Фольмера.

Л. И. Лившин

NOH

1983

Pople John A., Raghava-
chari Krishnan, et al.

Vo, mēopem.
pōrēm.

J. Am. Chem. Soc. 1983,
105(21), 6389-99.

( ~~cur.~~ ~~A~~NC; III)

HNO^+

1983

М.Н., ξ_i ,
расчет

21 Б14. Теоретическое предсказание структуры электронного спектра HNO^+ . Theoretical anticipation of the structure of the HNO^+ electronic spectrum. Perić M., Fejzo J., Mladenović M. «Гласн. Хем. друш. Београд», 1983, 48, № 1—2, 123 (англ.)

Проведены неэмпирич. расчеты вибронных и вращательных энергетич. уровней радикала HNO^+ в состоянии $^2\Pi$. Результаты расчетов подтверждают высказанное Герцбергом предположение, что неидентифицированная ранее система уровней обусловлена переходом между двумя низшими электронными состояниями HNO^+ .

Резюме

X. 1983, 19, N 21

HNO^+

[Om. 16943]!

1983

Rö'melt F.B.,

neop.
pacem

Phys. Bl., 1983, 39, N7,
226-232.

МНО

[Um. 16922]

1983

аб initio
расчет
геометрии
низких
возбужд.
состоян.
и принцип.
состоян.

Sannigrahi A. B.,
Mookherjee D. C., et al.,
Int. J. Quantum. Chem.,
1983, 23, N5, 1695-
-1705.

HNO

1983

Sellers Marrell.

теорет.
полетом,
проверка
сметого

THEOCHEM 1983, 9,
(3-4), 361-372.

(сир. HOF; III)

MNO

[Om. 20765]

1984

Burdett J.K., Lawrence N.J.,
et al.,

Inorg. Chem., 1984, 23,
N 16, 2419-2428.

Электро-
отрицат.,
структур.

св. 336 в
мол-лах

HNO

1984

Carter S., Mills I. M.,
et al.

потемн.
поверхн.

J. Mol. Spectrosc.
1984, 106 (2), 411-22.

(см. H₂O; III)

HNO

1984

' 101: 119754t Predissociation of the nitrosyl deuteride(DNO) molecule and the bond dissociation energy for deuterium oxonitrate $\rightarrow$ atomic deuterium + nitric oxide. Dixon, R. N.; Rosser, C. A. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *Chem. Phys. Lett.* 1984, 108(4), 323-7. (Eng). Five vibronic transitions of the $A^1A''-X^1A'$ band system of DNO(I) were studied by using laser-induced fluorescence excitation, and a rotational anal. was done. Breaking-off was detected in a total of 6 subbands in 3 of these transitions. Extrapolation of the J -dependent predissocn. thresholds to $J=0$, using a calcn. based on a potential energy surface for HNO/I, leads to an improved value for the dissocn. energy $D_0^\infty=17,030\pm 10$ cm $^{-1}$ for $I\rightarrow D+NO(2\Pi)$. The H/D isotope shifts of D_0^∞ , and of the J -dependence of the threshold, confirm an earlier proposal that predissocn. follows a rotationally assisted internal conversion to the ground-state continuum.

(D_0^∞)

~~101~~(4)

DNO



C.A. 1984, 101, N 14

HNO

(om. 21191)

1984

9 Л161. Микроволново-оптический двойной резонанс в состоянии $\bar{A}^1A''(000)$ молекулы HNO. Microwave-optical double resonance of HNO in the $\bar{A}^1A''(000)$ state. Petersen J. C., Saito S., Amano T., Ramsay D. A. «Can. J. Phys.», 1984, 62, № 12, 1731—1737 (англ.; рез. фр.)

Методом оптически-микроволнового двойного резонанса с использованием лазера на красителе с помощью 60—100 мВт и клистронов (25—77 ГГц) исследован МВ-спектр возбужденного электронного состояния $\bar{A}^1A''(000)$ молекулы HNO. Идентифицированы линии 29 вращательных переходов с $J \leq 12$. Обнаружены аномалии в частотах переходов, достигающие несколько сотен МГц и обусловленные электрон-вращательными кориолисовыми взаимодействиями. Определены значения вращательных и квартичных центробежных постоянных.

М. Р. Алиев

М.П.

ср. 1985, 18, №9

NHO

[Om. 21191]

1984

102: 86662b Microwave-optical double resonance of nitrosyl hydride (HNO) in the $A^1A''(000)$ state. Petersen, J. C.; Saito, S.; Amano, T.; Ramsay, D. A. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *Can. J. Phys.* 1984, 62(12), 1731-7 (Eng). Twenty-nine rotational transitions of HNO in the $A^1A''(000)$ excited state were measured by microwave-optical, and radio-frequency-optical double resonance spectroscopy. Most of the obsd. lines are perturbed by a few to a few hundred MHz. Improved values were obtained for the rotational consts. B and C and for the centrifugal distortion const. δ_i . Microwave ODR lines were also obsd. between levels of the A^1A'' excited state, high rovibronic levels of the X^1A' ground state, and levels of the $\tilde{a}^3A''$ state. One of the lines shows a larger magnetic effect, suggesting a perturbation by a level of the $\tilde{a}^3A''$ state.

 $\tilde{A}^1A''$ (onmun. gboit.
pexhatic)C.A. 1985, 102, N10

HNO

1984

19 Б4476. Распределение по внутренним энергиям молекул HNO (A^1A''), образованных в реакции $H+NO$. The internal energy distribution of HNO (A^1A'') formed in the reaction of $H+NO$. Yoshimura Y., Ohyama H., Hamada T., Kasai T., Kuwata K. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 106, № 4, 271—275 (англ.)

При разрешении 3 нм в области 300—900 нм исследованы спектры Хл возникающей в зоне пересечения молек. пучков $H+NO$ и $D+NO$ и обусловленной образованием молекул HNO и DNO соотв. в электронно-возбужденном состоянии A^1A'' . Константа скорости испускания света в р-ции $H+NO \rightarrow HNO (A^1A'')$ (1) найдена равной $\sim 10^{-17}$ см³/(молекула·с) (сечение $\sim 10^{-3}$ нм²). В типичных условиях эксперимента плотности NO и атомов H в зоне пересечения пучков с тепловыми энергиями равны 10^{13} и 10^{11} молекула/см³ соотв. Показано, что в р-ции (1) преимущественно заселяется колебат. состояние (000) молекулы HNO (A^1A''). Форма и положение эмиссионной полосы DNO в переходе $A^1A'' (000) \rightarrow X^1A' (000)$ соответствуют вращат. т-ре 300 ± 100 K.

спектр

X. 1984, 19, N 19

(преимущественное заселение вращат. уровней в области $J=9$).
В. Е. Скурат

ЧНО

1984

10 Л422. Распределение внутренней энергии возбуждения радикалов $\text{HNO}(\bar{A}^2A'')$ образующихся в реакции $\text{H} + \text{NO}$. The internal energy distribution of $\text{HNO}(\bar{A}^2A'')$ formed in the reaction of $\text{H} + \text{NO}$. Yoshimura Y., Ohyama H., Hamada T., Kasai T., Kuwata K. «Chem. Phys. Lett.», 1984, 106, № 4, 271—275 (англ.)

С использованием техники скрещенных молекулярных пучков получены спектры хемилюминесценции реакций $\text{H} + \text{NO} \rightarrow \text{HNO}$, $\text{D} + \text{NO} \rightarrow \text{DNO}$. Наблюдаемые спектры приписаны переходу $\bar{A}^1A'' \rightarrow X^1A'$. В результате анализа полученных спектров сделано заключение о том, что радикалы $\text{HNO}(\bar{A}^1A'')$ образуются в ходе реакции главным образом в колебательном состоянии (000), а вращательное распределение радикалов соответствует комнатной температуре. Библ. 16.

В. А. Е.

спектр

фр. 1984, 18, N 10

НОМ

ОМ. 18491

1984

Знобича Т. С., Чаркин О. П.,

теор. расчёт
энергии
изомеризац,
№

Же. теорет. Желесее,
1984, 29, № 3, 598-606.

НОЧ⁺

Лом. 18491

1984

Знобича Т. С., Заркевич
О. П.,

теор. расчет
энергии
излучения,
№

ЖС. теорет. физика,
1984, 29, №3, 598-606.

HON

1985

Abbate Alison D.,
Moore C. Bradley.

UK екстр
в майорце,
Vi, м.п.

J. Chem. Phys., 1985,
82, N3, 1255-1262.

●
(cell. HCN; III)

HNO

Ст. 22403

1985

6 Б1123. Потенциальная функция HNO в состоянии $\tilde{A}^1A''$, полученная с использованием вибронного (реннер-теллеровского) вариационного расчета. A potential function for HNO $\tilde{A}^1A''$ derived using a vibronic «Renner—Teller» variational calculation. Carter S., Dixon R. N. «Mol. Phys.», 1985, 55, № 3, 701—712 (англ.)

Построена аналитич. потенциальная функция для молекулы HNO в возбужденном электронном состоянии $\tilde{A}^1A''$. Потенциал представлен в виде комбинации двухчастичных вкладов, соотв. диссоциац. каналам, и трехчастичного члена. Параметры подобраны по совокупности эксперим. (спектроскопич. и термодим.) данных и результатов квантовомех. расчетов. Особенностью подхода является учет вибронной связи состояний, коррелирующих с состояниями $^1\Pi$ и $^1\Delta$ линейной молекулы. С построенной потенциальной поверхностью вариационным методом рассчитаны уровни колебат. энергии для HNO и DNO, к-рые существенно лучше согласуются с эксперим. данными, чем уровни, полученные без учета вибронной связи.

А. В. Немухин

М.А.

Х. 1986, 19, № 6.

HNO

от. 22403 1985

2 Д79. Потенциальная функция для $\text{HNO } \tilde{A}^1A''$, введенная с использованием вибронного вариационного расчета (Реннера—Теллера). A potential function for $\text{HNO } \tilde{A}^1A''$ derived using a vibronic (Renner—Teller) variational calculation. Carter S., Dixon R. N. «Mol. Phys.», 1985, 55, № 3, 701—712 (англ.)

В рамках модели Маррелла и др. (Murrell J. N., et al. «Mol. Phys.», 1981, 42, 605) построена в аналитич. виде поверхность потенц. энергии при $\tilde{A}^1A''$ состояния молекулы HNO как результат диагонализации гамильтониана в представлении двух электронных компонент, трансформирующихся в $^1\Delta$ и $^1\Pi$ состояния для линейной геометрии. Матричные элементы гамильтониана составлены с использованием спектроскопической и термохимич. информации и данных неэмпирич. расчетов. Вариац. расчет положений колебат. уровней $\tilde{A}^1A''$ терма для молекул HNO и DNO в базисе 220 ф-ций привел к среднему отклонению от эксперим. величин $+9 \text{ см}^{-1}$ и -10 см^{-1} соответственно. А. Ф. Шестаков

М. Н., & i;

ср. 1986, 18, №2

НМО

1985

19 Б1343. Определение полного набора связанных вибронных состояний HNO в его возбужденном электронном состоянии $\tilde{A}^1A''$. The characterization of the complete set of bound vibronic states of HNO in its excited $\tilde{A}^1A''$ electronic state. Dixon R. N., Rosser C. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 262—276 (англ.)

(ξ_i , м.п.)

С использованием перестраиваемого лазера измерены спектры возбуждения молекул HNO в области перехода $\tilde{A}^1A'' - \tilde{X}^1A'$. Впервые обнаружены слабые полосы, обусловленные переходами 002—000 (15 200—15 000 см^{-1}) и 003—000 (15 080—15 010 см^{-1}). Выполнен анализ вращат. структуры этих полос, а также расширен до более высоких I анализ полос 010—000 и 100—000. Показано, что сильное корриolisово взаимодействие между уровнями $K_a' = 8$ возбужденного вибронного состояния 010 и уровней $K_a' = 9$ состояния 001 вызывает возмущения вращат.

X. 1986, 19, N 19

структуры, достигающие 9 см^{-1} . Из анализа расположения колебат. уровней в возбужденном состоянии сделан вывод, что вибронное взаимодействие вносит существенный вклад в энергии высших уровней деф. кол. Наблюдаемые обрывы вращат. структуры в полосе 010 при $K_a' = 9$ и $I = 18$ и полосе 003 при $K_a' = 3$, $I = 9$ согласуются с представлениями о механизме диссоциации состояния $\tilde{A}$ и со значением D_0^0 , равным $16\,450 \text{ см}^{-1}$.

С. Б. Осин

HNO

1985

11 Л230. Характеристика полного набора связанных колебательных состояний радикала HNO в возбужденном электронном состоянии $\tilde{A}^1A''$. The characterization of the complete set of bound vibronic states of HNO in its excited $\tilde{A}^1A''$ electronic state. Dixon R. N., Rosser C. A. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 262—276 (англ.)

Получены спектры возбуждения лазерной флуоресценции перехода $\tilde{A}^1A'' \leftarrow \tilde{X}^1A''$ радикала HNO . В спектрах наряду с интенсивными полосами зарегистрированы слабые полосы (002—000) и (003—000). Выполнен детальный колебательно-вращательный анализ полученных спектров. Проанализированы вращательные возмущения между уровнями $K_{\alpha}'=8$ колебательного состояния (010) и $K_{\alpha}'=9$ состояния (001). Определены молекулярные постоянные состояния $\tilde{A}^1A''$. В. А. Е.

(М.П.)

ф. 1986, 18, № 11.

HNO

(Om. 22403)

1985

103: 129456c A potential function for nitrosyl hydride (HNO) $\tilde{A}^1A'$ derived using a vibronic (Renner-Teller) vibrational calculation. Carter, S.; Dixon, R. N. (Dep. Chem., Univ. Reading, Whiteknights/Reading, UK RG6 2AD). *Mol. Phys.* 1985, 55(3), 701-12 (Eng). An analytic potential function for the $\tilde{A}^1A'$ state of HNO/DNO was constructed using spectroscopic term values, thermochem. data, and the results of ab initio calcs. The potential function is of the 2-valued model introduced by S. Carter et al. (1981) and corresponds to the lower eigenvalue of a 2×2 matrix with components that transform as $^1\Pi$ and $^1\Delta$ for linear geometries. The vibronic Hamiltonian takes into account the non-adiabatic energy arising from the Renner-Teller effect. Its eigenvalues were obtained variationally using a large basis set, and fitted to exptl. data with a mean error of 16 over a 5000 cm^{-1} energy range. A crit. discussion of this potential function underlines the desirability of further ab initio calcs., particularly for linear and nearlinear geometries.

$\tilde{A}^1A''$

(nonlinear)

gs - Π

C. A. 1985, 103, N 16.

HNO

[om. 21659]

1985

Declera P., Lisini A.,

meopem.
pacrem.

Chem. Phys., 1985, 97,
95-102.

HNO

Om. 23531

1985

102: 175578w The characterization of the complete set of bound vibronic states of nitrosyl hydride (HNO) in its excited $\tilde{A}^1A''$ electronic state. Dixon, R. N.; Rosser, C. A. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *J. Mol. Spectrosc.* 1985, 110(2), 262-76 (Eng). Laser-induced fluorescence excitation spectra of the HNO $\tilde{A}A''-\tilde{X}^1A'$ band system were recorded with high sensitivity. This has enabled detection of the Franck-Condon unfavored vibronic bands (002)-(000) and (003)-(000), thereby completing the set of fully bound vibronic levels in the $\tilde{A}$ state. Extensions were also made to other bands. A strong Coriolis resonance between the $K'_a = 8$ levels of the excited (010) vibronic state and the $K'_a = 9$ levels of the (001) state leads to rotational perturbations of up to 9 cm^{-1} . The (100-000) band includes weak axis-tilting branches. It is concluded from the vibrational energy level spacings that vibronic interaction makes an important contributions to the energies of the higher bending levels, consistent with the correlation of the $\tilde{A}A^1A''$ state with a component of a $^1\Delta$ state for linear HNO.

(Коробам-
уровни)

$\tilde{A}A''-\tilde{X}^1A'$

C.A. 1985, 102, N20

HNO

1985

Dwivedi C. P. D.

Proc. Natl. Acad. Sci.,
India. Sect. A 1985, 55(3),
292-6.

meop.
pacrim.

●
(ver. HCN; III)

HNO

1985

103: 166375w One-electron properties of nitrosyl hydride molecule. Espinosa Garcia, J.; Lopez Pineiro, A.; Olivares del Valle, F. J. (Dep. Phys. Chem., Univ. Extremadura, Badajoz, Spain). *Can. J. Chem.* 1985, 63(9), 2482-4 (Eng). SCF 1-electron property calcns. are reported for the HNO mol., using several types of Gaussian basis sets. An assessment is made of the size and type of basis set necessary to yield values for various 1-electron properties that approach the best calcd. or exptl. results. The charge distribution is not improved by including the Gaussian lobe functions.

mcop. paczem

C.A. 1985, 103, N20

MNO

1985

4 Д107. Одноэлектронные свойства молекулы HNO.
One-electron properties of HNO. Garcia J. Espino-
sa, López Pineiro A., Del Valle F. J. Olivares. «Can. J.
Chem.», 1985, 63, № 9, 2482—2484 (англ.; рез. фр.)

Электронные волн. ф-ции молекул HNO и H₂O в
равновесных геометрич. конфигурациях рассчитаны в
приближении ССП с использованием ряда различных
гауссовых базисов. Найдены значения полной энергии,
мультипольные моменты зарядовых распределений и
градиенты электр. поля на ядрах; для некоторых ве-
личин проведено сопоставление с эксперим. данными.
Отмечено систематич. улучшение теоретич. оценок од-
ноэлектронных свойств при включении в базисы поля-
ризационных ф-ций и важность выбора оптимальной
схемы сжатия базиса, в частности показаны преиму-
щества схемы Даннинга перед схемой Хузинаги — Са-
каи (Huzinaga S., Sakai S. «J. Chem. Phys.», 1969, 47,
201). Установлено, что расширение базисов связевыми
ф-циями или ф-циями на центре масс молекул нецеле-
сообразно с точки зрения сбалансированного описания
зарядового распределения.

А. В. Зайцевский

(М.П.)

ср 1986, 18, № 4

HNO

1985

У 7 Б1028. Одноэлектронные свойства HNO. One-electron properties of HNO. Garcia J. Espinosa, Piñero A. López, Del Valle F. J. Olivares. «Can. J. Chem.», 1985, 63, № 9, 2482—2484 (англ.; рез. фр.)

одноэлектрон.
св-ва

Ограниченным методом ССП рассчитан ряд одноэлектронных св-в молекулы HNO в основном электронном состоянии. Исследовано влияние базиса на точность рассчитанных св-в. Используются различные базисы сгруппированных гауссовых ф-ций: базисы Хузинаги ($[13s7p]/[4s2p]$ на N и O и $(4s)/[2s]$ на H) и базисы Хузинаги, дополненные поляризац. ф-циями, s-ф-циями на связях и s-ф-циями в центре масс молекулы; для оценки влияния способа группировки базиса использованы также 2 различных базиса Даннинга. При эксперим. равновесной геометрии молекулы HNO рассчитаны дипольные и квадрупольные моменты, напряженность и градиенты эл. поля на ядрах, силы Гельмана—Фейнмана.

А. А. Сафонов

X. 1986, 19, N 7.

ANO

1985

19 Б1272. Спектроскопия возбуждения лазером на красителе DNO с разрешением, ограниченным доплеровским контуром: преддиссоциация DNO. Doppler-limited dye laser excitation spectroscopy of DNO: predissociation of DNO. Petersen J. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1985, 110, № 2, 277—300 (англ.)

С использованием перестраиваемого лазера на красителе с разрешением, ограниченным доплеровским контуром, измерены спектры возбуждения молекул DNO в обл. полос 110—000 и 021—000 электронного перехода $\tilde{A}^1A'' - \tilde{X}^1A'$ (16 530—16 860 см^{-1}). Молекулы DNO в газ. фазе генерировали посредством пиролиза его аддукта с 9,10-диметилантраценом. Всего зарегистрировано >1200 линий из к-рых 1112 отнесено к подполосам 9 и 11 соотв. полос. Выполнен анализ вращат. структуры полос и рассчитаны спектроскопич. постоян-

(М.П., Д.О.)

Х. 1986, 19, № 19

ные A , B , C , $\Delta_K \cdot 10^3$, $\Delta_{IK} \cdot 10^4$, $\Delta_I \cdot 10^5$, $\delta_K \cdot 10^3$,
 $\delta_I \cdot 10^6$, $H_K \cdot 10^3$, T (см^{-1}): состояние 110—12,0735(15),
 1,1874(3), 1,0650(3), $-0,60(9)$, $-0,16(3)$, $0,44(4)$,
 $0,96(11)$, $0,4(3)$, $-0,196(22)$, 16,751,404(5), состояние
 021—12,683(7), 1,18489(10), 13,1(4), $0,69(5)$, $0,406(15)$,
 $0,24(4)$, $0,52(9)$, $0,07(4)$, 16665,032(4). Энергия диссо-
 циации оценена в $17010 \pm 10 \text{ см}^{-1}$. С. Б. Осин

HNO⁺

[DM 24345]

1985

Peric' M., Peyerimhoff S. D.,
et al.,

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

ab initio
расчет
эффекта
Реммер-
Теллера

HNO

1985

12 Б1183. Микроволново-оптический двойной резонанс в HNO. Дипольный момент HNO в состоянии $\tilde{A}'A''(100)$. Microwave optical double resonance of HNO: Dipole moment of HNO in $\tilde{A}'A''(100)$. Takagi Kojiro, Suzuki Tetsuo, Saito Shuji, Hirota Eizi. «J. Chem. Phys.», 1985, 83, № 2, 535—538 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

М.П.

Методом микроволнового-оптич. двойного резонанса исследованы штарковские расщепления линий отдельных вращат. переходов (с $K_a=2$ и 3) в состояние $\tilde{A}'A''(100)$ молекулы HNO. Получены след. значения компонент и полного дипольного момента (в Д) HNO в состоянии $\tilde{A}'A''(100)$: $K_a=2$ — $\mu_a=1,057$, $\mu_b=1,311$, $\mu_{\text{полн}}=1,684$; $K_a=3$ — $\mu_a=1,089$, $\mu_b=1,311$, $\mu_{\text{полн}}=1,704$ (для основного состояния $X'-A'$ HNO $\mu_a=0,996$ и $\mu_b=1,28$). В. М. Ковба

X. 1987, 19, № 12

HNO

1985

103: 131426m Microwave optical double resonance of nitrosyl hydride: dipole moment of nitrosyl hydride in $\tilde{A}^1A''(100)$. Takagi, Kojiro; Suzuki, Tetsuo; Saito, Shuji; Hirota, Eizi (Dep. Phys., Toyama Univ., Toyama, Japan 930). *J. Chem. Phys.* 1985, 83(2), 535-8 (Eng). The microwave ODR technique was used to observe the Stark splittings of some rotational lines for HNO in the $\tilde{A}^1A''(100)$ state. The components of the dipole moment of HNO in $\tilde{A}^1A''(100)$ were detd. as $\mu_a = 1.057(6)$ and $1.089(6)$ D for $K_a = 2$ and 3 , resp., and $\mu_b = 1.311(8)$ D.

Умарк.
расизми.
Франца. Линий

С. А. 1985, 103, N 16.

HON⁺

1985

Webster Brian, Milczek
Maria, et al.

et. n. J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1985, Pt 2, 81,
N12, 1761-1769.

(cur. CO; III)

1985

HNO
HON

Webster Brian, Hilczek
Maria, et al.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1985, Pt 2, 81, N12,
1761-1769.

ser. n.

(coll. CO; III).

HND

1986

Adams George F.,
Bent Gary D.

Report 1986, BRL-TR-
2737; Gov. Rep. Announ-
ce. Index (U.S.) 1986, 86
(22), ● Abstr. № 698, 694.
(see. HCD; III)

попечен.
поверхн.,
теор.
расчет.

МНО

1986

8 Д50. Применение метода гибридных атомных орбиталей для определения изменений валентных углов молекул при возбуждении. Баранов В. И., Тен Г. Н. «Изв. Тимирязев. с.-х. акад.», 1986, № 3, 180—185 (рез. англ.)

Выполнены расчеты изменений валентных углов молекул HNO , H_2CO , $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_2$ и $\text{H}_4\text{C}_4\text{N}_2$ при переходе в первое возбужденное синглетное состояние предложенным ранее методом. Показано, что для всех молекул наиболее оптимальной является 11а-модификация метода ГАО. Сформулировано правило выбора знаков нормировочных коэф. ГАО. В качестве примера приведены результаты расчета спектра поглощения молекулы глиоксаля. Резюме

М.П.

(+3)

~~18~~

ср. 1986, 18, № 8

ИНО

[Ом. 23597]

1986

Баранов В.И., Тен Р.Н.,

структ.
при воз-
душной
теор. рас-
чет

Ив. Тимирязев. с.-х.
акад., 1986, № 3, 180 -
185.

HNO⁺
HNO

[лет. 24/95]

1986

Чаркин О. П.,
Знобук Т. С.

расчет
Его и
барьер
измер.

Кордимац. м. м. м.,
1986, 12, N 8, 1011-1037.



HNO

1986

Declera Piero, Lisini A.

(7)
pacrim

Chem. Phys. 1986, 106

(1), 39 - 49.

(cell. N₂; III)

HNO

On 25244 1986

структур-
параметры,
анал. расч.C.A. 1987,
106, 118

106: 57947a A simultaneous determination of third-order vibrational anharmonicity constants and equilibrium structure. Molecular structure of non-linear HXY-type molecules. Hirota, Eizi (Inst. Mol. Sci., Okazaki, Japan 444). *Nippon Kagaku Kaishi* 1986, (11), 1438-45 (Japan). In order to eliminate ambiguities in spectroscopically detd. mol. structure caused by intramol. vibrations, a method was developed which analyzed ground-state rotational const. and vibration-rotation const. of a sufficient no. of isotopes simultaneously by the least-squares method using equil. structure parameters and 3rd-order anharmonicity const. as adjustable parameters. The method was applied to HNO/DNO and HOCl/DOCl, for both of which not all vibration-rotation const. were detd., preventing the equil. structure from being detd. through a conventional procedure of calcg. equil. rotational const. The equil. structures obtained are $r_e(\text{H-N})$: 1.0628(25) Å, $r_e(\text{N-O})$: 1.2058(27) Å, and $\theta_e(\text{HNO})$: 109.09(24)° for HNO and $r_e(\text{H-O})$: 0.9654(35) Å, $r_e(\text{O-Cl})$: 1.6891(29) Å, and $\theta_e(\text{HOCl})$: 103.21(60)° for HOCl, with 3 std. deviations in parentheses. The anal. yielded some of the 3rd-order anharmonicity const., which were indispensable in analyzing vibrational changes of mol. const. and discussing the dynamical behavior of mols. The diagonal 3rd-order const. are F_{111} : -25.31(22) aJ Å⁻³, F_{222} : -21.8(8.4) aJ Å⁻³, and F_{333} : -0.42(1.14) aJ rad⁻³ for HOCl, where the internal coordinates were numbered 1 for $\delta r(\text{H-X})$, 2 for $\delta r(\text{X-Y})$, and 3 for $\delta \theta(\text{HXY})$, and the values in parentheses denote 3

HOCl

std. deviations. The method can be applied to mols. in an excited electronic state, using HNO in the $\sim A^1A''$ state as an example; the precision of the derived consts. is not high. This is mainly ascribed to perturbations in the excited state, and the present anal. may provide us with chances of examg. the interactions affecting the excited state. The method will be applicable to a few other simple mols. such as bent XYZ-type mols. without involving any H/D atoms and planar C_{2v} H₂XY-type mols.

HNO

DM. 23801

1986

вразам.
чекм,
М.А.

104: 118769b Microwave-optical double resonance of nitrosyl hydride (HNO). II. Rotational spectrum in $\bar{A}^1A''(020)$. Takagi, Kojiro; Saito, Shuji; Suzuki, Tetsuo; Hirota, Eizi (Dep. Phys., Toyama Univ., Gofuku Toyama, Japan 930). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(3), 1317-24 (Eng). Rotational transitions in the $\bar{A}^1A''(020)$ state of HNO were obsd. at 0.4-154.00 MHz using the technique of microwave-ODR (MODR). An anomalous behavior in K -type doubling frequencies obsd. for $K_a = 2$ in $\bar{A}^1A''(020)$ was attributed to the Coriolis interaction with $K_a = 1$ in $\bar{A}^1A''(100)$. The laser-excited fluorescence (LEF) spectrum was obsd. for the (020)-(000) $K_a = 2-1$ sub-band, (100)-(000) $K_a = 1-0$ sub-band, and some other lines in the $\bar{A}^1A''-\bar{X}^1A'$ band system. The Q-branch microwave transitions between the 2 vibrational states (020) $J_{2,J-2}$ -(100) $J_{1,J-1}$ in $\bar{A}^1A''$ were obsd. by MODR at $J = 13$ and 14, where the 2 rovibrational levels come closest. The MODR spectra for (020) and (100) together with the LEF spectrum for the (020) $K_a = 0, 1$, and 2 states and for the (100) $K_a = 0$ and 1 states were analyzed, and the rotational consts., the centrifugal distortion consts., and a Coriolis coupling const. were detd. for $\bar{A}^1A''(020)$ and $K_a = 2$ and 3 in $\bar{A}^1A''(100)$ obsd. in the radiofrequency region were locally perturbed, and most of them showed magnetic activity.

C.A. 1986, 104, N14.

КНО

[от. 28370]

1987

Автомат А.Б., Венюминова Т.И. и др.

струк-
тура.
колебл.
частоты.

Таблицы рекомендуемых
справочных данных.

Депонирован. во ВНИИКИ
Госстандарта СССР 17.02.87г.

№ 295.

HNO

1987

1 Б4468. Хемилюминесценция в пламенах типа «кислородные атомы — гидразин». Chemiluminescence from oxygen atom — hydrazine flames / Dimpfl W. L., Herm R. R. // Abstr. Pap., 194th ACS Nat. Meet. (Amer. Chem. Soc.), New Orleans, La, Aug. 30 — Sept. 4, 1987.— Washington.— D. C.— 1987.— С. 976.— Англ.

Хемилюминесценция (ХЛ) $\text{NO}(\text{A}^2\Sigma)$ в пламенах типа «атомарный кислород — гидразин» не м. б. объяснена на основе обычных представлений хим. динамики. С целью выяснения механизма ее возбуждения в обл. 200—3000 мкм изучены спектры ХЛ в р-циях атомов О с гидразином и его монометильным и несимм. диметильным пр-ными. Наряду с известными эмиссионными полосами наблюдали эмиссионные спектры $\text{HNO}(\text{A}'\text{A}'')$. Для различных гидразинов обнаружены заметные различия в распределениях УФ-полос $\text{NH}(\text{A}^3\Pi)$, $\text{OH}(\text{A}^3\Sigma)$ и $\text{NO}(\text{A}^2\Sigma^+)$. Показано, что возбуждение $\text{NO}(\text{A}^3\Sigma^+)$ происходит в процессе переноса энергии на NO от метастабильных электронновозбужденных частиц. Для их отождествления и измерения кон-ий использован метод лазера-индуцированной флуоресценции. В. Е. Скурат

эмиссион.
спектр

X/1989, N1

HNO

1987

7 Б1296. Инфракрасный спектр HNO. Полоса ν_1 .
Infrared emission spectrum of HNO. The ν_1 band. Pe-
tersen J. C., Vervloet M. «Chem. Phys. Lett.», 1987,
141, № 6, 499—502 (англ.)

В области $2400\text{--}3200\text{ см}^{-1}$ с высоким разрешением
($0,04\text{ см}^{-1}$, фурье-спектрометр) измерена вращат.
структура полосы ν_1 (вал. кол. N—H) в спектре ис-
пускания молекулы HNO. Спектр возбуждался при
пропускании смеси аммиака и кислорода через радио-
частотный разряд. Начало полосы при $2683,95210\text{ см}^{-1}$.
Значения (в см^{-1}) вращат. постоянных A , B , C и па-
раметров центробежного искажения $\Delta_K (\cdot 10^3)$, Δ_{JK}
($\cdot 10^5$), $\Delta_J (\cdot 10^6)$, $\delta_K (\cdot 10^5)$, $\delta_J (\cdot 10^7)$, $H_K (\cdot 10^6)$, H_{KJ}
($\cdot 10^8$), $H_{JK} (\cdot 10^8)$, $H_J (\cdot 10^{11})$ и более высоких поряд-
ков: основное состояние (000)—18,47607; 1,41140;
1,30641; 4,295; 9,46; 3,93; 7,0; 3,00; 2,89; 4,4; 0,0; 8,0
(h_K , h_{JK} , h_J принимались равными нулю); состояние
(100)—17,67283; 1,41914; 1,30693; 5,053; 8,30; 4,09; 9,6;
2,75; 6,34; 8,35; —0,92; 2,0; $h_K = -2,2 \cdot 10^{-6}$, $h_J =$
 $= 2 \cdot 10^{-11}$ (h_{JK} принималась равной нулю).

В. М. Ковба

M. N.

M. 27 939, a

X. 1988, 19, 47

ННО

От. 27 939 а" 1987

4 Л225. ИК-спектр испускания ННО: полоса ν_1 .
Infrared emission spectrum of HNO: the ν_1 band. Petersen J. C., Vervloet M. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 141, № 6, 499—502 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра изучен ИК-спектр испускания радиочастотного разряда в смеси $\text{NH}_3:\text{O}_2$ (1:) при давл. 3 мм рт. ст. В области 2400—3200 см^{-1} с разрешением 0,04 см^{-1} измерены положения линий вращательной структуры основной полосы ν_1 , обусловленной NH-валентным колебанием ННО. Определено положение начала полосы, рассчитаны молекулярные постоянные ННО для основного и возбужденного колебательных состояний.

В. К.

М. П.

ср. 1988, 18, № 4

HNO

(om. 27939, "a")

1987

' 108: 13255k Infrared emission spectrum of nitrosyl hydride (HNO): the ν_1 band. Petersen, J. C.; Vervloet, M. (Dep. Phys. Astron., Univ. Alabama, Tuscaloosa, AL 35487 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 141(6), 499-502 (Eng). HNO was obsd. in emission from a radiofrequency discharge through a mixt. of NH_3 and O_2 . The ν_1 (N-H stretching) band in the region $2400\text{--}3200\text{ cm}^{-1}$ was recorded with a Fourier transform spectrometer using the apodized resoln. of 0.04 cm^{-1} . The anal. of the band was extended to higher K values than in the earlier work.

(Pi, UK)

c.A. 1988; 108, ~ 2

HNO

(OM. 29211)

1988

HNO⁺

Butcher V., Cockett
M. C. R. et al.

г, promo-
микро-
спектр,

Phil. Trans. Roy. Soc.
London, 1988, A 324,
N 1578, 197-207.

Cve

HNO

[om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti,

J. Phys. and Chem. Ref.

Vi;

Data, 1988, 17, N2, 301.

ИНО

(30353)

1988

Краснов К.С.,
Филиппенко М.В.,

и.п.

ОНИИТЭХИМ.

(обзор)

Деп. N 378-ХП-86,
Черкассы, 1988.

HNO⁻

1988

109: 218756s Observation of infrared rotation-vibration transitions of nitroxyl ion (HNO⁻). Miller, Harold C.; Farley, John W. (Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *AIP Conf. Proc.* 1987 (Pub. 1988). 172(Adv. Laser Sci.-3), 357-8 (Eng). HNO⁻, a bent triat. mol., was studied by autodetachment spectroscopy using a color-center laser operating at $\sim 3000 \text{ cm}^{-1}$. The >175 transitions in the 1-0 band of the N-H stretch in the ground $^2A''$ electronic state were obsd. with an accuracy of 0.01 cm^{-1} . The results represent a 10^4 -fold improvement in resolu. over the best previous results, obtained by photoelectron spectrometry. Spin-rotation splittings and asymmetry doubling were resolved.

(ex creep)

C.A. 1988, 109, N24

HNO^-

1988

4 Л224. Наблюдение вращательно-колебательных переходов в HNO^- в ИК-области. Observation of infrared rotation-vibration transitions of HNO^- / Miller Harold C., Farley John W. // Adv. Laser Sci. Vol. 3. Proc. 3rd Int. Conf., Atlantic City, 1987.— New York (N. Y.), 1988.— С. 357—358.— Англ.

Методом спектроскопии самораспада измерены спектры аниона нитроксила в области $2930\text{—}3150\text{ см}^{-1}$ с разрешением $0,01\text{ см}^{-1}$, получена разрешенная вращательная структура полосы валентного колебания N—N . Достигнуто увеличение разрешения в 10^4 раз по сравнению с данными фотоэлектронной спектроскопии. Указано на наличие тонкой структуры линий. Ширины линий порядка 10 МГц (времена жизни 16 нс), отсутствует зависимость от квантового числа.

И. Г.

М.А.

ср. 1989, № 4

HNO

1989

112: 87295c. Laser induced fluorescence of HNO and DNO $\bar{A}^1A'' - \bar{X}^1A'$ in a supersonic free jet. Mayama, Shinya; Egashira, Ken; Obi, Kinichi (Dep. Chem., Tokyo Inst. Technol., Tokyo, Japan 152). *Res. Chem. Intermed.* 1989, 12(3), 285-302 (Eng). The SRVL fluorescence lifetimes and fluorescence excitation spectra of the HNO $\bar{A}^1A'' - \bar{X}^1A'$ transition were measured in a supersonic free jet. The cooling of a rotational temp. in the jet made is possible to clear up the parity-selected perturbation in the asym. rotor under higher resolu. condition. The fluorescence lifetimes of strongly perturbed levels, i.e. HNO $\bar{A}^1A''$ 011 rovibronic levels were obsd. with dual exponential decay profiles, while non-perturbed levels exhibited single ones. The SRVL fluorescence lifetimes and fluorescence excitation spectra of DNO $\bar{A}^1A'' - \bar{X}^1A'$ were measured under the same condition as HNO. The rotational anal. of the DNO $\bar{A}^1A''$ 011 rovibronic levels was first carried out in the jet.

Cherms, M.A.

(7) DNO

C.A. 1990, 112, N10

МНО-

Дм 32604

1989

75 Б1341. Колебательно-вращательный спектр полосы ν_1 нитроксида, HNO^- . The vibration-rotation spectrum of the ν_1 band of nitroxide, HNO^- / Miller H. C., Hardwick J. L., Farley J. W. // J. Mol. Spectrosc.— 1989. — 134, № 2.— С. 329—348.— Англ.

Зарегистрирован ИК-спектр нитроксид-иона, HNO^- , в обл. 2940—3150 см^{-1} вал. кол. N—H (ν_1). Эксперименты проводили с использованием спектроскопии высокого разрешения с детектированием автоотрыва электрона. Проведена идентификация rR_4 , rR_5 , rR_6 , rR_7 , rR_8 , rR_9 и rQ_6 ветвей и выполнен их вращат. анализ. Получены вращат. постоянные и постоянные центробежного искажения для (0,0,0) и (1,0,0) состояний. Главные вращат. постоянные (см^{-1}): $A''=15,233360$, $(B''+C'')/2=1,096829$, $(B''-C'')/2=0,034424$, $A'=16,937355$, $(B'+C')/2=1,088597$ и $(B'-C')/2=0,036066$. Определено начало полосы ν_1 : 2750, 7827 см^{-1} . Е. А. Пазюк

М.П.

Х. 1990, N 5

HNO⁻

Om 32604

1989

110: 181944u The vibration-rotation spectrum of the ν_1 band of nitroxide, HNO⁻. Miller, Harold C.; Hardwick, J. L.; Farley, John W. (Chem. Phys. Inst., Univ. Oregon, Eugene, OR 97403 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1989, 134(2), 329-48 (Eng). The IR spectrum of the nitroxide ion, HNO⁻, was recorded in the region between 2940 and 3150 cm⁻¹ using high-resoln. autodetachment detection spectroscopy. This wave-no. range corresponds to absorption near the ν_1 vibration, the N-H stretching mode. The ν_1 branches was identified and rotationally analyzed, and rotational and centrifugal distortion consts. for the (0, 0, 0) and (1, 0, 0) states were obtained. The principal rotational consts., in cm⁻¹, are $A'' = 15.233360(380)$; $(B'' + C'')/2 = 1.088597(22)$; and $(B'' - C'')/2 = 0.036066(160)$. The ν_1 band origin is 2750.7827(53) cm⁻¹.

UK

C.A. 1989, 110, N20

HNO^-

1989

Neumark A. M.

Ion and Cluster Ion
spectrosc. and Struct.
Amsterdam etc., 1989.
C. 155-180.

M.N.
(обзор)

(Cov. ● OH^- ; III)

HNO

Om 33 355

1989

5 Д94. Теоретическое описание трех низших потенциальных поверхностей для HNO. I. Потенциал присоединения атома H к NO. Theoretical characterization of the lowest three potential surfaces of HNO. I. The potential for H atom addition to NO / Walch Stephen P., Rohlfing Celeste McMichael // J. Chem. Phys.— 1989. — 91, № 5.— С. 2939—2948.— Англ.

М.П.

Методом МКССП в варианте полного пространства активных орбиталей с последующим учетом электронной корреляции методом сгруппированного КВ и с использованием базиса атомных натуральных орбиталей вы-

ф. 1990, № 5

полнены расчеты поверхностей потенц. энергии (ППЭ) для трех низших $^1A'$, $^3A''$ и $^1A''$ электронных состояний (ЭС) молекулы HNO . Найдены энергии и геометрические структурные параметры HNO в рассмотренных ЭС. Изучен процесс присоединения атома Н в реакции $\text{H} + \text{NO} \rightarrow \text{HNO}$ к атому N, и определены пути с миним. энергией для каждого изученного ЭС. В согласии с имеющимися в литературе данными найдено, что для процессов присоединения Н к NO на ППЭ $^3A''$ и $^1A''$ имеются значительные барьеры. Предсказано, что в случае $^3A''$ высота барьера составляет $\approx 4,1$ ккал/моль, а для $^1A''$ — 10,2 ккал/моль. А. И. К.

HNO

Am 33355

1989

111: 219714e Theoretical characterization of the lowest three potential surfaces of nitrosyl hydride (HNO). I. The potential for hydrogen atom addition to nitric oxide. Walch, Stephen P.; Rohlfing, Celeste McMichael (ELORET Inst., Sunnyvale, CA 94087 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 91(5), 2939-48 (Eng). The results of complete active space SCF/multireference contracted CI(CAS-SCF/CCI) calens. with large at. natural orbital (ANO) basis sets are presented for the H + NO region of the lowest three potential surfaces of HNO ($1A'$, $3A''$, and $1A''$). The calens. focus on the min. energy path for H atom addn. to the N end of NO and on the equil. geometry region of HNO and HON.

поверхности
3-х низкорен
состояний

с.А. 1989, 111, N24

МНО

от 33 355

1989

9 Б1177. Теоретическое описание трех низколежащих потенциальных поверхностей HNO . I. Потенциал для присоединения атома H к NO . Theoretical characterization of the lowest three potential surfaces of HNO . I. The potential for H atom addition to NO / Walch S. P., Rohlfing C. M. // J. Chem. Phys.— 1989.— 91, № 5.— С. 2939—2948.— Англ.

Методом ССП в полном активном пространстве орбиталей и сгруппированным методом конфигурац. взаимодействия с несколькими исходными конфигурациями (СКВ—НИК) рассчитаны три низколежащие Пв потенциальной энергии HNO в обл. соотв. присоединению атома H к NO . Первоначальное сканирование Пв потенциальной энергии проведено с учетом электронной корреляции восьми электронов ($2p$ атома O и $2p$ атома N) на уровне СКВ—НИК. Затем вдоль рассчитанных путей р-ций проведены расчеты с учетом электронной корреляции 10 и 12 электронов (включение $2s$ электронов O и N). Проведены также расчеты обл. Пв:

М.П.

Х.1990, № 9

с фиксированными расстоянием $N-O$ и углом HNO . Отмечено, что корреляция $2s$ электронов не оказывает значит. влияния на Пв основного состояния $^1A'$, тогда как в случае Пв $^3A''$ и $^1A''$ корреляция $2s$ электронов приводит к уменьшению барьера р-ции и более пологому потенциальному профилю. По результатам расчетов существует значит. потенциальный барьер для присоединения атома H по Пв $^3A''$ и $^1A''$ (4,1 и 10,2 ккал/моль соответственно). Н. В. Харчевникова

HNO^+
 NOH^+

1989

/ 110: 179788c Nonadiabatic effects in the vicinity of multiple surface crossings. Evaluation of derivative couplings with respect to rotational and internal degrees of freedom. Application to the charge transfer reaction proton + nitric oxide $\rightarrow$ atomic hydrogen + nitrosyl ion. Yarkony, David R. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *J. Chem. Phys.* 1989, 90(3), 1657-65 (Eng). The nonadiabatic charge transfer reaction $H^+ + NO \rightarrow H + NO^+$ is considered. Regions of significant nonadiabatic effects are located for specific $C_{\infty v}$ nuclear configurations, which correspond to the confluence of three potential energy surfaces, the $1,2^2A'$ and $1^2A''$ potential energy surfaces. The $2^2A'$ and $1^2A''$ states correlate asymptotically with the $H^+ + NO(^2\Pi)$ system states, while the $1^2A'$ state correlates asymptotically with the $H(^2S) + NO^+(1\Sigma^+)$ system state. The three surface confluence consists of two seams corresponding to hydrogen approaching NO from either the nitrogen or oxygen end, and is energetically accessible from the $H^+ + NO(^2\Pi)$ asymptote for $r_e(NO^+) \leq R(NO) \leq r_e(NO)$. The region of the three surface confluence represents a $C_{\infty v}$ symmetry allowed $\Sigma-\Pi$ crossing, and consequently evinces properties of both a conical intersection and a Renner-Teller surface touching. It is therefore necessary to treat nonadiabatic (deriv.) couplings originating from both internal nuclear motion and overall nuclear rotation. The rotational coupling

meopem. pacem

C.A. 1989, 110, N 20

provides a mechanism for the direct (and indirect via the $2^2A'$ state) coupling of the $1^2A''$ state correlating with $H^+ + NO(2II)$ to the $1^2A'$ state correlating with $H + NO^+(1\Sigma^+)$. No such coupling is possible if only internal modes are considered. Deriv. couplings attributable to internal nuclear motion was evaluated using analytic gradient techniques introduced previously [Y., 1935], while deriv. couplings attributable to overall nuclear rotation, which can also be evaluated using gradient methods, were evaluated, more efficiently, in terms of matrix elements of the total electronic angular momentum operator. The nonadiabatic interactions in the vicinity of the three surface confluence are compared with the analogous interactions along paths leading to the HNO^+ and NOH^+ equil. structures. These are regions of general C, nuclear configurations, for which avoided crossings are obsd. An anal. of the wave functions in terms of the mol. dipole moment vector is presented.

HNO

[DM-35792] 1990

Baker J., Butcher V., et al.,
J. Chem. Soc. Faraday Trans.
1990, 86, N23, 3843-3851.

Vacuum Ultraviolet Photoelectron
spectroscopic study of the NH_2O
and HNO molecules.

HNO

1990

112: 242392c Study of the excited states of nitrosyl hydride and its emission spectrum in hydrogen-based flames. Jano, I.; El-Hag, I. H.; Townshend, Alan (Chem. Dep., UAE Univ., Al-Ain, United Arab Emirates). *Anal. Chim. Acta* 1990, 230(1), 151-6 (Eng). INDO and CI calcs. of lower singly and doubly excited states of the gaseous HNO are reported. An anal. of the HNO emission spectrum in a cool flame was carried out. A clear sym. relationship among the energies of pairs of bands in the spectrum is detected, and the bands are identified as emissions from the lowest singly excited electronic state (n, π^*) involving N:O stretching and H-N:O bending modes of vibrations and their combinations. A single band at 756 nm appeared not to be emitted from the same electronic state. Possible origins of this band are suggested.

chem, M.A.,
pacem

C.A. 1990, 112, N 26

HNO

1990

2 Б1032. Валентные смешанные и ридберговские электронные переходы нитрозилгидрида и азотистой кислоты (цис и транс). Valence, intravalence and rydberg transition in nitrosyl hydride and nitrous acid (cis and trans) / Singh S. H., Singh S. Nath // Acta Cien. Indica. Phys.— 1990.— 16, № 3.— С. 113—122.— Англ.

Методом РЧПДП/С рассчитаны электронные спектры поглощения HNO и транс- и цис-изомеров HNO₂ с учетом взаимодействия 30 нижних однократно возбужденных электронных конфигураций. Получено удовлетворит. согласие с экспериментом. Показано, что только нижние электронные переходы $n-\pi^*$ типа являются чисто валентными. Нижние $\pi-\pi^*$ электронные переходы имеют большую ($\sim 30\%$) примесь ридберговских конфигураций. Остальные электронные переходы являются почти чисто ридберговскими.

К. Я. Бурштейн

M.N.

X. 1992, N 2

ClNO
H₂NO⁺
H₃NO

М. А.

(+2) [X]

X-1991, n 24

1991
24 Б1092. Теоретический вызов рентгеноструктурному определению иона дихлорнитрония («неорганического фосгена») Cl₂NO⁺. Theoretical challenge to the X-ray structure determination of dichloronitronium ion («inorganic phosgene») Cl₂NO⁺ / Brumm M., Frenking G., Koch W. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 182, № 3—4.— С. 310—314.— Англ.

С помощью теории возмущений Мёллера—Плессета 3-го порядка рассчитан ряд молекул, содержащих группу NO: XNO, X₂NO⁺ и X₃NO (X=H, F, Cl). Использован базис структур. гауссовых ф-ций 6-31ГФ(d). Оптимизированы геометрич. параметры молекул и определены частоты вал. кол. N—O. Вычисленные длины связей и частоты колебаний N—O согласуются с эксперим. данными для всех молекул, за исключением Cl₂NO⁺, для к-рого получено межядерное расстояние N—O 1,16±0,03 А. Сделан вывод, что определенное методом РСТА (K. Dehnicke и др. // Angew. Chem. Intern. Ed.— 1977.— 16.— С. 545) расстояние 1,30—1,32 А, по-видимому, неверно. А. А. Сафонов

HNO

1992

117: 34027p Gas-phase protonation of nitrosyl hydride: a GAUSSIAN-1 ab initio MO study of the structure, stability, and unimolecular interconversion processes of various $[H_2N,O]^+$ isomers. Grandinetti, Felice; Hrusak, Jan; Schroeder, Detlef; Schwarz, Helmut (Inst. Org. Chem., Tech. Univ., W-1000 Berlin, 12 Germany). *J. Phys. Chem.* 1992, 96(5), 2100-3 (Eng). Ab initio post-SCF calcns. employing the Gaussian-1 level of theory were performed on the structure, the stability, and the interconversion processes of various isomers of protonated HNO.

ab initio
reaction

C.A. 1992, 117, 24

HNO

1993

10 Б1016. Исследование методом связанных кластеров XNO ($X=H, F, Cl$). Изучение слабой простой связи X—N. A coupled-cluster study of XNO ($X=H, F, Cl$): An investigation of weak X—N single bonds /Lee Timothy J. //J. Chem. Phys. .—1993 .—99 ,№ 12 .—С. 9783—9789 .—Англ.

В рамках различных приближений метода связанных кластеров вплоть до учета трехкратных возбуждений с использованием расширенного трехэкспонентного базиса, дополненного двумя наборами поляризац. ф-ций, проведены расчеты равновесной геометрии, дополнительных моментов, частот колебаний и ИК-интенсивностей молекул XNO ($X=H, F, Cl$). Полученные результаты очень хорошо согласуются с эксперим. данными. Обсуждено применение метода гомодесмич. р-ций для правильного воспроизведения теплот образования. Библ. 50. И. Н. Сенченя

М.А.



(2)

FNO,



ClNO

X. 1994, N 10

HNO

1993

120: 117308u A coupled-cluster study of XNO ($X = H, F, Cl$): an investigation of weak X-N single bonds. Lee, Timothy J. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035-1000 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(12), 9783-9 (Eng). Singles and doubles coupled-cluster (CCSD) theory and the CCSD(T) method, CCSD plus a perturbational est. of the effects of connected triple excitations, were used to det. the equil. structures, dipole moment, vibrational frequencies, and IR intensities of the HNO, FNO, and ClNO species. A double polarized triple-zeta (TZ2P) quality basis set was used. The CCSD(T) results are in very good agreement with expt., indicating that the CCSD(T) method performs well in describing the weak X-NO single bond. The exptl. heats of formation of the FNO, and ClNO species are examd. for internal consistency with exptl. data for FNO_2 and $ClNO_2$, by using an isodesmic reaction. The exptl. data exhibit a small inconsistency. An approach, involving in addn. the use of homodesmic reactions, by which a more consistent set of thermochem. data may be obtained is proposed and discussed.

meop. pacem,
1e, 4, W2

C.A. 1994, 120, N10

HNO^-

1993

10 Б1020. Неэмпирическое исследование нитроксида HNO^- . Ab initio study of nitroxide, HNO^- /Robins K. A., Farley John W., Toto J. L. //J. Chem. Phys. .—1993 .—99 ,№ 12 .—С. 9770—9775 .—Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием расширенных базисных наборов проведены расчеты электронного и геометрич. строения и частот колебаний основного состояния нитроксида HNO^- , и родственных ему систем — пероксидного радикала HO_2 и нитроксильного радикала HNO . Для HNO^- найдена изогнутая геометрия: угол $\text{HNO} = 106,2$, $R(\text{NO}) = 1,333$ и $R(\text{NH}) = 1,045$ А. Обсуждены сходства и различия в геометрич. и электронном строении HNO^- , HO_2 и HNO . В приближениях ГАУССИАН-1 и ГАУССИАН-2 оценено сродство к электрону радикала HNO ($0,23 \pm 0,10$ эВ, эксперим. значение — $0,338 \pm 0,015$ эВ).

И. Н. Сенченя

М.А.

Х. 1994, N 10

HNO⁻
HNO

1993

120: 144660j Ab initio study of nitroxide, HNO⁻. Robins, K. A.; Farley, John W.; Toto, J. L. (Dep. Chem., Univ. Nevada, Las Vegas, NV 89154 USA). *J. Chem. Phys.* 1993, 99(12), 9770-5 (Eng). The 1st ab initio theor. study was performed on the ground state of nitroxide, HNO⁻, in combination with a comparison study of the ground state of 2 chem. similar systems, peroxy radical, HO₂, and the neutral nitroxyl radical, HNO. An optimum geometry and vibrational frequencies are reported for all species, and results are compared to exptl. and theor. values. A bent geometry is obtained for HNO⁻, with an equil. bond angle of 106.2°, and bond lengths of R_{N-O} = 1.333 Å and R_{N-H} = 1.045 Å. The calcd. fundamental vibrational frequencies (in cm⁻¹) are: ν_1 (N-H stretch); 3029; ν_2 (bend), 1474; and ν_3 (N-O stretch), 1183. The bending frequency and the N-O stretching frequencies of the ion are similar to the bending frequency and the O-O stretching frequency of HO₂, while the N-H stretching frequency of HNO⁻ is similar to the N-H stretching frequency of HNO. The GAUSSIAN 1 and GAUSSIAN 2 methods are used for the detn. of an electron affinity for HNO. The calcd. electron affinity of 0.23 ± 0.10 eV is in reasonable agreement with the exptl. detd. value of 0.338 ± 0.015 eV.

ab initio
расчет,
суперкомп.
параметры,
Di, Ae

C.A. 1994, 120, N 12

МНО

1994

6 Б1046. Точное квадратичное силовое поле и колебательные частоты HNO и DNO. An accurate quartic force field and vibrational frequencies for HNO and DNO /Dateo Christopher E., Lee Timothy J., Schwenke David W. //J. Chem. Phys. .—1994 .—101, № 7 .—С. 5853—5859 .—Англ.

Методом связанных кластеров с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений и использованием корреляционно-согласованного поляризац. валентного трехэкспонентного базиса (cc—pVTZ) определено неэмпирич. квадратичное силовое поле для HNO. Уточненные гармонич. колебат. частоты HNO и DNO получены с использованием четырехэкспонентного базиса cc—pVQZ. Фундаментальные колебат. частоты изотопомеров определены в рамках теории возмущений второго порядка и вариационных расчетов. Показано, что вал. кол. N—H с высокой ангармоничностью удовлетворительно описывается только вариационным методом, в то время как для вал. кол. N—O и деформационных кол. приемлемыми являются оба подхода. Обсуждена возможность использования рассчитанных энергий нулевых колебаний HNO в изодесмич. р-циях (для определения теплот образования менее устойчивых частиц). Н. С.

М.А.

☒ (4)

X-1995, N 6

HNO

1994

121: 288660c An accurate quartic force field and vibrational frequencies for HNO and DNO. Dateo, Christopher E.; Lee, Timothy J.; Schwenke, David W. (Ames Res. Cent., NASA, Moffett Field, CA 94035-1000 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 101(7), 5853-9 (Eng). An accurate ab initio quartic force field for HNO has been detd. using the singles and doubles coupled-cluster method that includes a perturbational est. of the effects of connected triple excitations, CCSD(T), in conjunction with the correlation consistent polarized valence triple zeta (cc-pVTZ) basis set. Fundamental vibrational frequencies were detd. using a second-order perturbation theory anal. and also using variational calcns. The N-O stretch and bending fundamentals are detd. well from both vibrational analyses. The H-N stretch, however, is shown to have an unusually large anharmonic correction, and is not well detd. using second-order perturbation theory. The H-N fundamental is well detd. from the variational calcns., demonstrating the quality of the ab initio quartic force field. The zero-point energy of HNO that should be used in isodesmic reactions is also discussed.

Calc. NOCM,
Di

~~121~~ HNO

C.A. 1994, 121, N24

HON

1994

7 6 Б1051. Изучение методом связанных кластеров XON ($X=H, F, Cl$) и переходных состояний изомеризации $XON \leftrightarrow XNO$. A coupled-cluster study of XON ($X=H, F, Cl$), and the $XON \leftrightarrow XNO$ transition states /Lee Timothy J. //Chem. Phys. Lett. .— 1994 .— 223 ,№ 5—6 .— С. 431—438 .— Англ.

Методом связанных кластеров с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений исследованы молекулы XON, $X=H, F$ и Cl . Определены равновесные геометрии, дипольные моменты, гармонич. частоты и интенсивности ИК-полос. Найдено, что HON, FON и ClON на $42,3 \pm 0,6$, $36,5 \pm 0,9$ и $27,7 \pm 0,9$ ккал/моль менее стабильны, чем их соотв-щие изомеры XNO (при 0K). Высоты барьеров превращений $XON \rightarrow XNO$ предсказаны равными $9,3 \pm 0,8$, $6,1 \pm 1,1$ и $7,4 \pm 0,6$ ккал/моль для $X=H, F$ и Cl соотв. (0K). Исследованы переходные состояния для процесса изомеризации $XON \rightarrow XNO$. Библ. 32. Н. С.

(+2)

12



FON, ClON, X

X.1995, №6

HON

1994

121: 118253c A coupled-cluster study of XON ($X = H, F, Cl$), and the XON $\leftrightarrow$ XNO transition states. Lee, Timothy J. (NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA 94035-1000 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1994, 223(5-6), 431-8 (Eng). The XON moles. ($X = H, F$, and Cl) have been studied using the CCSD(T) method. Equil. geometries, dipole moments, harmonic frequencies and IR intensities are predicted. The X-O bond distance is shown to be abnormally long for $X = F$ and Cl , which is attributed to the degree of ionic bonding and the stability of NO^+ . Stability of the XON mol. relative to the XNO isomer is shown to increase in the order $HON < FON < ClON$, although even $ClON$ is 27.7 ± 0.9 kcal/mol (0 K) less stable than $ClNO$. The XON $\leftrightarrow$ XNO transition states are also investigated. FON and $ClON$ possess the lowest barrier heights, but these are sufficiently large that isomerization should not be rapid at low temps.

(теоретическ.

расчет

стабильности)

□ (12)



FON, ClON

С.А. 1994, 121, N10

HNO

1994

8Б133. О процессе димеризации нитрозо-
соединений. Теоретическое изучение реакции
 $2\text{HNO} \rightarrow (\text{HNO})_2$. On the dimerization process of
nitroso compounds. A theoretical study of the reaction 2
 $\text{HNO} \rightarrow (\text{HNO})_2$ / Luttke W., Skancke P. N., Traetteberg M.
// Theor. chim. acta. — 1994. — 87, № 4-5. — С. 321—333
.— Англ.

М.П.



Ф-Х, 1997, № 8

HNO

1995

122: 115511x Global potential energy surfaces for the lowest $^1A'$, $^3A''$, and $^1A''$ states of HNO. Guadagnini, Renee; Schatz, George C. (Dep. of Chemistry, Northwestern Univ., Evanston, IL 60208-3113 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 102(2), 774-83 (Eng). The authors present global ab initio potential energy surfaces for the three lowest energy $^1A'$, $^3A''$, and $^1A''$ surfaces of HNO. These surfaces are the lowest three states of the HNO and HON mols. and they correlate to the ground electronic states of $H + NO$ and $O + NH$. In addn., the $^3A''$ surface correlates to the ground state of $N + OH$. The surfaces are based on approx. 800 ab initio calcns. that were done using an internally contracted multireference CI calcn. with a large basis set. The ab initio points were fit to a combination of Morse and spline functions in each of the three possible Jacobi coordinates, and the resulting splines were smoothly switched together, and combined with other functions to yield globally defined potentials. Properties of the HNO and HON min. and dissocn. energies on these potentials are in good agreement with previous high quality calcns. The $N + OH$ and $O + NH$ reactions are found to have no barriers to formation of HON or HNO, resp. Isomerization of HON to HNO involves barriers that are higher than the HON dissocn. barrier on the singlet surfaces but not on the triplet surface.

Анализ
электрон.
состоян,
по методу. по-
терхоскоп

С.А. 1995, 122, N10

1995

F: HNO

P: 3

5B137. Теплота образования HNO. The heat of formation of HNO / Lee Timothy J., Dateo Christopher E. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 20. - С. 9110-9111. - Англ.

Методом связанных кластеров с учетом одно-, двух- и частично трехкратных возбуждений с использованием расширенных одноцентровых базисов spdf и spdfg, получено точное значение теплоты образования HNO 'ДЕЛЬТА'Н[f,0]{0}('ДЕЛЬТА'Н[f,298]{0}), равное 26,7'+'-0,8(26,0'+'-0,8) ккал/моль. Эксперим. значение этой величины, полученное в лит-ре, 24,5 ккал/моль.



РЖХ 1997

1995

F: NOH

P: 3

2Б128. Теоретический анализ низших возбужденных состояний HNO/NOH и HPO/POH. A theoretical analysis of the lowest excited states in HNO/NOH and HPO/POH / Luna Alberto, Merchan Manuela, Roos Bjorn O. // Chem. Phys. - 1995. - 196, N 3. - С. 437-445. - Англ.

эмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве с учетом динамич. электронной корреляции во втором порядке многочастичной теории возмущений в базисе $17s12p5d4f/14s9p4d3f/8s4p3d$, сгруппированном в $6s5p4d3f/5s4p3d2f/3s2p1d$, рассчитаны равновесная геометрия, гармонич. колебательные частоты, дипольные моменты, адиабатич. и вертикальные энергии переходов для изомеров HNO, NOH, HPO и POH. Показано, что HNO и POH выгоднее своих изомеров на 23 и 15 ккал/моль соотв. Энергии переходов согласуются с эксперим. данными. Библ. 66.

Р. ЖС.Х. №2, 1996.

1995

F: HNO

P: 3

2Б128. Теоретический анализ низших возбужденных состояний HNO/NOH и HPO/POH. A theoretical analysis of the lowest excited states in HNO/NOH and HPO/POH / Luna Alberto, Merchan Manuela, Roos Bjorn O. // Chem. Phys. - 1995. - 196, N 3. - С. 437-445. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в полном активном пространстве с учетом динамич. электронной корреляции во втором порядке многочастичной теории возмущений в базисе $17s12p5d4f/14s9p4d3f/8s4p3d$, сгруппированном в $6s5p4d3f/5s4p3d2f/3s2p1d$, рассчитаны равновесная геометрия, гармонич. колебательные частоты, дипольные моменты, адиабатич. и вертикальные энергии переходов для изомеров HNO, NOH, HPO и POH. Показано, что HNO и POH выгоднее своих изомеров на 23 и 15 ккал/моль соотв. Энергии переходов согласуются с эксперим. данными. Библ. 66.

Р.Ж.Х. N2, 1996.

HNO/NOH

1995

123: 93665s A theoretical analysis of the lowest excited states in HNO/NOH and HPO/POH. Luna, Alberto; Merchan, Manuela; Roos, Bjoern O. (Departamento de Quimica C-IX-601, Facultad de Ciencias, Universidad Autonoma de Madrid, Cantoblanco, Madrid, Spain E-28049). *Chem. Phys.* 1995, 196(3), 437-45 (Eng). A theor. study has been performed on the ground and two lowest excited states of the HNO/NOH and HPO/POH systems. Full geometry optimization was made for all states using the CASSCF method with dynamic correlation effects accounted for by second order perturbation theory (CASPT2). The computed vertical and adiabatic transition energies are in agreement with available exptl. data.

неоп. параметр
младших
м-блх
составляют

HPO/POH

(7) 



C. A. 1995, 123, N 8

HNO

1995

123: 240757d High-resolution study of the 000-000 band of the $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ system of HNO in emission from the $H + NO$ reaction. Ramsay, D. A.; Zhu, Qing-shi (Steacie Inst. Mol. Sci., Natl. Res. Council Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1995, 91(18), 2975-7 (Eng). A high-resoln. spectrum of the 000-000 of the $\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$ system of HNO has been recorded in emission from the reaction of the H atoms with NO. No sharp breaking-off in the J structure has been found in the highest sub-band obsd. The emission in this sub-band ($K'_a = 13-K''_a = 12$) originates in levels above the dissocn. limit and arises from a two-body radiative assocn. process. The emission in the other sub-bands originates in levels below the dissocn. limit and arises from a three-body recombination process. The mechanism of predissocn. is discussed and an interpretation has been given for a hitherto unexplained observation.

$\tilde{A}^1A''-\tilde{X}^1A'$

C.A. 1995, 123, N 18

HNO

1997

126:284387z Infrared chemiluminescence from the NO + HCO reaction: observation of the $2\nu_1 - \nu_1$ hot band of HNO. Butkovskaya, N. I.; Muravyov, A. A.; Setser, D. W. (Department of Chemistry, Kansas State University, Manhattan, KS 66506 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1997, 266(1,2), 223-226 (Eng), Elsevier. IR chemiluminescence in the 2200-3000 cm^{-1} range was obsd. from vibrationally excited HNO mols. produced in the reaction of NO with HCO. Formyl radicals were obtained from the OH + CH₂O reaction in a fast-flow reactor connected with a Fourier transform spectrometer. The HNO spectrum consists of $\Delta\nu_1 = -1$ transitions from the ($1\nu_2\nu_3$) and (200) levels. The anharmonicity coeff. $x_{11} = -116 \pm 1 \text{ cm}^{-1}$ was obtained from the position of the center of the (002)-(001) hot band, $\nu_0 = 2452 \text{ cm}^{-1}$.

(X₁₁, ν_0 u gp)

C. A. 1997, 126, N21

HNO

Om

38942

1997

128: 16547f The dissociation of HNO. I. Potential energy surfaces for the X $^1A'$, A $^1A''$, and a $^3A''$ states. Mordaunt, David H.; Flothmann, Heiner; Stumpf, Michael; Keller, Hans-Martin; Beck, Christian; Schinke, Reinhard; Yamashita, Koichi (Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, D-37073 Göttingen, Germany). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(17), 6603-6615 (Eng). American Institute of Physics. Three-dimensional potential energy surfaces for the X $^1A'$, A $^1A''$, and a $^3A''$ states of HNO have been calcd. at the multireference CI (MRCI) level of ab initio theory. Energy points are calcd. at 1728 mol. configurations, predominantly sampling the HNO well and the H+NO product channel regions. Energies between grid points are obtained by interpolation with a three-dimensional cubic spline. The well depths are 2.14, 1.27, and 0.38 eV for X $^1A'$, a $^3A''$, and A $^1A''$, resp. Saddle points to inversion, isomerization, and dissocn. are reported and their importance discussed to relevant processes. The HNO(X $^1A'$) potential energy surface is purely attractive along its min. energy path to ground-state products, whereas the a $^3A''$ and A $^1A''$ states have barriers of 0.21 and 0.50 eV, resp. Vibrational term values and rotational consts. for HNO and DNO are reported for the fundamental vibrations for all three electronic states. Where comparison with exptl. data is possible, the agreement is satisfactory. The three potential energy surfaces are appropriate to study the predissocn. dynamics in the A $^1A''$ state and the unimol. dissocn. in the X $^1A'$ state.

no mers.

p-III

OCC. u Ross.

CCM.

L.A. 1988, 128, N2

РНО

1998

Sarkisov O.M. et al.,

Г,

помощь.
смет

Proc. SPIE-Int. Soc. Opt.
Eng. 1998, 3342, 243-268

(all. NH₂; ● III)

F: HNO

P: 3

132:84448 Complete basis set and gaussian computational study of bond dissociation energies, enthalpy of formation and rearrangement barriers for XNO nitric oxide derivatives.

Jursic, B. S. Department of Chemistry, University of New Orleans New Orleans, LA, USA

THEOCHEM, 492, 35-43 (English)

1999 Systematic computational studies of the XNO (X = H, F, Cl, and OH) mol. systems with complete basis set and gaussian ab initio methods were used accurate evaluations of their enthalpies of formation, bond dissocn. ener relative energies, and activation barriers of rotation and isomerization. was demonstrated that exptl. detd. enthalpies of formation for nitrogen o derivs. are 2-3 kcal/mol higher than they should be. Better heats of for as well as bond dissocn. energies for these mol. systems are offered.

C.A. 2000, 132

HON

1999

130: 287287k Isonitroso hydrogen (hydroxy nitrene, HON). Mai-
er, Gunther, Reisenauer, Hans Peter; De Marco, Michael (Institut für
Organische Chemie der Universität, D-35392 Giessen, Germany). *Angew. Chem., Int. Ed.* 1999, 38(1/2), 108-110 (Eng), Wiley-VCH Verlag
GmbH. The first matrix isolation and IR-spectroscopic identification of
the title compd. in solid argon at 10 K is described.

UK & A2

Manuscript

C-A, 1999, 130, N21

F: HNO

P: 3

133:301518 The equilibrium N-H bond length.

Demaison, J.; Margules, L.; Boggs, J. E.

Centre d'Etude et Recherches Lasers et
Applications, Bat. P5, Laboratoire de Physique des
Lasers, Atomes et Molecules, UMR CNRS 8523, Universite
de Lille 1 Villeneuve 59655, Fr. Chem. Phys.,

260(1-2), 65-81 (English) 2000. The equil.

structures of NH_3 , NH_2F , NHF_2 , NF_3 , HNC , HNO , HN_3 , HNCO ,
and NH_4^+ were calcd. at the CCSD(T) level of theory with
basis sets of at least quadruple zeta quality and with a
correction for the core correlation calcd. with the cc-
pCVQZ basis set. The possibility of calcg. accurate ab
initio N-H bond lengths is examd. using a sample of 13
mols. whose equil. structures are known. Three

2000

different correlated methods are compared: CCSD(T), MP2, and DFT using the hybrid functional B3LYP. As expected, the CCSD(T)/cc-pVQZ method gives the most accurate results but, except for HNO, the MP2/6-31G** and B3LYP/6-311++G(3df,2pd) methods are also satisfactory, their std. deviation being smaller than 0.002 Å provided a small offset correction is taken into account.

HNNO
HON

[DM - 40209]

2010

поперх.
номерс.
жесткий,
целый
мгновен
ест, ab initio
факт,
ΔH,
связь

Jussie B.S.,

J. Natl. Huet. (Theochem)

2000, 496, 207-212

Complete basis set
and gaussian an ab initio

exploration of singlet and
triplet potential energy
surface for molecular systems
built from one hydrogen,
oxygen and nitrogen atoms

HNO^+

[Om 41287]

2001

HON^+

A. Ben Houria, M. Gritli
et al.,

Chem. Phys., 2001, 274,
N2-3, 71-86.

Electronic

states of
 HNO^+ and HON^+

HNO

2001

135: 248804k Vibrational structure of the absorption spectra and a model of the HNO and DNO molecules in the excited state. Ten, G. N.; Baranov, V. I. (N. G. Chernyshevskii Saratov State University, Saratov, Russia 410026). *J. Appl. Spectrosc.* 2001, 68(1), 39-44 (Eng), Consultants Bureau. The vibrational structure of the absorption spectra of the 1st $n-\pi^*$ -electron transitions of the HNO and DNO mols. is calcd. in the Franck-Condon approxn. A structural model of the mols. in the excited electronic state is constructed from correlations and with the aid of a method of hybrid AOs. Evaluation of the influence of D substitution on the intensities of the vibrational components upon electronic excitation is made. A comparison of the exptl. and theor. absorption spectra calcd. for different models of the mols. is carried out.

снкнп
молекулы.

($n-\pi^*$ п.)
переход

C.A. 2001, 135, N17