

N - Br

Cond. noct. (NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3 , ND_3 , 1969
 PD_3 , AsD_3 , SbD_3 , NHF_2 , NDF_2 , NF_3 , PF_3 ,
 AsF_3 , SbF_3 , NCl_3 , PCl_3 , AsCl_3 , SbCl_3 , NBr_3 ,
 PBr_3 , AsBr_3 , SbBr_3 , NI_3 , PI_3 , AsI_3 , SbI_3)

King Shin-Tung, Overend J.,
J. Phys. Chem., 1969, 73, N2,
406-12

NB13

num 4468

1975

NB14

Kulkarni K.S., et al.

Indian J Pure and
Appl. Phys, 1975, 13,
N11, 780-2.

(parent
in chg)

(all CF₃) I

NB23

* 65-13546

1976

NB15

Murcell J. N., et al.

J. Chem. Soc. Dalton
Trans., 1976, N9, 818-22.

(Do. J,
cylinder)

(CU PF3)

QTT. 6486

1978

BrN_3

Dehnick K., et al

(P=P; 6 cells)

Z. Naturforsch., B:

Angew. Chem., Org.
Chem. 1978, 33B(7),
750-2

(Vi, cpykt.)



(Cell. ClN_3 ; III)

NBr₂

1978

Mohan S., Manickavasagam R.

Indian J. Pure and Appl. Phys.,
1978, 16, n1, 55-57.

смер. пост.
цетилроб.
искансн.



(смер. CF₂) III

Br N₃

Оммука 9323

1980

Frost D.C., et al

Chem. Phys., 1980, 47, N1,
111-124.

фотол.
спектр



см ClN₃ ; 111

NBr₃

1980

Ладенков Б. Т.

Докл. АН СССР 1980
254, N4, 934-8

вращающейся
координатной и
потенциальной
поверхности

см. NF₃ - III

NBz_2

1982

Kohlmeier Ch. K.,
et al.

ИК-спектр
в
магнетице.

Inorg. Chem. 1982,
21 (4), 1519-1522.

●
(ссыл. NCl_2 ; III)

NBr₂

1982

Kohlmler C. K.,
Andrews L.,

Ni, no. 1111, Inorg. Chem., 1982,
структура 21, N 4, 1519-1522.

(св. NCl₂; III)

BrN_2

22 Б1486. Фотодиссоциация азиды брома. Photo-dissociation of bromine azide. Coombe R. D. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, № 1, 254—264 (англ.)

1983

фотодиссо-
циация

Методами оптич. спектроскопии испускания и поглощения изучен фотолиз BrN_2 (I) (давл. 1—3 Торр). в присутствии N_2 (общее давл. 6 Торр) под действием света 222 нм импульсного лазера на KrCl (энергия импульса $E \leq 6$ мДж/см²) и 308 нм импульсного лазера на XeCl ($E \leq 40,0$ мДж/см²). Поглощение I в УФ-области обнаруживается при $\lambda \leq 360$ нм: полосы с максимумом при 287 и 216 нм. Фотолиз I светом 222 нм сопровождается люминесценцией (Лм) в видимой области, обусловленной переходом $\text{N}_2(B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+)$ с участием колебательных уровней $v' \leq 6$, и наблюдением последовательностей с $\Delta v = 3, 2, 1$. Образование $\text{NBr}(b'\Sigma^+)$ не обнаружено. С ростом E интенсивность Лм N_2 линейно возрастает. Временная зависимость интенсивности Лм N_2 характеризуется начальным большим пиком длительностью ≈ 5 мкс и последующим экспоненциальным спадом за время ~ 100 мкс. Из зависимостей Штерна—Фольмера найдено, что образование $\text{N}_2(B^3\Pi_g)$ обусловлено р-цией псевдопервого

X. 1983, 19, N22

порядка с константой скорости $(1,2 \pm 0,2) \cdot 10^{-12}$ см³/молекула·с. Добавка NO приводит к интенсивной Лм NO($A^2\Sigma^+$), обусловленной переносом на NO энергии от N₂($A^3\Sigma_u^+$). Временная зависимость Лм NO($A^2\Sigma^+$) указывает на образование N₂($A^3\Sigma_u^+$) в перв. процессе фотолиза. Фотолиз I обнаруживает Лм и в УФ-области. Полоса Лм при 336 нм отнесена к переходу NH($A^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma^-$), образуемого при столкновении N₂($A^3\Sigma_u^+$) и HN₃. Полоса Лм при 292 нм обусловлена переходом D'($^3\Pi_{2g}$) $\rightarrow$ A'($^3\Pi_{2u}$) Br₂. Фотолиз I светом 308 нм характеризуется теми же спектрами Лм, что и при фотолизе светом 222 нм, но с пониженными в неск. раз интенсивностями. Считается, что механизм фотолиза I светом 222 и 308 нм включает р-ции: I ($^1A'$) + $h\nu \rightarrow$ N₂($^3\Sigma_u^+$) + NBr($X^3\Sigma^-$), $\rightarrow$ Br($4^2P_{3/2}$) + N₃($X^2\Pi_g$), Br + Br-N₃ $\rightarrow$ Br₂ + N₃, N₂($A^3\Sigma_u^+$) + Br₂ $\rightarrow$ N₂($X^1\Sigma_g^+$) + Br₂(D' $^3\Pi_{2g}$).
 Ю. И. Дорофеев

25
 прог

$F + BrN_3$

Om. 18 328

1983

Coombe R.D., Laim C.H.-T.

Химический
реакция

J. Chem. Phys., 1983,
79, N 8, 3746-48.

$\text{Cl} + \text{BrN}_3$

Om. 18328

1983

Coombe R.D., Lam C.H.-T.,

хлорном.
реакция

J. Chem. Phys., 1983,
79, N8, 3746-48.

$\text{NH}_3 \cdot \text{HBr}$

DM. 19860

1984

Breiz A., Karpfen A.,
et al.,

ab initio
pacrem

Chem. Phys., 1984,
89, N3, 337-343.

NBr3

сеп. 20331

1984

Grodzicki M., Walther

H., et al.

Z. Naturforsch.,

1984, B39, N 10,

● 1319-1330.

Алектр.

септукт.

М, рачет

и экстрем.

NBr₃

1984

Grodzicki M., Walther H.,
Elbel Susanne.

Ротозлектр.
спектры,
структ.;
у, динолм.
момент.

Z. Naturforsch., 1984,
B39, N10, 1319-1330.

● (см. NH₃; III)

NBr₃

om. 18842

1984

Xin M., Chow Chien L.,
et al.

photochem. J. Electron Spectrosc.
chem. and Relat. Phenom.,
paper. 1984, 33, N2, 93-105.

$\text{NH}_3 \dots \text{HBr}$

Дм. 21588 1985

8 Д163. Неэмпирическое исследование комплексов с водородной связью $\text{NH}_3 \dots \text{HBr}$, $\text{PH}_3 \dots \text{HBr}$, $\text{AsH}_3 \dots \text{HF}$, $\text{AsH}_3 \dots \text{HCl}$ и $\text{AsH}_3 \dots \text{HBr}$. Ab initio study of the hydrogen-bonded complexes $\text{NH}_3 \dots \text{HBr}$, $\text{PH}_3 \dots \text{HBr}$, $\text{AsH}_3 \dots \text{HF}$, $\text{AsH}_3 \dots \text{HCl}$ and $\text{AsH}_3 \dots \text{HBr}$. Hinchliffe Alan. «J. Mol. Struct.», 1985, 121, Suppl.: «Theochem.», 22, 201—205 (англ.)

Строение комплексов $\text{XH}_3 \dots \text{HY}$ ($\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}$, $\text{Y}=\text{Br}, \text{F}, \text{Cl}$) исследовано неэмпирич. методом ССП с использованием сгруппированных гауссовых базисов Данинга и Вейяра, расширенных d -орбиталями атомов X и Y . В предположении жесткости фрагментов XH_3 определены равновесные геометрич. параметры, энергии диссоциации и купмансовские потенциалы ионизации комплексов. В случае $\text{X}=\text{P}$, $\text{Y}=\text{Br}$ проведено сравнение результатов с данными микроволн. спектроскопии; теоретич. значение равновесного расстояния $\text{P}-\text{Br}$

геометрия,
структура

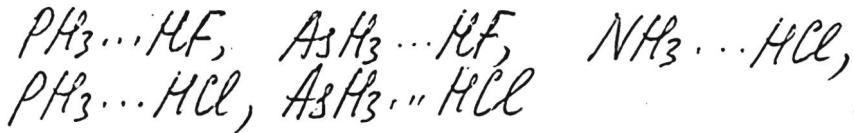
(+8) X

ср. 1985, 18, №8

$\text{PH}_3 \dots \text{HBr}$
 $\text{AsH}_3 \dots \text{HBr}$, $\text{NH}_3 \dots \text{HF}$,

оказалось завышенным на 10%. Проанализированы маллиkenовские заселенности орбиталей и атомов; показано, что межмолекулярный перенос заряда при образовании комплексов незначителен. Найдены дипольные и квадрупольные моменты зарядовых распределений комплексов и свободных мономеров.

А. В. Зайцевский



NBr_3

1986

El-Issa Basheer D.,
Zarati Huda M.

paper

J. Chem. Soc. Faraday

ser. n.

Trans., 1986, Pt 2,
N1, 93-99.

(see PF_3 ; iii)

NB₂³

1988

Clotet A., Rubio J.,
et al.

J. Mol. Struct. Theo-
chem., 1988, 164, N3-4,
351-361.

(see. NH₃; III)

u. n.

BrN_3^+

[om. 30490]

1988

Jacox M.E.,

Ti, Vi;

J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N2, 397.

$\text{Br}_2\text{N}-\text{NBr}_2$

am. 34175

1990

Stølevik R., Bakken P.,

J. Mol. Struct. 1990,
220, 269-277.

измерен.,

числ.

номера.

Conformational structures and energies, rotational barrier heights and

torsional oscillations in tetra-
halodiphosphines, tetrahalohy-
drazines and X_2N-PX_2 mole-
cules.

$\text{NaD}-\text{HBr}$ (DM 34656) 1990

Zeng X.P., Sharpe S.W.,
et al.

~~Ukenermp~~ J. Chem. Phys. 1990, 93,
N1, 183-196.

Infrared absorption spec-
troscopy of gas-phase

N_2O-MX ($X = F, Cl, Br$)

Weakly bonded complexes
utilizing the N_2O ν_3
chromophore.

N₃Br

OM 36685

1992

Оtto M., Lotz S.D. et al.,
компьютер,
ab initio Inorg. Chem. 1992, 31,
paper 3647-3655.

Quantum Mechanical ab Initio
studies of the structures
and stabilities of Halogen Azides

XN_3 ($X = F, Cl, Br, I$)

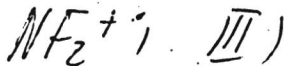


Gobbi A., Frenking G., 1993

численные
символы.
и
матрицы
составляющих,
теоретический
расчет

Bull. Chem. Soc. Jpn.,
1993, 66 (11), 3153-85

(см.



NBr_3

1993

Singh Prem,
Dublisk A. K.

u.n.

Indian J. Pure and
Appl. Phys. 1993. 31, N3.
C. 193 - 194.

( cur: BF_3 ; III)

NBz₃

1994

Muhammad Hasar.

8th Int. Congr. Quantum
Chem., Prague, June 19-23,
1994; Book Abstrs [Pra-
gue] 1994.C. 235.

M.N.

(cer.  NF₃; III)

NBr_3

1994

Novak Igor.

Heteroat. Chem. 1994,

5(2), 145-8.

сод.
встречн.
и св-ва,
теор.
расчет

(сод.  $NH_2 Br$; III)

$H_2N...BrCl$

1995

фрагм.
чекмп,
компьютер-
ная анимация

122: 250770w Charge-transfer complexes of ammonia with halogens. Nature of the binding in $H_2N...BrCl$ from its rotational spectrum. Bloemink, Hannelore I.; Legon, A. C.; Thorn, Joanna C. (Dep. Chem., Univ. Exeter, Exeter, UK EX4 4QD). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1995, 91(5), 781-7 (Eng). The ground-state rotational spectra of the 4 isotopomers $H_3^{15}N...^{79}Br^{35}Cl$, $H_3^{15}N...^{18}Br^{35}Cl$, $H_3^{15}N...^{79}Br^{37}Cl$ and $H_3^{15}N...^{81}Br^{37}Cl$ of a complex formed by NH_3 and Br monochloride were obsd. by pulsed-nozzle, FT microwave spectroscopy. A fast-mixing nozzle was used to prevent a chem. reaction between the components and allow the encounter complex to

be isolated. The nature of the spectra establishes that the obsd. isotopomers are sym.-top mols. Assignment and anal. of the spectrum in each case led to the rotational const. B_0 , the centrifugal distortion consts. D_J and D_{JK} , the halogen nuclear quadrupole coupling consts. $\chi(Br)$ and $\chi(Cl)$, and the component $M_{bb}(Br)$ of the Br spin-rotation coupling tensor. The rotational consis. allowed an r_0 -type value of the distance $N...Br$ of 2.627 Å to be established. An r_s -type method led to the distances $r(N...Br) = 2.59(1)$ Å and $r(Br-Cl) = 2.186$ Å, the former requiring a value of B_0 for $H_3^{14}N...^{79}Br^{35}Cl$ obtained from unperturbed transition centers estd.

C. A. 1995, 122, N 20

without a full hyperfine structure anal. A consideration of the intermol. stretching force const. k_s , detd. from D_J , provides evidence of a relatively strong interaction between the subunits. However, an anal. of the $\chi(X)$ ($X = \text{Br}, \text{Cl}$) values reveals that the mol. interaction is mainly electrostatic in origin, with probably only a small extent of intermol. elec. charge redistribution on complex formation.

1995

F: BrN3

P: 3

5Б1215. Экспериментальное и теоретическое исследование колебательных спектров ковалентных азидов $X-N[3]$ ($X=H, F, Cl, Br, I$). Расчеты методом функционала плотности в сопоставлении с другими неэмпирическими приближениями. Experimental and theoretical vibrational studies of covalent $X-N[3]$ azides ($X=H, F, Cl, Br, I$). Application of the density functional theory and comparison with ab initio results / Schulz Axel, Tornieporth-Oetting Inis C., Klapotke Thomas M. // Inorg. Chem. - 1995. - 34, N 17. - С. 4343-4346. - Англ.

Получены ИК- и КР-спектры $XN[3]$ ($X=F, Cl, Br, I$) в газ. фазе. Интерпретация спектров этих соединений и $HN[3]$ уточнена с помощью расчетов частот и форм колебаний методами функционала плотности и других неэмпирич. приближений. Отмечено, что на коррелированном уровне теории функционала плотности с функционалом B-LYP частоты передаются вполне удовлетворительно без обычного масштабирования.

P. X. X. NS, 1996

$\text{NH}_3 - \text{HCl}$

1998

Legon A.C.,

ссыл. по сс.м.
теорет.
расчет

Chem. Commun (Cambridge)
1998, (23), 2585-86

(ссыл. CO -  Fa; III)