

1931

N_2O_3

Verhoek F. H., Daniels F.,

J. Amer. Chem. Soc., 1931, 53, 1250

Kosciuszko succynatowa N_2O_4
u N_2O_3 .

N_2O_4 (стpyктыpa)

1949

Broadley J.S., Robertson J.M.

Nature, 1949, 164, 915

Structure of dinitrogen tetroxide

C.A., 1950, 44, 2320d

N_2O_3 (v.)

479-III

1950

Bernstein H.J., Burns W.G.

Nature, 1950, 166, 1039

Potential carrier in dinitrogen tetroxide

+2500 0.15

to

C.A., 1951, 4105 f $\sqrt{\phi}$

504-III

N_2O_5 (отруктура)

1950

Eriks K.

Chem. Weekblad, 1950, 46, 831-3

The crystal structure of nitrogen
pentoxide

C.A., 1951, 2740f

10

Спектр

N_2O_3

D'Oz L., Tarte P.,

III - 481 1953

Bull. Soc. roy. sci. Liege, 1953, 23, 276

~ 6-7

У.к. спектры и структура азот-
окислов азотсоединения.

Предположение о структуре $O=N-N \equiv O$

$F_1 = 1830 \text{ cm}^{-1}$ $\nu(N=O)$ симметрично $O=N-$

$F_2 = 1615 \text{ cm}^{-1}$ $\nu(N=O)$ асимметрично $-N \equiv O$

$F_3 = 1309 \text{ cm}^{-1}$ $\nu(N=O)$ асимметрично $-N \equiv O$

$F_4 = 770 \text{ cm}^{-1}$ $\delta(-N \equiv O)$

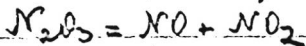
$F_5 = 430 \text{ cm}^{-1}$ $\delta(ON-NO_2)?$

Do. purpuraceum NO - NO₂ 9,5-10,0 mm

1957

Beattie J. R., Bell S. W.,

J. Chem. Soc., 1957, 1681.

Трехфазная смесь. Задача 1. Состав
миссии газодинамический состав. $\text{NO}_2 - \text{N}_2\text{O}_3 - \text{NO} - \text{N}_2\text{O}_4$ распределение
в равновесии при 5, 15, 25, 35, 45°

$$\Delta H = 9527 \pm 9.6 \text{ ккал/моль}$$

$$\Delta S = 33.25 \pm 0.35 \text{ ккал/моль.град}$$

483-III

H_2O_3 (структура).

1959

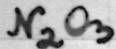
Mason J.

J. Chem. Soc., 1959, March, 1288-1295 (англ.)

Азотистый ангидрид. Некоторые наблюдения, касающиеся его электронного спектра и строения

РХ., 1959, № 22, 77393

1960



Misatsune J. C.

UK encls
(as N_2O_4)

U. S. Dept. Com., Office Tech.
Serv., PB. Rept. 148716, 47 pp. (1960)
III. The spectrum of N_2O_3

N_2O_3

III - 469

1960

спектр
и
структура

4B181. Спектр комбинационного рассеяния и структура N_2O_3 . Hisatsune I. C., Devlin J. P. The Raman spectrum and the structure of N_2O_3 . «Spectrochim. acta», 1960, 16, № 4, 401—406 (англ.).—С целью определения структуры N_2O_3 исследован спектр комб. рас. раствора N_2O_3 в хлористом метиле при $-30^\circ C$. По результатам исследования спектров комб. рас. и ИК-поглощения и термодинамич. данным установлено, что молекула N_2O_3 имеет плоскую нитронитрозоструктуру с углом $N-N-O$ (O — нитрозогруппы), равным 100° . В спектре комб. рас. не наблюдалась линия, соответствующая крутильным колебаниям. Термодинамич. расчетом показано, что частота этой линии будет $< 50\text{ см}^{-1}$.
Библ. 18 назв. В. Пивоваров

ор. 1961. 4

1960

III-469

N_2O_3
раман
спектр

13Б113. Спектр комбинационного рассеяния и строение N_2O_3 . Hisatsune I. C., Devlin J. P. The Raman spectrum and the structure of N_2O_3 . «Spectrochim. acta», 1960, 16, № 4, 401—406 (англ.).—В спектре комб. расс. р-ров N_2O_3 (I) в CH_2Cl_2 , полученном при -30° , найдено 6 линий: 1849, 1600, 1291, 772, 614 и 253 см^{-1} . В сочетании с результатами исследования ИК-спектра эти данные позволяют идентифицировать 8 из 9 основных частот I. Не найдена частота крутильного колебания I. Произведены расчеты энтропии I, исходя из различных предположений о геометрии молекулы; результаты расчета лучше всего согласуются с эксперим. данными, полученными ранее (РЖХим, 1957, № 23, 73866). Величина барьера вращения вокруг связи N—N согласно расчету, по-видимому, меньше, чем в случае N_2O_4 . В. Александян

ж. 1961. 13

(1960)



695-469

Kisatsune I.C., Devlin J.P.

Spectrochim. acta, 1960, 16, 401

Спектр канд. росс. и структура N_2O_3

Набл. рамоние

$\angle ONN \approx 100^\circ$

ИК ν_3	ИК $\nu_{\text{сим.}}$	Рамоние	ИК ν_6
1830	1841	1849	1863
~1615	1611	1600	1589
1309	1291	1291	1297
770	768	772	783
—	624	614	627
430	—	—	407
—	—	—	313
—	—	253	—

1960

10Б87. Инфракрасные спектры некоторых нестабильных изомеров N_2O_4 и N_2O_3 . Hisatsune I. (J., Devlin J. P., Wada Yasuo. Infrared spectra of some unstable isomers of N_2O_4 and N_2O_3 . «J. Chem. Phys.», 1960, 33, № 3, 714—719 (англ.).—Исследованы в области $300—3000\text{ см}^{-1}$ спектры поглощения N_2O_3 и N_2O_4 , конденсированных при т-ре жидкого N_2 , и спектры, полученные после нагревания соответствующих конденсатов с последующим охлаждением снова до т-ры жидкого N_2 . Спектры исследовались в области $300—3000\text{ см}^{-1}$ как естественным изотопным составом молекул, так и обогащенных изотопом N^{15} . В результате анализа полученных данных показано существование двух нестабильных изомеров N_2O_4 и одного изомера N_2O_3 , что подтверждает выводы, сделанные ранее (РЖХим, 1960, № 22, 87452).

В. Юнгман

x.1961.10

1961

N₂O₃
pucrf
wpof. kon

7 Urey-Bradley potential constants in dinitrogen trioxide. J. P. Devlin and I. C. Hisatsune (Kansas State Univ., Manhattan). *Spectrochim. Acta* 17, 218-25(1961)(in English).—Force const. of NO₂, N₂O₄, nitrite ion, nitrosyl halides, and nitryl halides were used to calc. vibrational frequencies of N₂O₃. Since the structure of the latter mol. was unknown, several structures were considered. The results indicate planar C_s symmetry with an N—N bond distance of 2.08 Å. or greater, and the N—N—O angle less than 110°.

George M. Murphy

480
III

C.A. 1961, 5319
18298'bc.

1961

N₂O₃Сил.
конф.

2Б91. Силловые постоянные Юри — Бредли для молекулы азотистого ангидрида. Devlin J. P., Hisatsune I. C. Urey-Bradley potential constants in dinitrogen trioxide. «Spectrochim. acta», 1961, 17, № 2, 218—225 (англ.).—Предполагая для молекулы N₂O₃ (I) плоскую конфигурацию (точечная группа C_s) и варьируя значения структурных постоянных, авторы вычислили силловые постоянные I в приближении потенциального поля Юри — Бредли. Набор постоянных, обеспечивающих наилучшее согласие вычисленных и эксперим. значений основных частот I, соответствует следующим величинам структурных постоянных: $r(\text{N—N})$ 2,08, $r(\text{N=O})$ 1,18, $r(\text{N—O})$ 1,12 Å, $\angle \text{O=N=O}$ 134° и $\angle \text{N—N—O}$ 110°.

В. Юнгман

081-480

л. 1962.2

1 B114. Постоянные потенциала Юри—Брэдли в азотистом ангидриде. Devlin J. P., Hisatsune I. C. Urey—Bradley potential constants in dinitrogen trioxide. «Spectrochim. acta», 1961, 17, № 2, 218—225 (англ.)

Геометрическая структура молекулы азотистого ангидрида неизвестна, поэтому расчет частот колебаний выполнен для плоской и неплоской моделей с симметрией C_s при различных значениях длины связи N—N и угла NNO. Описываются различные варианты расчетов, выполненных с использованием силовых постоянных, известных для N_2O_4 и $NOCl$. В результате расчетов по методу наименьших квадратов по опытным значениям частот колебаний молекул $N^{14}_2O_3$ и $N^{15}_2O_3$ определены 12 силовых постоянных системы Юри—Брэдли и показана возможность их переноса в ряду нитро- и нитрозосоединений. Дано отнесение фундаментальных частот, свидетельствующее в пользу плоской модели молекулы.

М. Ковнер

480
III

723, V8 (крупно кемброк. маг.) 622, V5 (крупно
гнейс) 402, V6 (крупно гнейс) 313, V7 (N-N fan)
253, V9 (крупн.) (35). Наибольшие $\rho_{\text{пл}}$
покрытия гнейс 2.х.х $\sim 2,08$ (крупн. кри-
сталл) и $\angle$ N-N-O (крупн.) $\sim 110^\circ$.

Затемненные аномальные гнейсы
N2-25

1962

N_2O_3
 u.k.
 B9-III-2457

The infrared spectrum of N_2O_3 . I. C. Hisatsune and K. H. Rhee (Kansas State Univ., Manhattan). *Proc. Intern. Meeting Mol. Spectry., 4th, Bologna, 1959* 3, 989-98(Pub. 1962). The infrared spectrum of a mixt. of N_2O_3 and N_2O_4 was studied in the liquid phase, 2-25 μ , and in the solid phase, 2-35 μ , at low temp. The spectrum is compared with that of pure N_2O_4 and absorption bands due to N_2O_3 were identified. The similarity of frequencies of the intense absorption bands indicates that 1 predominant form of the mol. is present in the gas, liquid, and solid phases. The structure of this mol. is planar; it contains an N-N bond. The 4 intense absorption bands at 1857, 1602, 1300, and 782 cm^{-1} are assigned to NO stretching in the NO group, anti-symmetric NO stretching, symmetric stretching, and deformation of the NO_2 group. The enthalpy of disocn. of N_2O_3 is 10.3 kcal./mole.

S. E. Vandebosch
 B9-5258-III

C.A. 1963.59.5
 4684c

N_2O_3

ВР-III - 2457

13 Б107. Инфракрасный спектр N_2O_3 . Hisatsune I. C., Rhee K. H. The infrared spectrum of N_2O_3 . «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 3». Oxford — London — New York — Paris, Pergamon Press, 1962, 989—998 (англ.)

В ИК-спектре поглощения эквимольной смеси NO и NO_2 в жидком (-55°) и твердом (-130°) состояниях идентифицированы полосы, принадлежащие N_2O_3 , и предложено следующее отнесение частот основных колебаний (в cm^{-1}) для N_2O_3 (в твердом состоянии): 1857 (вал. кол. NO), 1602 (антисимм. вал. кол. NO_2), 1300 (симм. вал. кол. NO_2), 782 (деф. кол. NO_2), 625 (вращ. кол. NO_2 в плоскости N— NO_2), 406 (деф. кол.) и предположительно 320 (деф. кол. NO). Остальные 2 основные частоты не обнаружены. Проведено сравнение величин основных частот NO, NO_2 , N_2O_4 , N_2O_3 и N_2O_5 .

В. Юнгман

1962

ВР-III - 5258-III

X. 1963-13

1969

N_2O_3
смет

15154-III-85258-III-134

8 Д158. ИК-спектр N_2O_3 . Hisatsune I. C., Rhee K. H. The infrared spectrum of N_2O_3 . «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 3». Oxford—London—New York—Paris, Pergamon Press, 1962, 989—998 (англ.)

ИК-спектры поглощения смеси N_2O_3 и N_2O_4 исследованы при низких т-рах в жидкой фазе в области 2—25 μ и в твердой фазе в области 2—35 μ . При сравнении полученных спектров с известными спектрами чистого N_2O_4 идентифицированы многие полосы поглощения, принадлежащие N_2O_3 . Следующая пробная интерпретация дана шести основным колебаниям молекулы N_2O_3 : вал. кол. в NO-группе 1857 cm^{-1} , антисим. вал. кол. NO в NO_2 -группе 1602 cm^{-1} , сим. вал. кол. в NO_2 -группе 1300 cm^{-1} , деф. кол. NO_2 -группы 782 cm^{-1} , веерное кол. группы NO_2 относительно плоскости N— NO_2 652 cm^{-1} и внешнее деф. кол. NO_2 -группы 406 cm^{-1} . Отмечается, что для интерпретации остальных трех основных колебаний необходимы дальнейшие исследования в более далекой ИК-области.

К. Василевский

ф. 1963. 8Д

15154-III-85258-III-134

III - 2249

1963

N_2O_3 ($\gamma, \angle$)

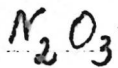
Akishin P.A., Vilkov L.V., Zasorin E.Z.,
Rambidi N.G., Spiridonov V.P.

Electron diffraction investigation of
the molecular structure of some gaseous
oxides. "J.Phys.Soc.Japan", 1962, 17, Suppl.
B-2, 18-19 (*ann.*)

Pφ., 1963, 4 D158

to

1963



ν_i

Yagodorskaya T.V.,
Nekrasov L.I.

Zh. Fiz. Khim., 37 (10), 2347.

Infrared absorption spectra
of the products of a glow
discharge in oxygen.

C.A. 1964. 60. 3

(see O_3) III

N_2O_3

Loris R. V. St.

1963

ИК-спектр

Russ. Abstr., 1963, 24, n5, 1855.

Изучение ИК-спектров
окислов азота и кислорода
да при низких температурах.

N 203

Lewis R. V. St.

1863

Disse. Abstr., 24, N 5, 1855

Углеродные и кремниевые
окислы азота и кислорода
при низких температурах.
~~и в амальгамах.~~

(an N 02)

N_2O_3
 Микроволн. спектр
 2 N-N
 браунст.
 ност.
 мембран
 микроан.

6 Д336. Микроволновый спектр азотистого ангидри-
 да. K u c z k o w s k i Robert L. The microwave spectrum
 of dinitrogen trioxide. «J. Amer. Chem. Soc.», 1965, 87,
 № 22, 5259—5260 (англ.)

При низких т-ре и давлении исследован микроволн.
 спектр четырех изотопич. образцов молекулы N_2O_3 .
 Эксперим. значения частот линий находятся в удовле-
 творительном соответствии с теоретич. расчетами. Опре-
 делены вращательные константы и моменты инерции.
 Подтверждена плоская структура молекулы. Найдена
 длина N—N-связи: $1,85 \pm 0,03$ Å.

1965

332

611

ВФ-4296-III

1966. 68.

Aven M., Mead C. A.

Electrical transport and contact properties of low resistivity *n*-type zinc sulfide crystals.

Appl. Phys. Letters, 1965, 7, N 1, 8—10.

Прохождение тока и свойства контакта низкоомных кристаллов ZnS *n*-типа. Библиогр. 13 назв.

1965

332

N_2O_3
M.B. Chert
The microwave spectrum of dinitrogen trioxide. Robert W. Kuczkowski (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Am. Chem. Soc.* 87(22), 5259-60(1965)(Eng). The microwave spectrum of N_2O_3 was obtained. Equal pressures of NO were mixed at -78° to a total pressure of 0.1 mm.; N_2O_3 was $\sim 0.1-1\%$ of the total mixt. The mol. is planar or very nearly planar with C_s symmetry and 2 nonequiv. N atoms sepd. by 1.85 ± 0.03 A. The NO bond lengths and angles are similar to those found in other mols. The rotational consts. (Mc.) and moments of inertia (at. mass units A.²) are:

	$O^{16}N^{14}NO_2$	$O^{18}N^{14}NO_2$	$O^{16}N^{15}NO_2$	$O^{18}N^{15}NO_2$
A	12.453	12.296	12.458	12.295
B	4226.49	4186.29	4213.00	4172.49
C	3152.98	3120.37	3145.49	2113.77
I_a	40.60	41.11	40.58	41.12
I_b	119.6101	120.7587	119.0931	121.1581
I_c	160.3354	162.0100	160.7161	162.4055

Milton Landy

C.A. 1966. 64.6

7549 49

139-4296-III

1967

N₂O₃(H.K.
Chen)

(T09651t) Reexamination of the infrared spectrum of dinitrogen trioxide. Walter A. Yeranios and Michael J. Joncich (Northern Illinois Univ., DeKalb). *Mol. Phys.* 13(3), 263-68(1967) (Eng). By assuming a planar geometry of C_s symmetry and by using a Urey-Bradley potential field, the force consts. of N₂O₃ were redetd. within the formalism of Wilson's G - F matrix method. The results suggest a new set of force consts., some of which are drastically different than those previously reported. Furthermore, since the ir frequencies used in the present investigation were obtained both in the solid state and at low temps., the mean amplitudes of thermal vibrations of both ¹⁴N₂O₃ and ¹⁵N₂O₃ are given at 77°K. Finally, it is suggested that more isotropic ir data are necessary to ascertain unequivocally the geometry of N₂O₃.
V. N. Krishnamurthy

C.A. 1968. 68. 24

N_2O_3

ВФ - ХИИ - 972

1987

8 Д155. Новое исследование ИК-спектра N_2O_3 . Ye-
ganos Walter A., Joncich Michael J. A re-exa-
mination of the I. R. spectrum of dinitrogen trioxide. «Mo-
lec. Phys.», 1967, 13, № 3, 263—268 (англ.)

Для плоской модели молекулы N_2O_3 (симметрия C_s)
и силового поля Юри — Брэдли с помощью метода
 $F - G$ -матриц Вильсона определены силовые постоянные.
Найденные значения силовых постоянных отличаются
от ранее известных примерно на 50%. Вычислены также
амплитуды тепловых колебаний $^{14}N_2O_3$ и $^{15}N_2O_3$ при 77° K.
А. И. О.

оп. 1968. 8А

N_2O_3

ВЗ-ХIII-972

1967

1) 15 Б176. Повторное исследование инфракрасного спектра N_2O_3 , Yeranov Walter A., Joncich Michael J. A re-examination of the I. R. spectrum of dinitrogen trioxide. «Molec. Phys.», 1967, 13, № 3, 263—268 (англ.).

С помощью литературных данных по частотам основных колебаний и структурным параметрам вычислены силовые коэф. поля Юри—Бредли молекулы N_2O_3 . Найденная система силовых коэф. удовлетворительно воспроизводит частоты $N_2^{15}O_3^{16}$. Вычислены также среднеквадратич. амплитуды колебаний $N_2^{14}O_3^{16}$ и $N_2^{15}O_3^{16}$ при $t = 77^\circ K$.

М. Р. Алиев

силовые
коэф. поля.

х. 1968. 15

N_2O_3

XIII-1579

1968

14 Б278. Структура трехокиси азота. Anders-
son L. O. Mason Joan. The structure of dinitrogen
trioxide. «Chem. Commun», 1968, № 2, 99—101 (англ.)

С помощью метода ЯМР N^{14} показано, что трехокись
азота N_2O_3 имеет нитрозо-нитроструктуру $ON-NO_2$.
Спектры ЯМР N^{14} жидкой N_2O_3 снимали на частоте
4 Мгц, хим. сдвиги измеряли в млн. д. относительно на-
сыщенного водного р-ра иона NO_2^- . Спектр ЯМР N^{14}
чистой жидкой N_2O_3 (при избытке NO) при $t_{ре} -50^\circ$
состоял из двух линий с хим. сдвигами $+165$ и
 -70 млн. д., приписываемых соответственно атомам азо-
та в нитро- и нитрозогруппах. В спектре образца, при-
готовленного из эквимольных количеств NO и NO_2 , по-

Структура

2.1968

14

является сигнал N_2O_4 с хим. сдвигом +243 млн. д. При возрастании отношения NO_2/NO растет интенсивность сигнала N_2O_4 за счет интенсивности сигнала N_2O_3 . В спектре чистого N_2O_4 наблюдается одна линия с хим. сдвигом +243 млн. д. Обсуждаются причины большого сдвига линии азота нитрозогруппы в слабое поле и причины уширения линий в спектрах. Я. Г. Урман

NaO_3

Alan H. Brittain

Peter Cox.

Robert L. Kuczkowski

1969

644

μ. b. cn. /
спектр. /

„Microwave Spectrum,
Structure, Low Frequency
Vibrations, Dipole Moment and
Quadrupole Coupling Constants...

ВФ-ХIII-77

1969

N₂O₃

8 Б324. Микроволновый спектр, структура, низкочастотные колебания, дипольный момент и константы квадрупольного взаимодействия трехоксида азота. Brittain Alan H., Cox A. Peter, Kuczkowski Robert L. Microwave spectrum, structure, low frequency vibrations, dipole moment and quadrupole coupling constants of dinitrogen trioxide. «Trans. Faraday Soc.», 1969, 65, № 8, 1963—1974 (англ.)

мол. спектр

мол. н.

Vi

Изучен МВ-спектр семи изотопич. разновидностей молекулы N₂O₃ (ON¹⁴—N¹⁴O₂ (I), ON¹⁵—N¹⁴O₂ (II), ON¹⁴—N¹⁵O₂ (III), ON¹⁵—N¹⁵O₂ (IV), ON—NO¹⁸O (V) (атом O¹⁸ в положении 4) ON—NOO¹⁸ (VI) (атом O¹⁸ в положении 5) и O¹⁸N—NO₂ (VII)) в области 14660—39090 Мгц. (1 ≤ J ≤ 6). В МВ-спектре II наблюдалось сверхтонкое расщепление, позволившее определить кон-

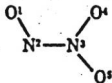
X. 1970. 8

станты сверхтонкого взаимодействия для атома N^{15} в группе NO: $X_{aa} = -2,34 \pm 0,05$, $X_{bb} = 1,12 \pm 0,33$, $X_{cc} = 1,22 \pm 0,34$ Мгц. Определены компоненты $\mu_a = 2,052 \pm 0,007$, $\mu_b = 0,541 \pm 0,007 D$ и полный дипольный момент $\mu = 2,122 \pm 0,010 D$. Установлено, что μ имеет наклон $9,1^\circ$ к связи N—N. Приведены значения вращательных постоянных I—VII в основном колебательном состоянии: для I $A = 12453,70$, $B = 4226,48$, $C = 3153,03$, для II $A = 12294,06$, $B = 4186,36$, $C = 3120,44$, для III $A = 12455,24$, $B = 4213,07$, $C = 3145,55$, для IV $A = 12295,0$, $B = 4172,54$, $C = 3112,81$, для V $A = 11631,2$, $B = 4201,86$, $C = 3084,05$, для VI $A = 12151,8$, $B = 4059,29$, $C = 3040,46$, для VII $A = 12445,5$, $B = 4015,54$, $C = 3033,52$ Мгц (минимальные ошибки в значениях постоянных A, B, C составляют $\pm 0,03$, а максимальные — $\pm 1,6$ Мгц). Для I наблюдался ряд вращательных переходов ($2 \leq J \leq 5$) в возбужденных колебательных состояниях $\nu_7 = 253$, $\nu_8 = 313$ см $^{-1}$, а также в состояниях ν_9 и $2\nu_9$. Частота крут. кол. $\nu_9 = 124 \pm 25$ см $^{-1}$. В приближении гармонич. осциллятора определено значение барьера заторможенного внутреннего вращения 34 ± 13 кдж/моль. Методом Крейчмена-Костейна определены геометрич. параметры молекулы N_2O_3 : $O^1-N^2-N^3-O^4(-O^5)$ $r(N_2N_3) = 1,864 \pm 0,007$, $r(N_2-O_1) = 1,142 \pm 0,004$, $r(N_3O_4) = 1,202 \pm 0,006$, $r(N_3O_5) = 1,217 \pm 0,007$ А, $\angle O_1N_2N_3 = 105,05 \pm 0,12^\circ$, $\angle O_4N_3N_2 = 112,72 \pm 0,68^\circ$, $\angle O_5N_3N_2 = 117,47 \pm 0,42^\circ$. Полученные геометрич. данные сопоставлены с данными для родственных молекул и обсуждены с точки зрения природы хим. связи в молекуле N_2O_3 .

А. Александров

N_2O_3

(759578) Microwave spectrum structure, low frequency vibrations, dipole moment, and quadrupole coupling constants of dinitrogen trioxide. Brittain, Alan H.; Cox, A. Peter; Kuczkowski, Robert L. (Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1969, 65(8), 1963-74 (Eng). The structure of N_2O_3 has been detd. from the microwave spectrum of 7 isotopic species. The detailed structure assocd. with the following planar



configuration is: $d(N_1N_2) = 1.864$; $d(N_2O_1) = 1.142$; $d(N_2O_2) = 1.202$; $d(N_2O_3) = 1.217$ Å.; angle $O_1N_2N_1 = 105.1^\circ$; $O_2N_2N_1 = 112.7^\circ$; $O_3N_2N_1 = 117.5^\circ$. The torsional vibrational frequency has been measured as 124 ± 25 cm.⁻¹ The quadrupole coupling consts. for the nitrosyl N are $\chi_{aa} = -2.34$, $\chi_{bb} = 1.12$, and $\chi_{cc} = 1.22$ MHz. The dipole moment has been detd. as $|\mu_a| = 2.05$; $|\mu_b| = 0.54$; and $|\mu_t| = 2.12$ D. inclined at an angle of 9.1° to the N-N bond. On the basis of these data, the bonding is discussed.

RCTD

C.A. 1969. 49. 16

1969

44-1111-68

Hochanadel C.J., Chormley J.A., 1969
Ogren R.J.

Enob J. Chem. Phys., 1969, 50, 3075

3

N_2O_3 (1937)

N_2O_5 (1937)

M.P.

Julg A., Ozices Y.

Enuab

Rev. Chim. Miner., 1969, 6, 201

14

N_2O_3 (1951)

N_2O_5 (1953)

M. G.

N_2O_3

спектр в
матрице

ν ,

вол.

стр.

ВЗР - ХИ - 1958

1971

1/6 Б249. Изомерные модификации окиси азота N_2O_3 в азотной матрице. Varette Eduardo L., Pimentel George C. Isomeric forms of dinitrogen trioxide in a nitrogen matrix. «J. Chem. Phys.», 1971, 55, № 8, 3813—3821 (англ.)

Измерены спектры поглощения в ближней УФ-, видимой и ИК-областях N_2O_3 (I), матрично-изолированной в N_2 . Обнаружено, что ИК-спектр матрично-изолированной I полностью согласуется со спектром асимм. N_2O_3 . При продолжительном облучении матрицы светом глобара происходит существенное изменение вида ИК-спектра,

РЖХ, 1972, № 6

приводящее к исчезновению старых полос и появлению новых 1689,7; 1661,0; 969,4; 704,3; 387,4 и 365,5 см⁻¹. Отмеченная трансформация спектра связывается со структурной изомеризацией асимм. I в симм. I: $O=N-O-N=O$. Установлен интервал длин волн (7000—9000 Å) облучающего света, способного инициировать изомеризацию. Обнаружена обратимость этого процесса при облучении матрицы УФ-светом 3700—4800 Å. Относит. стабильность асимм. I по сравнению с симм. оценена в $+5 \pm \pm 10$ ккал/моль.

Г. Кузьянц

N_2O_3

Vi

Marpus

855/1958

1111

89

C.A. 1971. 45

(145700n) Isomeric forms of dinitrogen trioxide in a nitrogen matrix. Varette, Eduardo L.; Pimentel, George C. (Chem. Dep., Univ. California, Berkeley, Calif.). *J. Chem. Phys.* 1971, 55(8), 3813-21 (Eng). When N_2O_3 is formed in a N matrix, it displays a vibrational spectrum very similar to that of the gas-phase, asym. mol. (*asym-N₂O₃*). On near-ir irradiation at 20°K, however, this structure is converted into an isomeric form with absorptions at 1689.7, 1661.0, 969.4, 704.3, 387.4, and 365.5 cm^{-1} . Both ^{15}N and ^{18}O labeling show that this isomer (*sym-N₂O₃*) has conventional, nitrite-like bonding and an extended, symmetric configuration, $O:N-O-N:O$. The spectral region responsible for the matrix-photolytic conversion of *asym-N₂O₃* into *sym-N₂O₃* is 7000-9000 Å; a region in which *asym-N₂O₃* absorbs (max., near 7200 Å). The *sym-N₂O₃* can be converted quantitatively back into *asym-N₂O₃* through irradiation in the uv region, 3700-4800 Å. Ultraviolet absorption features at 3630, 3810, and 3980 Å appear in the spectra of matrix samples during ir-photolytic production of *sym-N₂O₃*. These features disappear during the uv conversion of *sym-N₂O₃* back into *asym-N₂O₃*, so they are assigned to *sym-N₂O₃*; they must account for this uv photolytic process. Through bond energy arguments, the symmetric nitrite-like structure of *sym-N₂O₃* is judged to be no more than 5 ± 10 kcal less stable than the asymmetric form.

24

1972

N_2O_3

yes - check

146918w Dinitrogen trioxide. XI. Electronic spectrum of dinitrogen trioxide. Shaw, A. W.; Vosper, A. J. (South Wilts Grammar Sch. Girls, Salisbury, Engl.). *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1972, (8/9), 961-4 (Eng). The visible spectrum of N_2O_3 was detd. in 15 solvents, e.g. CCl_4 , Et_2O , PhMe, and PhOMe. In all cases an absorption max. was obsd. in the red region of the spectrum. Values for ϵ_{max} were 95-120 $\text{mole}^{-1}\text{dm}^2$ except in aromatic solvents when the values were higher (150-275 $\text{mole}^{-1}\text{dm}^2$) and were correlated with the electron-releasing properties of the solvent. The near-uv spectrum of gaseous N_2O_3 and its solns. in *n*-hexane and H_2O were reported.

C.A. 1972. 76. 24

N_2O_3

BP- XII-2446

1973

(min.) 50086p Nitrogen quadrupole hyperfine splitting in the microwave spectrum of dinitrogen trioxide. Cox, A. Peter; Finnigan, David J. (Dep. Phys. Chem., Univ. Bristol, Bristol, Engl.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1973, 69(1), 49-55 (Eng). Anal. of N quadrupole splittings, due to single and double N coupling, in the microwave spectra of N_2O_3 , $O^{15}NNO_2$, and $ON^{15}NO_2$, gave coupling consts. at both N nuclei. Values for χ_{aa} (NO_2) and

C.A. 1973, 78, N 8

χ_{aa} (NO) were -2.0 and -1.9 MHz, resp., where χ_{aa} is a diagonal element of the quadrupole coupling tensor in the principal inertial axis system of the mol. The consts. were interpreted in terms of the coupling found in NO and NO₂ perturbed by the weak N-N bond. This description satisfactorily accounted for the unusual structure and the value of the dipole moment in N₂O₃.

N_2O_3

14 Б270. Сверхтонкое квадрупольное расщепление по азоту в микроволновом спектре азотистого ангидрида. Cox A. Peter, Finnigan David J. Nitrogen quadrupole hyperfine splitting in the microwave spectrum of dinitrogen trioxide. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1973, Part 2, 69, № 1, 49—55 (англ.)

(м.н.) Изучено сверхтонкое квадрупольное расщепление в МВ-вращательных спектрах N_2O_3 , $ON^{15}NO_2$ и $ONN^{15}O_2$ в области $\sim 21\,920\text{—}38\,068$ МГц ($2 \leq J \leq 6$). Определены величины постоянных квадрупольного взаимодействия на обоих ядрах N: $\chi_{aa}(NO_2) = -2,0 \pm 0,1$ и $\chi_{aa}(NO) = -1,9 \pm 0,1$ МГц. Константы квадрупольного взаимодействия интерпретированы с использованием приближения Таунса-Дейли на основе рассмотрения квадрупольного взаимодействия в NO и NO_2 , возмущенного слабой связью N—N. По резюме

1973

2446

III

Вар-ХП-69

х. 1973 № 14

N_2O_4 , N_2O_3 (Di) XIII 2826 1973

Bibart C.H.,

Diss. Abst. Int. B, 1974, 34,
(12), 5925.

Vibrational spectroscopy of
gaseous dinitrogen tetroxide
and dinitrogen trioxide.

C.A. 1974. 81 N16 . 97262v 10



41014.8785
Ch, Ph, TC

N_2O_4 (Vib) 62
 N_2O_3 (структ.)

1974

XIII 2798

Bibart Charles H., Ewing George E.

Vibrational spectrum, torsional potential, and bonding of gaseous N_2O_4 .

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 4, 1284-1292

(англ.)

Ю 0211 пин

183 184

ВИНИТИ

Оттиски 2542

1974

N₂O₃

1 Д415. Колебательный спектр газообразного N₂O₃. Bibart Charles H., Ewing George E. Vibrational spectrum of gaseous N₂O₃. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 4, 1293—1299 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газовой смеси NO—NO₂, в которых выделены полосы, принадлежащие комплексу N₂O₃. Определены оптимальные условия для наблюдения этого комплекса, соответствующие t-ре 220° К. Спектры изучены в слоях 6 см для сильных полос и 3—12 м для слабых. Отнесение полос к определенным колебаниям N₂O₃ выполнено с использованием формы неразрешенных контуров. Для ряда полос наблюдается структура, образованная Q-ветвями крутильных переходов, комбинирующих с другими колебаниями комплекса. По этой структуре установлена частота крутильного колебания, равная 63 см⁻¹, эта частота соответствует барьеру для внутреннего вращения V₂ = 1 ккал/моль. Библ. 23.

М. В. Тонков

Ф. 1975 n1

N_2O_3

omnuea 2542

1974

129430s Vibrational spectrum of gaseous dinitrogen trioxide. Bibart, Charles H.; Ewing, George E. (Dep. Chem., Indiana Univ., Bloomington, Indiana). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(4), 1293-9 (Eng). Gaseous N_2O_3 was prepd. by the equil. reaction of NO with NO_2 . By careful selection of the temp. and pressure the relative concn. of N_2O_3 was high and its ir spectrum was ob-

(J; V₀)

C.A. 1974. 81. N2O

tained without interference from other nitrogen oxide absorptions. The spectrum reveals new features previously unreported including sequence bands containing torsional vibrations. This work, together with other far ir studies, provides an assignment of all the N_2O_3 vibrational frequencies. An est. of the internal rotation potential function indicates a barrier height of the order of 1 kcal/mole.

N_2O_3

оттиски 2542

1974

колебат.
спектр

5 Б275. Колебательный спектр газообразного N_2O_3 .
Bibart Charles H., Ewing George E. Vibrational spectrum of gaseous N_2O_3 . «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 4, 1293—1299 (англ.)

Исследован ИК-спектр N_2O_3 в газ. состоянии в криогенных кюветах с длиной пути от 6-см до 30 м. N_2O_3 получен газофазной низкот-рной р-цией NO_2 и NO в избытке последнего. Предложено новое, более полное отнесение основных колебаний N_2O_3 . В области 470 см^{-1} обнаружена новая последовательность составных полос, из анализа к-рой найдена частота крутильного колебания $N_2O_3 \sim 70\text{ см}^{-1}$. Оценен барьер внутреннего вращения N_2O_3 — 1 ккал/моль, к-рый в 2—3 раза меньше барьера для N_2O_4 .
Я. М. Кимельфельд

Х. 1875 № 5

1974

№ 03

Отчет по научно-исследовательской работе ИВТАИ, отгус № 2
"Периодические св-ва
м.п. азота, водорода и их соединений"

N_2O_3

ВЗР-ХШ-3802

спектры
поглощения
см. пост.

Ф 1976 N2

2 Д492. Исследование ИК-спектра асимметричной формы N_2O_3 . Bradley Guy Martin, Siddall William, Strauss Herbert L., Varetto Eduardo L. Infrared studies of asymmetrical dinitrogen trioxide. «J. Phys. Chem.», 1975, 79, № 18, 1949—1953 (англ.)

Получен спектр ИК-поглощения жидкой N_2O_3 при температурах от -10 до $50^\circ C$ в области $50-400\text{ см}^{-1}$. Наблюденные в этой области полосы 76 , 160 и 260 см^{-1} отнесены соответственно к крутильным колебаниям, валентным колебаниям группы $N-N$ и маятниковым колебаниям нитрозогруппы. Выполнен расчет колебаний молекулы с различными приближениями силового поля для предложенной интерпретации и для случая отнесения полосы 260 см^{-1} к колебанию $N-N$. Все методы дают хорошие результаты при расчете частот. Вычисленные величины силовых постоянных близки к аналогичным величинам для свободных молекул NO и NO_2 . Дефекты моментов инерции, определенные по рассчитанному силовому постоянному, во всех случаях плохо согласуются с опытными данными. Найденное по частотам значение энтропии хорошо согласуется с результатами термодинамич. измерений, которые недостаточно точны, чтобы позволить выбрать правильное отнесение. Библ. 12.

М. В. Тонков

1975

3802

Взмичи

№ 203

ВФ-ХМ-320.7

1975

5 Б281. Исследование инфракрасных спектров ассиметричной трехокиси азота. Bradley Guy Martin, Siddall William, Strauss Herbert L., Varetto Eduardo L. Infrared studies of asymmetrical dinitrogen trioxide. «J. Phys. Chem.», 1975, 79, № 18, 1949—1953 (англ.)

Измерен длинноволновый ИК-спектр жидк. ONNO_2 в области $400-50 \text{ см}^{-1}$ при t -рах от -50 до -10° . Пик 76 см^{-1} отнесена к торсионному колебанию, 160 см^{-1} — вал. кол. N—N, 260 см^{-1} — маятн. кол. NO. Более высокие частоты близки к соотв-щим значениям в молекулах NO и NO_2 . Частота 624 см^{-1} отнесена к неплоскому вверному колебанию NO. Вычислены силовые постоянные с 5 вариантами силового поля, причем во всех случаях были использованы частоты изо-

т. д. ф.
д; см.
пост.

X 1976 N 5

(41)



топозамещенных. Для сравнения полученных силовых полей введена качеств. мера их подобия с переводом всех результатов в общую декартову систему координат. Показано, что все 5 вариантов силового поля N_2O_3 ближе друг к другу, чем все они к силовому полю NO_2 . Неожиданным является тот факт, что лучшие варианты силовых полей, основанные на разных отнесениях вал. кол. N—N, ближе друг к другу, чем любая др. пара силовых полей. Вычислены термодинамич. функции. $S_{298}^0 = 73,79$ э. е. в приближении гармонич. осциллятора на основе полученных данных и 74,24 — при использовании торсионного потенциала.

Е. Разумова

N_2O_2 , N_2O_3 , N_2O_4 (vi) 1975
Mason J., XIII 3110

J. Chem. Soc. Dalton Trans.,
1975, vol. 19-22 (anti)

The dimeric nitrogen oxides. Part
I. Electronic absorption of the
nitrogen oxide dimer, and compari-
son of observed and calculated
Buxton, 1975. 155/56 10 pages

1974

№ 203

расчет
электр.
структур
М

14 Б43. Вычисление молекулярных орбиталей полуторной окиси азота, N_2O_3 . Doonan Ian J., MacLagan Robert G. A. Molecular orbital calculations on dinitrogen trioxide, N_2O_3 . «Austral. J. Chem.», 1977, 30, № 12, 2613—2619 (англ.)

Выполнен неэмпирический расчет электронного строения молекулы N_2O_3 в миним. базисе ф-ций слейтеровского типа. При вычислении интегралов, к-рыми пренебрегают в схеме ПДДП, использовалось приближение слейтеровских орбиталей тремя гауссовыми ф-циями (изучено также приближение двумя ф-циями, к-рое приводит к неверным результатам). Анализ полученных МО указывает на слабое σ -связывание N—N, отмечено также слабое притяжение между атомами O в цис-положении. Эти результаты согласуются с аномально длинной связью N—N (1,864 Å) в N_2O_3 , а также с небольшим наклоном ($2,4^\circ$) нитрогруппы в сторону нитрозильного фрагмента и уменьшенным (по сравнению с др. нитрозилами) углом при атоме азота группы NO. Выполнен расчет фрагментов NO и NO_2 молекулы N_2O_3 в том же базисе с геометрич. параметрами из N_2O_3 . Маллиkenовский анализ заселенностей показал, что образование N_2O_3 сопровождается небольшим σ -переносом

2, 1978, N 14

за...да (0,16 e) от NO к NO₂ и уменьшением заселенностей перекрывания всех пар N—O. Молекулярные орбитали N₂O₃ разложены по орбиталям NO и NO₂ и построена корреляц. диаграмма уровней NO, NO₂ и N₂O₃. По методу Фостера — Бойса получены локализованные орбитали (ЛО) N₂O₃, для ЛО проведен малликовский анализ заселенностей и найдены центры зарядовых распределений. Проведено сопоставление с ЛО ионов NO[±] и NO₂[±]. Вычисленный дипольный момент равен 1,87 D (эксперим. 2,12 D). Выполнен также расчет методом КВ с учетом девяти дважды возбужденных конфигураций (возбуждение с трех верхних заполненных на три нижние вакантные орбитали). Существенный вклад в волновую ф-цию КВ вносят две возбужденные конфигурации, соответствующие переходам на N—N разрыхляющие орбитали, что приводит к отриц. (—0,012) заселенности перекрывания N—N (0,11 в одноконфигурац. приближении). Заселенность перекрывания O—O_{дис} при этом также уменьшается, но остается положительной. М. М. Гофман

1947

N.203

88: 55241b Molecular orbital calculations on dinitrogen trioxide, N_2O_3 . Doonan, Ian J.; Maclagan, Robert G. A. R. (Dep. Chem., Univ. Canterbury, Christchurch, N. Z.). *Aust. J. Chem.* 1977, 30(12), 2613-9 (Eng). A min. Slater basis set MO calcn. on dinitrogen trioxide, N_2O_3 , is reported. In the evaluation of integrals, non-NDDO integrals were calcd. by the 3G/S expansion technique. Anal. of the wavefunction obtained shows weak bonding between the nitrosyl and nitro fragments and a very weak attractive interaction between the *cis*-oxygen. The MO's for N_2O_3 were expanded in terms of the NO and NO_2 MO's. A correlation diagram linking the N_2O_3 orbitals with the NO and NO_2 orbitals is presented. The localized MO's for N_2O_3 are analyzed. A configuration interaction calcn. involving the ground state and 9 doubly excited state configurations is reported. Two excited states have significant contributions. A comparison is made between the results obtained by using a 3G/S expansion and a calcn. using a 2G/S expansion.

C.A. 1948, N8

$\cdot N_2O_3$

1977

(7Д198) — Расчеты трехокиси азота, N_2O_3 , методом молекулярных орбиталей. Doonan J a n J., MacLagan Robert G. A. R. Molecular orbital calculations on dinitrogen trioxide, N_2O_3 . «Austral. J. Chem.», 1977, 30, № 12, 2613—2619 (англ.)

Методом МО в миним. базисе слэтеровских ф-ций исследуется молекула N_2O_3 . Интегралы вычисляются в приближении ПДДП с использованием аппроксимации слэтеровских ф-ций тремя гауссовыми. Коэф. разложения МО получают комбинацией итерационной процедуры Рутана и метода сопряженных градиентов. Расчет энергии основного состояния молекулы N_2O_3 при экспериментально найденной геометрии дает —332,4827 ат. ед. Использование в качестве базисного набора слэтеровских ф-ций, аппроксимированных двумя гауссовыми ф-циями, приводит к качественно неверным результатам (меняются конфигурация основного состояния и порядок орбитальных уровней). Анализ

исслед Е

(41) Есму!
ф. 1948, N 7

полученной волн. ф-ции показывает, что существует слабое связывание между фрагментами NO и NO₂ и очень слабое притяжение между атомами кислорода в дисположении. Рассматривается корреляционная диаграмма, связывающая орбитали N₂O₃ с орбиталями NO и NO₂. Расчет методом конфигурац. взаимодействия с учетом девяти дважды возбужденных конфигураций понижает энергию основного состояния до —332,6004 ат. ед. Обсуждается влияние возбужденных конфигураций на волн. ф-цию.

Ю. Г. Абашкин

N203

сумма 6087 1978.

Kishner S., et al.

меркурий,
уш. члзб
геометрия
молния

J. Amer. Chem. Soc.
1978, 100(5)
1385-71

Рем. N202; III)

1978

 N_2O_3

HONO

y. & c. c. c. c. c.

88: 112855f The near ultraviolet absorption spectrum of gaseous nitrous acid and nitrogen(III) oxide. Stockwell, William R.; Calvert, Jack G. (Chem. Dep., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Photochem.* 1978, 8(3), 193-203 (Eng). New measurements of the absorption cross sections for N_2O_3 and HONO vapors were made at 300-400 nm. The N_2O_3 data were derived from the obsd. spectra of equil. mixts. of N_2O_3 with NO, NO_2 and N_2O_4 . HONO data were derived from its equil. mixts. with NO, NO_2 , N_2O_3 and N_2O_4 . Correction for the absorptions of NO_2 and N_2O in the 1st mixts. and NO_2 , N_2O_4 and N_2O_3 in the 2nd mixts. were made by using the measured initial compns. together with equil. and NO_2 , N_2O_4 and N_2O_3 absorption cross



C.A. 1978, 8, 16

section data. The measured cross sections for HONO(g) are significantly greater than those reported from similar expts. by H. S. Johnston and R. Graham (1974) and are somewhat smaller than those recently published by R. A. Cox and R. G. Derwent (1976, 1977). The new data are consistent with relative rate measurements for the photochem. reactions $\text{HONO} + h\nu \rightarrow \text{HO} + \text{NO}$ and $\text{NO}_2 + h\nu \rightarrow \text{O} + \text{NO}$ studied in a simulated-sunlight-irradiated reaction chamber at low reactant concns. The 1st order rate consts. for the 1st of these reactions in the lower atm. are estd. as 0.089, 0.088, 0.086, 0.083, 0.077, 0.068, 0.054, 0.035, 0.017 and 0.0044 min^{-1} for sea level and no ground reflectivity with solar zenith angles of 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 78, and 86° , resp.

Emmich 8159

1979

N_2O_3

91:65390a A normal coordinate analysis for sym-nitrogen oxide (N_2O_3). Varette, E. L. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, 1900 La Plata, Argent.). *J. Mol. Struct.* 1979, 53(2), 275-80 (Eng). A mol. configuration of C_{2v} symmetry is proposed for sym- N_2O_3 (O:N-O-N:O) isolated in a N_2 matrix. The measured IR frequencies for the normal and ^{15}N -substituted mol. are used in a normal coordinate calcn. from which the form of the normal modes of vibration as well as the corresponding force consts. are derived.

Di. coord. not

XIII-5509

C.A. 1979, 91N8

симм-N₂O₃

расчет
нормальных
колебаний

Оттиски 8159

1979

19 B223. Расчет нормальных колебаний симм-N₂O₃.
Varetti E. L. A normal coordinate analysis for sym-
N₂O₃. «J. Mol. Struct.», 1979, 53, № 2, 275—280 (англ.)

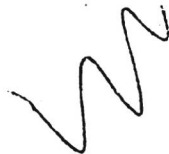
Проведен расчет нормальных колебаний для плоских
координат симм-N₂O₃ (O=N-O-N=O) (I), исполь-
зуя эксперим. данные по ИК-спектрам I и его ¹⁵N-ана-
лога в матрице азота при низких т-рах в области
2000—250 см⁻¹. Угол между направлениями O=N-свя-
зей, определенный из соотношения интенсивностей по-
лос вал. кол. O=N-связей согласуется с плоской кон-
фигурацией молекулы, имеющей симметрию C_{2v}. Расчет
плоских нормальных колебаний молекулы I также под-
тверждает правильность выбранной конфигурации.
Определены формы нормальных колебаний и силовые
постоянные I. Полученные силовые постоянные сопо-

XIII - 5509

ж. 1979, № 19

ставлены с соотв-щими данными для родственных мо-
леку. HONO, ClONO.
19.5.224

Е. Б. Назарова



N_2O_3

Lamminen 10624 | 1980.

Jug K, et al.

молекула
геометрия

Theor. chim. acta,
1980, 57, 107-130

(Y)

кв. все х.
- факт

1980

N₂O₃

94:162055b Molecular constants of symmetric dinitrogen trioxide. Natarajan, A.; Rajendran, S. (Dep. Phys., Autonomous P. G. Cent., Tiruchirappalli, 620020 India). *Acta Cienc. Indica*, [Ser.] Phys. 1980, 6(2), 31-5 (Eng). The potential energy consts. of sym. N₂O₃ were evaluated on the basis of the general valence force field. Mean square amplitudes of vibration, generalized mean square amplitudes of vibration, Coriolis coupling consts., shrinkage consts., and rotation distortion consts. were also computed. The thermodyn. properties of this mol. were calcd. for the ideal gaseous state at 1 atm. pressure for 11 temps., 100-1000°K., by using a rigid rotor harmonic oscillator approxn.

C.C.D. R.C.F.

H. N.

m.g. of - yield

(41) Tgg. N₂O₃;

C.A. 1981.94 N2O

NO-NO₂

1982

5 Д349. Измерение постоянных квадрупольной связи ядер азота в комплексе ON—NO₂ с использованием спектрометра с импульсным молекулярным пучком Флайгера — Балла. Nitrogen quadrupole coupling measurements on ON—NO₂ using the Flygare—Balle pulsed-beam spectrometer. Kukolich Stephen G. «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 25, 6927—6929 (англ.)

М.П.

С помощью микроволн. фурье-спектрометра с импульсной сверхзвуковой молекулярной струей измерен микроволн. спектр диамагн. комплекса NO—NO₂, состоящего из парамагн. молекул NO и NO₂ (на используемом спектрометре измеряются сигналы тушения свободной индукции газа). Идентифицирована сверхтонкая структура 6 вращательных переходов с $J \leq 4$ основного колебательного состояния. Определены значения постоянных квадрупольной связи обоих ядер азота. Полученные значения этих постоянных $eQq_{aa} = -1,7766$, $eQq_{bb} = 0,0585$ МГц для NO и $eQq_{aa} = -0,5260$, $eQq_{bb} = -4,1941$ МГц для NO₂ значительно отличаются от их значений для свободных молекул NO и NO₂.

Ф. 1983, 18,
N5

М. Р. Алиев

ON-NO₂

1982

9 Б281. Измерения квадрупольного взаимодействия азота в ON—NO₂ с помощью спектрометра импульсного пучка Флайгера—Болле. Nitrogen quadrupole coupling measurements on ON—NO₂ using the Flygare—Balle pulsed-beam spectrometer. Kukolich Stephen G. «J. Amer. Chem. Soc.», 1982, 104, № 25, 6927—6929 (англ.)

м.п;

С помощью МВ фурье-спектрометра исследована СТС переходов $1_{01} \rightarrow 0_{00}$, $2_{12} \rightarrow 1_{11}$, $2_{02} \rightarrow 1_{01}$, $2_{11} \rightarrow 1_{10}$, $3_{12} \rightarrow 3_{13}$, $4_{13} \rightarrow 4_{14}$ комплекса ON—NO₂ в импульсном пучке (центры переходов соотв. при 7379,541; 13685,411; 14660,6; 15832,551; 6435,669; 10695,832 МГц). Получены следующие значения вращательных постоянных и постоянных квадрупольного взаимодействия (в МГц): $A = 12412 \pm 22$, $B = 4226,530 \pm 0,012$, $C = 3152,966 \pm 0,012$; NO-группа — $eQq_{aa} = -1,7766 \pm 0,0037$, $eQq_{bb} = 0,0585 \pm 0,0021$; NO₂ группа — $eQq_{aa} = -0,5260 \pm 0,0035$, $eQq_{bb} = -4,1941 \pm 0,0018$. Отмечается, что найденные параметры квадрупольного взаимодействия значительно отличаются от соотв-щих значений для свободных молекул NO и NO₂.

Х. 1983, 19,
N 9

В. М. Ковба

N_2O_3

От. 16571 1983

10 Д472. Спектры ИК-поглощения окислов азота в жидком ксеноне. Изомеризация N_2O_3 . Infrared absorption spectra of nitrogen oxides in liquid xenon. Isomerization of N_2O_3 . Holland R. F., Maier William B., II. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 1, 2928—2941 (англ.)

Изучены ИК-спектры ($3900\text{—}240\text{ см}^{-1}$) окислов азота, растворенных в жидком ксеноне при $t_{\text{ре}} 160\text{—}220\text{ К}$. Проведен колебательный анализ спектров окислов азота в жидком Хе и сопоставление их со спектрами этих окислов в газовой фазе. Идентифицированы полосы колебаний молекул NO , NO_2 , $(\text{NO})_2$, N_2O_4 и N_2O_3 . Определены интегр. величины сечений поглощения молекул в жидком Хе. Предположено, что сим. и асим. конформации молекул N_2O_3 в жидком Хе находятся в динамич. равновесии, причем разность энергии этих изомеров не превышает $1,8 \pm 0,2$ ккал/моль. По-

спектр, ν_i ,
 ΔH ;

ср. 1983, 18, N10

казано, что молекулы $(\text{NO})_2$ образуют цис- и транс-конформеры в жидком Хе. Сделан вывод, что сложная структура ИК-полос молекул N_2O_4 в жидком Хе обусловлена наложением полос фундаментальных и составных колебаний, взаимодействующих по механизму резонанса Ферми. Библ. 38.

И. В. А.

N₂O₃

1983

23 Б1035. Теоретический анализ относительной ста-
бильности изомерных форм трехоксида азота. Estudio
teorico sobre la estabilidad relativa de las formas iso-
mericas del trioxido de nitrogeno. Jubert A. H., Va-
retti E. L. «3 er Congr. argent. fisicoquim. 3 ra
Reun. argent. fisicoquim. org., La Plata, 19—23 sept.,
1983». La Plata, 1983, 193 (исп.)

Неэмпирическим методом МО ЛКАО ССП выполне-
ны расчеты различных конформеров N₂O₃. Использо-
ваны базисные наборы ОСТ-3ГФ, 4-31ГФ и 6-31ГФ.
Найдено, что цис-форма на 4,31 ккал/моль более ста-
бильна, чем транс-форма. Барьер перехода оценен в
7,12 ккал/моль. Разность между несимм. (симметрия
C_s) и симм. (симметрия C_{2v}) конформациями в ми-
ним. базисе составляет 41,6 ккал/моль (расчет МПДП
приводит к величине 33,6 ккал/моль). Методом ППДП
со спектроскопич. параметризацией выполнены рас-

геометр.,
структура,
P_i, ΔE;

X. 1984, 19, N 23

четы энергии электронных переходов состояний $^1A''$, 1B_2 , 1A_2 , соотв-щих $\pi\pi^*$ -переходам. Для несимметричной N_2O_3 найден электронный переход с энергией 642,4 нм, а для симметричной N_2O_3 — с энергиями 397 и 396 нм.

А. Е. Смоляр

ONNO₂

От. 16590

1983

20 Б175. Изучение интерконверсии и характеристика асимметричного и симметричного триоксида азота в матрицах оксида азота методами КР- и ИК-спектроскопии. Interconversion studies and characterization of asymmetric and symmetric dinitrogen trioxide in nitric oxide matrices by Raman and infrared spectroscopy. Nour E. M., Chen L.-H., Laane J. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 7, 1113—1120 (англ.)

ν_i , см. пост.

Изучены ИК-спектры в области 400—2000 см⁻¹ и спектры КР (100—2000 см⁻¹) асимм. триоксида азота ONNO₂ (I), синтезированного из NO и O₂, взятых в соотношении 5—15:1 в NO, Ar, N₂ и CO₂ матрицах при 12 К. Из-за наличия избытка NO в спектрах матриц наблюдался ряд полос димера N₂O₄. Спектроскопически обнаружено, что при фотолизе матрицы I излучением Kr⁺-лазера с λ 568,2, 647,1; 676,4 и 752,6 нм в течение 10—120 мин происходит полная конверсия I в симм. триоксид ONONO (II), а фотолиз матрицы II излучением Ar⁺-лазера с λ 514,5 и 488,0 нм вызывает обратную конверсию II в I. Сделаны отнесения всех 9 фундаментальных колебаний I и 7 колебаний II в

X. 1983, 19,
N 20



ИК- и КР-спектрах I, II для изотопических разновидностей $^{14}\text{N}_2\text{O}_3$ и $^{15}\text{N}_2\text{O}_3$. Эксперим. отнесения подтверждены расчетами частот и форм нормальных колебаний молекул I, II для моделей симметрии C_{2v} . Уточнены отнесения вал. кол. ν_6 (N—N) 266 см^{-1} и неплоского деформационного колебания ν_8 (NO_2) 627 см^{-1} в спектрах I. Значения частоты и силовой постоянной $0,57\text{ мдин/\text{А}}$ колебания ν_8 характеризуют связь N—N как весьма слабую, хотя и более сильную, чем предполагалось ранее и подтверждает предположение, что структура связей в I может быть описана на основе слегка возмущенных индивидуальных молекул NO_2 и NO . Значение силовой постоянной мостиковой связи N—O в II составило $3,61\text{ мдин/\text{А}}$. Отмечена важная роль избытка молекул NO для реализации фотониндуцированной интерконверсии $\text{I} \rightleftharpoons \text{II}$.

А. Н. Курский

N₂O₃

DM. 16590

1983

10 Д473. Изучение интерконверсии и характеристика асимметричных и симметричных молекул трехокси диазота в матрицах окиси азота методами спектроскопии комбинационного рассеяния света и ИК-поглощения. Interconversion studies and characterization of asymmetric and symmetric dinitrogen trioxide in nitric oxide matrices by Raman and infrared spectroscopy. Nour E. M., Chen L.-H., Laane J. «J. Phys. Chem.», 1983, 87, № 7, 1113—1120 (англ.)

Получены ИК-спектры ($4000-450\text{ см}^{-1}$) молекул трехокси диазота (I), изолированных в матрицах окиси азота при $t = 12\text{ К}$, а также спектры комб. рас. матрично-изолированных молекул I при возбуждении лазерными линиями в диапазоне $488,0-752,6\text{ нм}$. Проведен анализ норм. колебаний и определены значения силовых постоянных связей сим. и асим. конформеров I в матрице. Обнаружено, что в пучке длинноволн. ($568,2-752,6\text{ нм}$) излучения наблюдается конформационный переход из асим. в сим. изомер I в матрице, тогда как при коротковолн. облучении ($488,0-$

спектр, ν_i ,
см. лосм.

ср. 1983, 18, N 10

514,5 нм) происходит обратный переход из сим. в асим. форму I. Величины силовых постоянных связей N—N и N—O в асим. и сим. конформациях матрично-изолированных молекул I равны 0,57 и 3,61 мдин/Å соответственно. Библ. 17. И. В. А.

O₂NNO
(N₂O₃)

Om. 16590

1983

UK u CKP,
Coul. NOCM,
Pi

98: 134490s Interconversion studies and characterization of asymmetric and symmetric dinitrogen trioxide in nitric oxide matrixes by Raman and infrared spectroscopy. Nour, E. M.; Chen, L. H.; Laane, J. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX 77843 USA). *J. Phys. Chem.* 1983, 87(7), 1113-20 (Eng). The 1st laser Raman spectra of both asym. dinitrogen trioxide (as-N₂O₃, O₂NNO) and sym. dinitrogen trioxide (s-N₂O₃, ONONO) were collected by stabilizing these species in NO matrixes at 12 K. Laser irradiation at wavelengths from 5682 to 7526 Å converts as-N₂O₃ to s-N₂O₃ but wavelengths of 5145 or 4880 Å convert the sym. isomer back to the asym. one. The Raman data along with the IR spectra of several isotopic species (with ¹⁵N and/or ¹⁸O) for both mols. made it possible to resolve previous ambiguities in the vibrational assignments of these isomers and to carry out meaningful force const. calcs. for them. The N-N stretching frequency at 266 cm⁻¹ for as-N₂O₃ and its stretching force const. of $f_{NN} = 0.57$ mdyn/Å both are characteristic of a very weak bond, although these values are higher than previously proposed. The N-O single bond stretching force const. for s-N₂O₃ was 3.61 mdyn/Å.

C. A. 1983, 98, N 16.

N_2O_3

Ом. 18292 / 1984

11 Б1025. Теоретическое изучение относительной стабильности изомеров N_2O_3 . A theoretical study of the relative stability of the isomeric forms of N_2O_3 . Jubert Alieid H., Varette Eduardo L., Villar Hugo O., Castro Eduardo A. «Theor. chim. acta», 1984, 64, № 4, 313—316 (англ.)

В базисах ОСТ-3 ГФ, 4—31 ГФ и 6—31 ГФ проведены неэмпирич. расчеты электронной структуры, геометрич. параметров и относит. стабильности изомеров молекулы N_2O_3 : асимм. $ONNO_2$ (I) и симм. $ONONO$ (II). Установлено, что рассчитанная для I геометрия значительно лучше согласуется с экспериментом, чем данные полуэмпирич. методов ППДП/2, МЧПДП/3, ЧПДП, ППДП/С-КВ. Расчет показал, что наиболее стабильной конформацией изомера II (на 4,31 ккал/моль) является цис-конформация, при этом потенциальный барьер

расчет изомер.
структур,
стабильности

х. 1984, 19, № 11

ер для перехода из цис- в транс-конформацию составляет 7,12 ккал/моль. Найдено, что изомер II более стабилен, чем изомер I, хотя, как обнаружено экспериментально, только последний существует в газовой фазе. Этот факт объяснен тем, что при газофазной р-ции между NO и NO₂ образование I более предпочтительно кинетически.

О. А. Басченко

N_2O_3

Ом. 18 292

1984

6 Д126. Теоретическое исследование относительной устойчивости изомерных форм N_2O_3 . A theoretical study of the relative stability of the ~~isomeric~~ forms of N_2O_3 . Jubert Alicia H., Varette Eduardo L., Villar Hugo O., Castro Eduardo A. «Theor. chim. acta», 1984, 64, № 4, 313—316 (англ.)

Электронное строение молекулы N_2O_3 рассчитано неэмпирич. методом ССП с использованием сгруппированных гауссовых базисов ОСТ-31Ф, 4-31 ГФ и 6-31 ГФ. Определены координаты минимумом потенц. поверхности, соответствующих асимметричному изомеру (ONNO_2) и цис-и трансконформациям симметричного изомера ONONO . Установлено, что цисконформер имеет энергию на 4,31 ккал/моль ниже, чем трансконформер; высота потенц. барьера заторможенного вращения в ONONO составила 7,12 ккал/моль. Аналогичные расчеты N_2O_3 выполнены при помощи полуэмпирич. процедур в рамках приближения нулевого диффер. перекрытия. Показано, что такой подход приводит к неудовлетворительным оценкам геометрич. параметров обоих изомеров. А. В. Зайцевский

расчет E_i ,
и.п., геометр;
структ.

ср. 1984, 18,
N 6

N_2O_3

[Om. 18 292] 1984

100: 74324p A theoretical study of the relative stability of the isomeric forms of nitrogen oxide (N_2O_3). Jubert, Alicia H.; Varetti, Eduardo L.; Villar, Hugo O.; Castro, Eduardo A. (Fac. Cienc. Exactas, Univ. Nac. La Plata, 47y 115, 1900 La Plata, Argent.). *Theor. Chim. Acta* 1984, 64(4), 313-16 (Eng). The electronic structure, geometrical parameters, and relative stability of the isomeric forms of N_2O_3 were analyzed by means of ab-initio calcns. Total energies of the different isomers are given. The energy difference between the most stable conformers of sym. N_2O_3 is 4.31 kcal/mol, as provided by a 6-31 G basis set. The height of the rotational barrier detd. by the ab-initio technique is 7.12 kcal/mol.

статус
измеров

V_0 , мюп. рас-
рем.

©.A.1984, 100, N10

N_2O_3

Рм. 18592) 1984

7 Л172. Интенсивности ИК-поглощения N_2O_3 . Infra-red absorption intensities for N_2O_3 . Kagann Robert H., Maki Arthur G. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer», 1984, 31, № 2, 173—176 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения образованной в двух обратимых реакциях N_2O_3 в газовой фазе. Реагирующие компоненты при общем давл. 55 мм рт. ст. с добавлением азота до 1 атм изучены с разрешением $0,06 \text{ см}^{-1}$. Парциальные давления различных окислов азота определены по литературным данным о константах равновесия реакций. Выполнено разделение полос. Измерены интегр. интенсивности полос поглощения ν_1 и ν_3 N_2O_3 , составляющие 1500 и $1200 \text{ см}^{-2} \cdot \text{атм}^{-1}$ соответственно. М. В. Т.

ν_1, ν_3

ср. 1984, 18, № 7

N_2O_3

1984

2 Д99. Расчет силового поля симметричной молекулы N_2O_3 . Force field study of the symmetric dinitrogen trioxide molecule. Mohan S., Subramanian K. «Proc. Indian Nat. Sci. Acad.», 1984, A50, № 2, 156—160 (англ.)

1 Выполнен анализ норм. координат молекулы ONONO с симметрией C_{2v} . Из литературных данных по частотам основных колебаний, измеренных по ИК-спектру N_2O_3 , приближенным методом кинетич. констант вычислены гармонические силовые постоянные N_2O_3 . Вычислены также среднеквадратичные амплитуды колебаний, постоянные кориолисова взаимодействия и кватичного центробежного искажения этой молекулы. М. Р. Алиев

М. П., инст.
пост-

ср. 1986, 18, № 2

N_2O_3

1984

4 Б1268. Исследование силового поля симметричной молекулы триоксида азота. Force field study of the symmetric dinitrogen trioxide molecule. Mohan S., Subramanian K. «Proc. Indian Nat. Sci. Acad.», 1984, A 50, № 2, 156—160 (англ.)

Методом кинетич. постоянных рассчитано силовое поле молекулы N_2O_3 симметрии C_{2v} . Расчет проведен для блоков симметрии A_1 и B_1 в рамках модели обобщенного валентно-силового поля. Силовая постоянная $f_R(N=O)$ вдвое выше величины $f_r(N-O)$, силовые постоянные f_{rr} вносят существенный вклад в потенциальную ф-цию N_2O_3 . С полученными силовыми постоянными рассчитаны средн. амплитуды колебаний при 298,16 К, кориолисовы постоянные колебательно-вращат. взаимодействия ($A_1 \times B_1$) и постоянные центробежного искажения. Г. М. Курамшина

сим. пост.,
 f_i , м.п.

х. 1986, 19, № 4

N_2O_3

1984

/ 101:160269b Force field study of the symmetric dinitrogen trioxide molecule. Mohan, S.; Subramanian, K. (Madras Inst. Technol., Anna Univ., Madras, 600 044 India). *Proc. Indian Natl. Sci. Acad., Part A* 1984, 50(2), 156-60 (Eng). A force field study of the sym. N_2O_3 mol. was carried out. All the general quadratic force consts. were calcd. using the kinetics consts. method which in turn were utilized to evaluate the vibrational mean amplitudes, Coriolis coupling consts., and centrifugal distortion consts. for this mol.

Chem. NOCM,
NOCM. Berempro
Беремпро. укр.

C.A. 1984, 101, N18

N_2O_3

1986

19 Б1345. Константы квадрупольного взаимодействия азота-14 в N_2O_3 , определенные методом изотопозамещения. Nitrogen-14 quadrupole coupling constants in N_2O_3 by isotopic labelling. Cox A. Peter, Randell Jeremy, Legon A. C. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 6, 481—486 (англ.)

Измерены МВ-спектры $\text{O}^{15}\text{N} \dots \text{NO}_2$ и $\text{ON} \dots ^{15}\text{NO}_2$ с использованием импульсной методики введения газа (смесь NO/NO_2 с Ar) через сопло в МВ-эталон Фабри—Перо. Определены частоты переходов $101-000$, $111-000$, $212-111$, $211-110$ $\text{O}^{15}\text{N} \dots \text{NO}_2$ и $\text{ON} \dots ^{15}\text{NO}_2$, а также $101-000$ и $111-000$ $\text{O}^{15}\text{N} \dots ^{15}\text{NO}_2$. Рассчитаны постоянные квадрупольного взаимодействия

(ν_i , м.н.)

Х. 1986, 19, № 19

для $\text{O}^{15}\text{N} \dots \text{NO}_2$ — $\chi_{aa} = -1,7999(13)$, $\chi_{bb} = 0,0808(17)$,
 $\chi_{cc} = 1,7191(17)$ МГц и $\text{ON} \dots {}^{15}\text{NO}_2$ — $\chi_{aa} = -0,5203$
 (20), $\chi_{bb} = -4,1981(19)$, и $\chi_{cc} = 4,7183(19)$. На основа-
 нии анализа расщеплений в спектре $\text{O}^{15}\text{N} \dots {}^{15}\text{NO}_2$ вы-
 числены константы магн. взаимодействия для ${}^{14}\text{N}$ и ${}^{15}\text{N}$
 в $\text{ON} \dots {}^{15}\text{NO}_2$, равные $0,0080(11)$ и $-0,015(3)$ МГц
 соотв. С учетом имеющихся данных для $\text{ON} \dots \text{NO}_2$
 рассчитан полный тензор квадрупольного взаимодей-
 ствия для NO_2 -группы.

С. Б. Осин

N_2O_3

1986

105: 51139w Nitrogen-14 quadrupole coupling constants in dinitrogen trioxide (N_2O_3) by isotopic labelling. Cox, A. Peter; Randell, Jeremy; Legon, A. C. (Dep. Phys. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 126(6), 481-6 (Eng). Several microwave transitions of $O^{15}N-NO_2$ and $ON-^{15}NO_2$ were measured under high resolu. using a pulsed-nozzle Fourier transform spectrometer. The ^{14}N quadrupole coupling consts. in the inertial axis system were detd. for both N atoms. The quadrupole coupling consts. for $ON-^{15}NO_2$ are $eQq_{aa} = -0.5203(20)$ and $eQq_{bb} = -4.1981(19)$ MHz, and for $O^{15}N-NO_2$ are $eQq_{aa} = -1.7999(13)$ and $eQq_{bb} = 0.0808(17)$ MHz. The ^{14}N quadrupole coupling detd. by S. G. Kukolich (1982) for the main species $ON-NO_2$ should be reversed with respect to the NO and NO_2 groups. Combining the present data with the main species consts. allows the complete quadrupole coupling tensor to be estd. for the NO_2 group; the tensor in N_2O_3 lies $\leq 2^\circ$ of the N-N bond direction and $\leq 0.4^\circ$ of the bisector of the ONO angle. Spin-rotation effects are significant for N in the NO group; C_{aa} is 8 ± 2 kHz for ^{14}N in $ON-^{15}NO_2$ and -15 ± 3 kHz for ^{15}N obtained directly from splittings in the spectrum of $O^{15}N-^{15}NO_2$.

рост. хваг -
пунктир.
распредел.

C. A. 1986, 105; N 6

N_2O_3

1986

9 Л177. Определение констант квадрупольного взаимодействия азота-14 в N_2O_3 методом меченых изотопов.
Nitrogen-14 quadrupole coupling constants in N_2O_3 by isotopic labelling. Cox A. Peter, Dandell Jeremy, Legon A. C. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 6, 481—486 (англ.)

(м.п.)

Изучены вращательные спектры (область 7000—16 000 МГц) $O^{15}N \dots NO_2$ (I) и $ON \dots ^{15}NO_2$ (II), полученных в свободно расширяющейся струе смеси $^{15}NO_2$ — $^{14}NO_2$ —Ar. Произведено отнесение линий к различным типам переходов. Оценены константы квадрупольного взаимодействия для ^{14}N в I и II, а также константы спин-вращательного взаимодействия для ^{14}N и ^{15}N в II.
В. В. Белякова

ср. 1986, 18, № 9

N₂O₃

CM. 30014

1988

91 Л221. Фурье-спектроскопия высокого разрешения ν_1 ($n=1-4$) полос N₂O₃. A high resolution FTIR spectroscopic study of the ν_1 ($n=1-4$) bands of N₂O₃ / Chewter Leslie A., Smith Ian W. M., Yarwood Gregory // Mol. Phys.— 1988.— 63, № 5.— С. 843—864.— Англ.

С помощью фурье-спектрометра получены спектры ИК-поглощения N₂O₃ с разрешением 0,005 см⁻¹ в области валентного колебания ν_1 и его обертонов вплоть до третьего при $t=230$ К. В условиях неполного разрешения вращательной структуры, опираясь на ее детали, связь между моментами инерции и сравнивая наблюдаемые спектры с рассчитанными, авторы определили колебательные частоты и вращательные постоянные молекулы в основном и возбужденных состояниях. По ширинам линий оценено время жизни молекулы в высоковозбужденных состояниях, лежащих выше предела диссоциации. Эта величина показывает, что перенос энергии с моды ν_1 на другие незначителен. Библ. 37. М. В. Т.

М.П.

ср. 1989, №1

N_2O_3

01.30.014

1988

24 Б1386. Исследование методом ИК-фурье-спектро-
скопии высокого разрешения полос ν_1 ($n=1-4$) N_2O_3 .
A high resolution FTIR spectroscopic study of the ν_1
($n=1-4$) bands of N_2O_3 . Chewter L. A.,
Smith I. W. M., Yarwood G. «Mol. Phys.», 1988, 63,
№ 5, 843—864 (англ.)

На ИК-фурье-спектрометре высокого разрешения из-
мерены спектры полос ν_1 в обл. частот 1800—1850 cm^{-1}
с разрешением 0,005 cm^{-1} , $2\nu_1$ в обл. 3600—3660 cm^{-1}
с разрешением 0,006 cm^{-1} , $3\nu_1$ в обл. 5370—5430 cm^{-1}
с разрешением 0,015 cm^{-1} и $4\nu_1$ в обл. 7105—7165 cm^{-1}
с разрешением 0,5 cm^{-1} N_2O_3 при t -ре 231 К. Для ос-
новной полосы и первых двух обертонов определены
вращат. постоянные. По началам полос определена по-
стоянная ангармоничности $x_{11} = -15,5$ cm^{-1} . По изме-
нениям вращат. постоянных с ростом номера обертона
составлена простая модель для представления струк-
турных изменений молекулы с возбуждением ν_1 .
Верхние состояния всех обертоновых полос расположе-
ны выше предела диссоциации $N_2O_3 \rightarrow NO + NO_2$.

С. Н. Мудзин

М.А.

Х. 1988, № 24

1988

N₂O₃

Dm 30014

v₁, Franck-Condon.

C.A. 1988, 109, N2.

109:13372c A high-resolution FTIR spectroscopic study of the ν_1 ($n = 1-4$) bands of nitrogen oxide (N₂O₃). Chewter, Leslie A.; Smith, Ian W. M.; Yarwood, Gregory (Dep. Chem., Univ. Birmingham, Birmingham, UK B15 2TT). *Mol. Phys.* 1988, 63(5), 843-64 (Eng). The fundamental and 1st 3 overtone bands associated with the ν_1 (NO stretching) vibration of the planar, asym. top mol. N₂O₃ were studied at ~230 K under high spectral resolu. using a Fourier transform IR spectrometer. Even for the ν_1 band, where the spectrum is obtained at 0.005 cm⁻¹ resolu., the complexity of the rotational structure defies complete anal. However, from (1) the sharp P and R branch features assoc. with coincidences between transitions with high J and low K, (2) simulations of the shape of the main type A Q branch, and (3) the relationship between the 3 moments of inertia of a planar mol., it was possible to deduce the wavenumbers of the band origins ($\nu_1^0 = 1329.535(2)$, $2\nu_1^0 = 3628.03(5)$, $3\nu_1^0 = 5394.124(10)$ and $4\nu_1^0 = 7128.5 \pm 1$ cm⁻¹) and, for ν_1 , $2\nu_1$ and $3\nu_1$, the rotational consts., A', B' and C'. Hot bands make a considerable contribution to the spectrum in the region of each main band. A no. of type A Q branches were assigned and, from the frequency shifts from the origin of the main bands, the anharmonicity consts. x_{16} , x_{17} and x_{19} were estd. The upper states of the overtone bands all lie above the dissocn. limit for N₂O₃ $\rightarrow$ NO + NO₂. The linewidths obsd. for some transitions in the $2\nu_1$ and $3\nu_1$ bands indicate lifetimes of (120-300) ps and >150 ps, resp., demonstrating that intramol. energy flow from the ν_1 mode is relatively slow and that, in this respect, N₂O₃ exhibits "near-RRKM behavior".

ONNO₂

07.11 33493 1990

12 Б1118. Электронные и колебательные свойства ONNO₂ и ONNSO. Electronic and vibrational properties of ONNO₂ and ONNSO / Maluendes S. A., Jubert A. H., Castro E. A. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1990.— 204. — С. 145—151.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП с использованием базисных наборов MINI-3 (А), MINI-3* (Б), 3—21 ГФ, 3—21 ГФ*, 3—21 ГФ**, 6—31 ГФ и 6—31 ГФ* проведены расчеты электронного и геометрич. строения и частот колебаний систем ONNO₂ (I) и ONNSO (II). Обсуждено влияние кач-ва базисного набора на результаты расчетов. Результаты расчетов сопоставлены с эксперим. данными и результатами проведенных авторами расчетами методом конфигурац. взаимодействия с ограниченным учетом одно- и двукратных возбуждений в базисах А и Б. Показано, что для правильного описания длины связи NN в I и II необходимо учитывать электронную корреляцию (длина этой связи на уровне ССП приблизительно на 0,2 А занижена). Сделан вывод, что обе молекулы могут рассматриваться как два взаимодействующих фрагмента ON и NO₂/SNO.

И. Н. Сенченя

М. П.

Д(А)

Х. 1990, № 12

Na_2O_3

Om 33193

1990

112: 125490x Electronic and vibrational properties of nitrogen oxide (ONNO_2) and nitrogen oxide sulfide (ONNSO). Maluendes, S. A.; Jubert, A. H.; Castro, E. A. (Div. Quim. Teor., INIFTA, 1900 La Plata, Argent.). *THEOCHEM* 1990, 63, 145-51 (Eng). The geometry, electronic, and vibrational properties of ONNO_2 and ONNSO were analyzed by means of ab initio calcs. The geometrical parameters of both mols., calcd. with different basis sets, can be compared fairly well with exptl. results, with the exception of the N-N bond length which could be described only by using a limited direct configuration-interaction calcn. The calcd. vibrational modes of ONNO_2 were compared with those previously measured and a different assignment was proposed for several bands. In the case of ONNSO the calcn. was used predictively since its vibrational spectrum has not been completely assigned.

racem
racem

(+)~~Na~~ Na_2S

C.A. 1990, 112, v 14

ONNO₂

On 33193

1990

6 Д99. Электронные и колебательные свойства ONNO₂ и ONNSO. Electronic and vibrational properties of ONNO₂ and ONNSO / Maluendes S. A., Jubert A. H., Castro E. A. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1990.— 204.— С. 145—151.— Англ.

М.п.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в нескольких базисах сгруппированных гауссовых ф-ций от минимальных до 6-31ГФ** с частичным учетом конфигурац. взаимодействия исследовано электронное строение ONNO₂ и ONNSO. Приведены равновесная геометрия, колебательные частоты. Геометрия хорошо согласуется с эксперим. данными, однако длины связей N—N получаются сильно заниженными и только при учете конфигурац. взаимодействия согласуются с эксперим. значениями. Проведено уточненное отнесение полос в колебательных спектрах. Показано, что обе системы можно рассматривать как продукты взаимодействия NO с NO₂ и NSO соответственно.

В. Л. Лебедев

(11) 11

ср. 1990, № 6

ON-NO₂

1990

1 4 Д156. Квантовотопологическое описание зарядовой плотности в молекулах ON—NO₂ и ON—NSO. Quantum topological description of the charge density of the ON—NO₂ and ON—NSO molecules / Stradella O. G., Maluendes S. A., Castro E. A., Jubert A. H. // J. Mol. Struct. Theochem.— 1990.— 210.— С. 169—174.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе 6-31ГФ* для атомов S и 6-311ГФ* для остальных атомов с оптимизацией геометрии в базисе 6-31ГФ исследовано электронное строение ON—NO₂ (I), ON—NSO (II) и фрагментов NO, NO₂ и NSO и модельных молекул N₂H₄, N₂H₂ и N₂. Для критич. точек связей и точек конц-ии заряда связей рассчитаны топологич. параметры — электронные плотности, значения лапласиана плотности (мера изменения электронного заряда), плотности хартри-фоковской энергии, эллиптичности связей, отношения сжатий зарядовой плотности в перпендикулярном и парал. направлениях и расстояния между критич. точками и ядрами. Оценены ионности связей в I и II и подробно проанализирована их природа.

В. Л. Лебедев

М.А.

ср. 1991, № 4

N_2O_3

DM 36373 1991

11 B1107. Теоретическое исследование колебательной преддиссоциации N_2O_3 . Theoretical investigation of the vibrational predissociation of N_2O_3 / Bintz Karen L., Thompson Donald L. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 187, № 1—2.— С. 116—172.— Англ.

Методом классич. траекторий рассчитаны скорости колебат. преддиссоциации (КП) молекулы N_2O_3 при различном выборе начальных условий и энергии колебат. возбуждения 22—27,4 ккал/моль. Использована модельная потенциальная поверхность. Обнаружена заметная чувствительность скорости КП к возбуждениям колебаний разных типов. Наиболее эффективны возбуждения колебаний ν_4 (деформация NO_2) и ν_3 (симм. колебание NO_2). Возбуждения ν_1 (NO) и ν_2 (асимм. колебание NO_2) приводят к более медленной КП. Вывод о нестатистич. характере КП в целом согласуется с эксперим. наблюдениями. Различие в теор. и эксперим. временах жизни (до порядка величины) предположительно отнесено к перераспределению энергии нулевых колебаний в классич. расчетах.

А. А. Бучаченко

М.П.

X. 1992, N 11

ONNO₂

1991

116: 159319w Valence bond studies of the nitrogen-nitrogen bonds of dinitrogen dioxide, nitrosyl nitrite, dinitrogen tetroxide, and N-methylenemethanionidamide. Harcourt, Richard D. (Sch. Chem., Univ. Melbourne, Parkville, 3052 Australia). *Croat. Chem. Acta* 1991, 64(3), 399-414 (Eng). The results of some STO-5G valence bond calcns. are presented for a cis ONNO component of each of ONNO₂ and O₂NNO₂, and the CNNC component of trans CH₃NNCH₃. These studies provide support for the hypothesis that the -NO nitrogen AO, which is involved in the formation of the (fractional) N-N σ bond of ONNO₂, is primarily 2p in character, and oriented at right angles to the N-O internuclear axis, rather than along the N-N internuclear axis. Whereas delocalization of oxygen lone-pair electrons into the AOs of the N-N σ bond is responsible for the N-N bond lengthening for N₂O₄ relative to that of N₂H₄, the orientation and 2p character of the -NO nitrogen AO, as well as some delocalization of the oxygen lone-pair electrons, leads to the lengthening of the N-N bond of ONNO₂. It has been shown previously (J. Mol. Struct. (Theochem) 206 (1990) 253) that

(prop. part)

A (H)

C.A. 1992, 116, N16

O₂NNO₂ u sp.

repulsions between nitrogen lone-pair electrons, together with the nitrogen AO hybridization and orientation, are assocd. with the existence of a very long N-N bond in cis N_2O_2 . These factors are said to operate in a different manner for the trans CNNC component of CH_2NNCH_2 , for which the measured N-N bond length is essentially that of an N-N single bond. Consideration is given to the construction and properties of increased-valence structures for $ONON$, $ONONO_2$, two NO_2 isomers, $OSSO$ and S_4 , as well as for O_2NNO , $ONNO_2$ and O_2NNO_2 .

N_2O_3

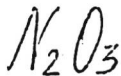
1992

Prasad P.D.S., Singh S.
Nath.

Acta Cienc. Indica,
Phys. 1992, 18(4), 335-
342.

मेपरेर.
पारेर

( cer. N_2O_2 ; III)



1993

118: 198699f Ab initio study on the structure of dinitrogen tetroxide: is there a D_{2d} conformer? Liu, Ruifeng; Zhou, Xuefeng (Dep. Chem. Biochem., Univ. Arkansas, Fayetteville, AR 72701 USA). *J. Phys. Chem.* 1993, 97(17), 4413-15. (Eng). Ab-initio calcns., at the MP2 level with the 6-31G* and 6-311G* basis sets, satisfactorily reproduced the exptl. structural and vibrational spectral features of the D_{2h} conformer of dinitrogen tetroxide. Calcns. at the same level, however, indicated that the D_{2d} conformation of this mol. is a transition state for the torsional motion around the N-N bond. Therefore, the previously obsd. matrix-IR spectral features should not be attributed to the D_{2d} structure of dinitrogen tetroxide.

См. также,
в кн. "Спектр
и структура"

C.A. 1993, 118, N20

N_2O_3

1994

(120: 176702r Molecular beam diode-laser spectrum of the ν_3 band of N_2O_3 at 1304 cm^{-1} . Andrews, Anne M.; Domenech, Jose L.; Fraser, Gerald T.; Lafferty, Walter J. (Mol. Phys. Div., Natl. Inst. Stand. Technol., Gaithersburg, MD 20899 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 163(2), 428-35 (Eng). The IR spectrum of the ν_3 band of N_2O_3 has been obsd. at 1304 cm^{-1} using a slit-jet tunable-diode-laser spectrometer. A total of 439 IR transitions are fit to a precision of 0.0003 cm^{-1} . Improved ground state rotational consts. are calcd. from ground state combination differences up to $J'' = 20$, $K_a'' = 10$. A no. of weak perturbations are seen in the spectrum characterized by interaction matrix elements of $0.002\text{--}0.01\text{ cm}^{-1}$.

(UK, P3)

C.A. 1994, 120, N14

$N_2 O_3^+$

1994

Snyder G., Sapse D.

ab initio
pacrēm

Chem. Phys. Lett.
1994, 218 (4), 372-6.

( $He O_3^+$; III)

N_2O_3

1995

123: 209329s Why N_2O_2 is cis while $(CHO)_2$ is trans: MO and VB studies. Mo, Yirong; Zhang, Qianer (Dep. Chem., Xiamen Univ., Xiamen, Peop. Rep. China 361005). *Int. J. Quantum Chem.* 1995, 56(1), 19-26 (Eng). The nonempirical valence-bond method as well as the MO method are applied to investigate the structures of N_2O_2 and $(CHO)_2$. Results show that in either mol. the σ -component tends toward a trans conformation; whereas, the π -component tends toward a cis conformation. Moreover, even if there are some long-range bonding overlaps in the cis structure, the bonding energy cannot counteract the increased Coulombic repulsive energy compared with the trans structure. In other words, for a cis conformation, there is a competition between the Coulombic destabilization and the π electronic stabilization. The latter is more preferable to a cis conformation of N_2O_2 , while the Coulombic repulsive interaction should be responsible for the trans conformation of $(CHO)_2$. The nonempirical VB calcs. show that the π delocalization energy in N_2O_2 is negligible, while the value in $(CHO)_2$ is about 4.5 kcal/mol.

сбалансирован
использ.
мет. расчет

□ (11)

$(CHO)_2$

C. A. 1995, 123, N16

N₂O₃

OT

38135

1995

123: 353260e An ab initio study of the structure, vibrational frequencies and force field for the symmetric form of N₂O₃. Vladimiroff, T. (Building 3124, Armament Engineering Directorate, US Army ARDEC, Picatinny Arsenal, NJ 07806-5000 USA). THEOCHEM 1995, 342, 103-8 (Eng). The structure of sym. N₂O₃ was studied using ab initio methods. Bond lengths and bond angles were detd. using the 6-31G* and the 6-311G* basis sets and both SCF and MP2 theory. At the highest level of theory considered, the N-O bond is 1.492 Å, the N = O bond was 1.168 Å, the N-O-N angle was 103.5° and the O = N-O bond angle is 109.9°. The mol. is planar at all levels of theory considered. Vibrational frequencies were computed for the sym. structure of N₂O₃ at the 6-31G*/MP2 level of theory. The calcd. vibrational frequencies are in better agreement with the alternate assignments than the preferred assignments reported previously. A new force field was derived for this mol. by starting with the theor. values and making small adjustments in such a way as to reproduce the exptl. obsd. vibrational frequencies. An attempt was made to det. the relative stability of the sym. and asym. forms of this mol. Results are also compared with recent d. functional calcns. on these mols.

calc. no cm,
Di, cmprk-
mupa;
ab initio

C. A. 1995, 123, N26

N₂O₃

Дм 38135

1995

Р 18 Б1142. Неэмпирическое исследование структуры, колебательных частот и силового поля симметричной формы N₂O₃. An ab initio study of the structure, vibrational frequencies and force field for the symmetric form of N₂O₃ / Vladimiroff T. // J. Mol. Struct. Theochem .— 1995 :— 342 .— С. 103—108 .— Англ.

Неэмпирическими методами ССП и МП2 с использованием базисов 6—31 ГФ* и 6—311 ГФ* исследована структура симметричной формы молекулы N₂O₃. Рассчитанные колебательные частоты (МП2/6—31 ГФ*) сопоставлены с результатами др. исследований. Полученное новое силовое поле находится в хорошем согласии с экспериментальными и др. теоретическими данными.

Н. С.

М. П.

Х, 1996, N 18

N_2O_3

1996

(Chetmp)

126: 38753f Visible spectrum of dinitrogen trioxide in aqueous solution. Doherty, Anne M. M.; Haine, Neil; Jones, Eleanor; Stedman, Geoffrey (Science Department, Worcester College of Higher Education, Worcester, UK WR2 6AJ). *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* 1996, (10), 2055-2058 (Eng), Royal Society of Chemistry. The visible absorption spectrum of N_2O_3 has been measured by stopped-flow mixing of solns. of $NaNO_2$ and HNO_3 . It has a max. at 630 nm, $\epsilon = 29.3 \text{ dm}^3\text{-mol}^{-1}\text{-cm}^{-1}$. The spectrum is similar to that reported for solns. of N_2O_3 in anhyd. org. solvents at low temps. Comparison with the blue species obsd. for solns. of $NaNO_2$ in moderately concd. $HClO_4$ and HNO_3 shows that although the spectra are very similar there must be an addnl. species present in these very acidic media, possibly $N_2O_3H^+$.

C.A. 1997, 126, N3

N_2O_3

1996

20Б1172. Полоса ν_1 N_2O_3 . The ν_1 band in N_2O_3
/ Georges R., Liévin J., Herman M., Perrin A. // Chem.
Phys. Lett.— 1996.— 256, № 6.— С. 675-678.— Англ.

21
Неэмпирическим расчетом в приближении МП2/6-
31ГФ* подтверждена интерпретация измеренной фунда-
ментальной полосы ν_1 в спектре поглощения N_2O_3 (с ис-
пользованием интерферометра с фурье-преобразованием и
техники охлажденной струи), как связанной с хромофором
 NO_2 . Н. С.

Х. 1997, № 20

N₂O₃

1996

125:180095r The ν_1 band in N₂O₃. Georges, R.; Lievin, J.; Herman, M.; Perrin, A. (Lab. Chimie Physique Moléculaire CPi 160/09, Univ. Libre Bruxelles, B-1050 Brussels, Belg.). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 256(6), 675-678 (Eng). The ν_1 fundamental band in N₂O₃ was recorded in absorption at high spectral resolu. with a Fourier Transform interferometer, under jet cooled exptl. conditions. The rotational structure, corresponding to 44 K rotational temp., could be analyzed, leading to a set of precise upper state parameters. The absence of b-type lines in the spectrum, expected to occur from the direction of the Q₁ normal coordinate with respect to the principal axes of inertia, is fully justified by ab initio calcns. performed at the MP2/6-31G* level, confirming the decisive role of the polarizing NO₂ chromophore in tilting the corresponding induced dipole moment towards the direction of the a axis. The calcns. also provide equil. geometry parameters.

(ν_1)

C.A. 1996, 125, N 14

N_2O_3

1996

124: 158857y Ab initio Study of the structure, vibrational frequencies and force field of the symmetric form of N_2O_3 . Vladimiroff, T. (Army Armament Res. Development Cent., Armament Eng. Directorate, Dover, NJ USA). Report 1995, (ARAED-TR-95008; Order No. AD-A-297096/0GAR), 16 pp. (Eng). Avail. NTIS. From Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1996, 96(2), Abstr. No. 02-00,383. The structure of sym. N_2O_3 was investigated using ab initio methods. Bond lengths and angles were detd. using the 6-31 G* and 6-311 G* basis sets using both SCF and MP2 theory. At the highest considered level of theory, the N-O bond was detd. as 1.492 Å, the N:O bond was 1.168 Å, the N-O-N angle was 103.5°, and the O:N-O bond angle was 109.9°. The mol. was detd. to be planar at all levels of theory considered. Vibrational frequencies were computed for the sym. structure of N_2O_3 at the 6-31 G*IMP2 level of theory. The calcd. vibrational frequencies are in better agreement with the alternate assignments than the preferred assignments of Nour et al. A new force field was derived for this mol. by starting with the theor. E values and making small adjustments in such a way as to reproduce the exptl. obsd. vibrational frequencies. An attempt was made to det. the relative stability of the sym. and asym. forms of this mol. Results are compared with d. functional calcns. on these mols.

смысл,
Di, сущ. ноем
ab initio
парам

C. A. 1996, 124, N12.

O₂-N₂O

1997

analyzed and interpreted.

128: 94708y Spectroscopy and structure of the open-shell complex O₂-N₂O. Qian, Hai-Bo; Seccombe, Dominic; Howard, Brian J. (Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, Oxford University, South Parks Road, Oxford, UK OX1 3QZ). *J. Chem. Phys.* 1997, 107(19), 7658-7666 (Eng), American Institute of Physics. The high-resoln. spectrum of O₂-N₂O, the 1st for a complex contg. >1 unpaired electron, was studied in the region of the ν_3 N₂O monomer vibrational band using a mol. beam diode laser absorption spectrometer. The spectrum was completely analyzed using a newly developed effective Hamiltonian. The rotational consts. are accurately detd. for both ground and excited vibrational states. The equil. structure of the complex is planar, with a sepn. between the centers of the mass of 2 monomers of 3.423 Å. The structural angles were exptl. detd. as: either $\theta_{O_2} = 58^\circ$ and $\theta_{N_2O} = 77^\circ$, or $\theta_{O_2} = 122^\circ$ and $\theta_{N_2O} = 100^\circ$. The large amplitude motion of the monomers leads to the complex having an effective out-of-plane root mean square angle of $\varphi = \varphi_1\varphi_2 = 23^\circ$. An interpretation of the structure of the complex is given in terms of an intermol. potential using a model described by Muentner.

check mp,
cmp - pr

C.A. 1998, 128, N8

Na3

1997

ab initio
papers
M.A.

/ 127:24053m Ab initio study on the structure and vibrational spectra of dinitrogen trioxide and its isomers. Wang, Xuefeng; Zheng, Qike; Fan, Kangnian (Laser Chemistry Institute, Fudan University, Shanghai, Peop. Rep. China). *J. Mol. Struct.* 1997, 403(3), 245-251 (Eng), Elsevier. Equil. geometries, dipole moments, harmonic vibrational frequencies, and IR intensities have been calcd. for a set of dinitrogen trioxide conformers by ab initio calcns. at the MP2 level with the 6-31G* and 6-311G* basis sets. The calcn. results satisfactorily reproduce the exptl. structural and vibrational spectral features of asym-N₂O₃ and sym-N₂O₃. Calcns. at the same levels indicate that the *trans-cis* N₂O₃ is also a stable conformer of N₂O₃, and previously obsd. matrix IR spectral features that were not properly assigned should be attributed to the *trans-cis* structure of dinitrogen trioxide. However, our results show that the other two estd. conformers, *Cs*-N₂O₃ and *cis-cis* N₂O₃, are considered to be transition states.

C.A. 1997, 127, N 2

1998

 N_2O_3 N_4O_6 N_8O_{12} ab initio
param

128: 326784a Ab Initio Study of Nitrogen-Oxygen Clusters: N_2O_3 , N_4O_6 , and N_8O_{12} . Evangelisti, Stefano (Dipartimento di Chimica Fisica e Inorganica, Universita di Bologna, 40136 Bologna, Italy). *J. Phys. Chem. A* 1998, 102(25), 4925-4929 (Eng), American Chemical Society. An ab initio study on three hypothetical nitrogen-oxygen clusters is presented. The investigated systems are N_2O_3 , N_4O_6 , and N_8O_{12} with highly sym. geometries, D_{3h} , T_d , and O_h symmetry, resp. Calcns. were performed at SCF and MP2 level (MP2, for the two smallest clusters only). Several basis sets were used, from 3s2p to 4s3p2d1f, depending on the cluster size. These structures were found to have local

V min., with energies very high above the products of a fragmentation reaction (N_2 and O_2). According to these calcns., NO clusters are potentially interesting as high-energy-d. materials.

C.A. 1998, 128, N26

N_2O_3 изомеры

1998

uk chem
to Ar

130: 116631p Isomers of N_2O_3 : Observation of trans-cis N_2O_3 in solid Ar. Lee, Cheng-I.; Lee, Yuan-Pern; Wang, Xuefeng; Qin, Qi-Zong (Department of Chemistry, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan 30043). *J. Chem. Phys.* 1998, 109(23), 10446-10455 (Eng), American Institute of Physics. Two isomers of N_2O_3 , asym.- N_2O_3 and sym.- N_2O_3 , are identified with IR (IR) absorption when mixts. of NO- NO_2 -Ar or NO- O_2 -Ar are deposited onto a target at 13 K Upon irradiation with a XeCl excimer laser at 308 nm, asym.- N_2O_3 is converted to sym.- N_2O_3 and a new form of N_2O_3 , trans-cis N_2O_3 ; the latter is readily converted to sym.- N_2O_3 upon further irradiation with red light. Assignments of IR absorption lines to each conformer in its isotopic variants are based on ^{18}O -isotopic substitution and photoconversion expts. For asym.- N_2O_3 , the authors observed ^{18}O -isotopic shifts of a few vibrational modes previously unresolved in a N_2 matrix, confirming that O-atoms

C.A. 1999, 130, N9

in the NO_2 moiety are inequivalent. For sym- N_2O_3 , a more nearly complete set of isotopic shifts for absorption lines at 1688.6, 971.0, and 704.6 cm^{-1} enables one to provide refined assignments. Lines at 1722.5 and 1721.1 cm^{-1} are assigned to sym. stretching modes of 2 terminal N:O groups of $^{18}\text{ON}^{16}\text{ON}^{16}\text{O}$ and $^{18}\text{ON}^{18}\text{ON}^{16}\text{O}$; they gain IR activity because C_{2v} symmetry is broken. Trans-cis N_2O_3 with an asym. ON-ONO structure is identified with absorption lines at 1704.5, 1665.7, 877.8, and 243.0 cm^{-1} . Isotopic expts. indicate that this species contains 2 nearly isolated N:O groups. Spectral assignments are supported by theor. calcs. with d.-functional theories (BLYP and B3LYP); previous assignments of low-energy vibrational modes of asym.- N_2O_3 and sym- N_2O_3 are revised based on comparison with calcs. Photoconversion among these isomers is discussed.

$(N_2O)_3^+$ pm. 3945 } 1998

Sergey A. Nizkorodov,
et al.,

Chem. Phys. 1998, 239,

369-378.

Photofragment ● ation dynamics

of the $(\text{N}_2\text{D}_2)^+$ and $(\text{N}_2\text{D})_3^+$

cis, trans

N₂O₃

1998

✓ 128: 314418w A new conformer of dinitrogen trioxide in low temperature matrix: trans-cis N₂O₃. Wang, Xuefeng; Qin, Qi-Zong (Laser Chemistry Institute, Fudan University, Shanghai, Peop. Rep. China 200433). *Spectrochim. Acta, Part A* 1998, 54A(4), 575-580 (Eng). Elsevier Science B.V.. Matrix isolated FTIR spectroscopy has been applied to investigate the N₂O₃ conformers in a low-temp. matrix. The irradiation of an argon matrix containing NO and NO₂ with a pulsed laser at 355 nm causes the enhancement of a new set of vibrational bands, which results from the conversion of asym-N₂O₃ to a new conformer, trans-cis N₂O₃. The observed vibrational frequencies and relative intensities of the conformer are in good agreement with d. functional theory (DFT) calculations at BLYP/6-31G* level. Upon annealing, the thermally induced conversion of the trans-cis N₂O₃ into sym-N₂O₃ takes place. Properties of trans-cis N₂O₃ conformer are determined for the first time.

check

C.A. 1998, 128, N25

94.408228

2000

F: N2O3-

P: 3

133:22679

A theoretical investigation of the
N2O3- anion isomers. Chen, M.; Zhou, M.; Qin, Q.

Laser Chemistry Institute, Fudan University
Shanghai, Peop. Rep. China Chem. Phys.

Lett., 321(5,6), 498-503 (English) 2000 The
structures, binding energies and vibrational
frequencies of various N2O3- structural isomers
have been detd. using the B3LYP and MP2 methods.
NO2--NO complexes with different coordinations and
one N2O-O2- complex ar to be min. on the potential
energy surface. The three NO2--NO complexes N2O-
O2- complex are predicted to be stable with respect
to NO2- + NO and O2-, resp.



C.A. 2000, 133

N_2O_3^-

Em. 40228

2000

133: 22679v A theoretical investigation of the N_2O_3^- anion isomers. Chen, M.; Zhou, M.; Qin, Q. (Laser Chemistry Institute, Fudan University, Shanghai, Peop. Rep. China). *Chem. Phys. Lett.* 2000, 321(5,6), 498-503 (Eng), Elsevier Science B.V. The structures, binding energies and vibrational frequencies of various N_2O_3^- structural isomers have been detd. using the B3LYP and MP2 methods. Three NO_2^- -NO complexes with different coordinations and one $\text{N}_2\text{O}-\text{O}_2^-$ complex are found to be min. on the potential energy surface. The three NO_2^- -NO complexes and the $\text{N}_2\text{O}-\text{O}_2^-$ complex are predicted to be stable with respect to $\text{NO}_2^- + \text{NO}$ and $\text{N}_2\text{O} + \text{O}_2^-$, resp.

структура,
Pi, энергия
связи, меомен-
тацион

C.A. 2000, 133, N2