

N - Br - O

~~H H = Br~~

NO_3F (ν_i , ν_o , ν_{sym}) 1967
 NO_3Cl , NO_3Br , NO_3I ν_i , ν_o , ν_{sym} , ν_{asym} XIII 1696

Miller R.H., Bernitt D.L., Hisatsune I.C.,
Spectrochim. Acta, 1967, 23A (2), 223-36.
Infrared spectra of isotopic halogen
hydrides.

10

① 648 CA, 1967, 66, 704712
48 3 2 1 2 3 4

NO_2Br

1971

7 Б308. ИК-спектроскопическое доказательство существования нитрилбромида (NO_2Br). Zerssen H. D. von, Martin H. Infrarotspektroskopischer Nachweis der Existenz des Nitrylbromids (NO_2Br). «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1971, 75, № 10, 1139 (нем.)

Методом ИК-спектроскопии исследованы смеси NO_2/Br_2 и NO , Cl/Br , замороженные на подложках из CsBr . Сравнение со спектрами NO_2F и NO , Cl в матрице Br_2 интенсивностей полос и изотопич. сдвигов показывает на присутствие в матрице молекул $^{14}\text{NO}_2\text{Br}$ и $^{15}\text{NO}_2\text{Br}$.

Ю. М. Рубчинск

спектр
в
матрице

X. 1972. 7

XIII-5585 1979

NO₂BrNO₂I

9. 31513w On the formation of nitryl bromide and nitryl iodide and the infrared spectra of the matrix-isolated molecules. F. Mann, R. Minkwitz, R.; Engelhardt, U. (Inst. inorg. Chem. Freie Univ. Berlin, Berlin, Fed. Rep. Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1979, 77(3), 429-39 (Eng.). Mixts. of Br₂ or I₂ and Ar were passed through a microwave discharge. The resulting gas mixts. condensed on a cold window at 9 K together with NO₂ and a large excess of Ar as an inert matrix material. Six new absorptions were found in the IR spectra in both cases. They can be assigned to NO₂Br or NO₂I, resp., according to a C_{2v} point symmetry of the planar mols. Frequencies, ¹⁵N-isotopic shifts, and calcd. force consts. are in good agreement with expected values extrapolated from the known NO₂ and NO₂Ci parameters.

Vi; can. not.

⑦ A

C.A. 1979, 21, 176

Br NO₂

I NO₂

2-я сессия, 1980 г.

⊗ (+1)

2-я сессия, 1980 г.

XIII- 5585

1579

1 Б191. Образование нитрилбромидов и нитрилйодидов и инфракрасные спектры изолированных в матрице молекул. Federhahn M., Minkwitz R., Engelhard U. On the formation of nitril bromide and nitril iodide and the infrared spectra of the matrix isolated molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 3, 429—439 (англ.)

Измерены ИК-спектры (4000—95 см⁻¹) продуктов реакции атомов брома и йода с молекулами двуокиси азота в матрице из Ar при одновременной конденсации на охлаждаемую до 9 К подложку. Атомы Br и I получали с высоким выходом при пропускании смесей Br₂/Ar и I₂/Ar через МВ-разряд (2450 МГц). В каждом случае в спектре наблюдали 6 новых полос поглощения, не присутствующих в спектрах, полученных после конденсации NO₂ и возбужденных МВ-разрядом атомов Ar. Отнесение полос проводили на основании сравнения с частотами колебаний и интенсивностями для

FNO_2 и ClNO_2 в предположении о плоской структуре молекул с симметрией C_{2v} . Полосы 1289, 588, 496, 1723, 360, 641 см^{-1} для BrNO_2 и 1279, 569, 468, 1700, 305, 605 см^{-1} для JNO_2 отнесены к колебаниям ν_1 — ν_6 этих молекул соотв. Рассчитаны силовые постоянные в приближении обобщенного валентно-силового поля для BrNO_2 : $f(\text{NO})=9,51$, $f(\text{N—Br})=1,91$, $f(\text{ONBr})=0,67$, $f(\text{ONO})=1,91$, $f_v=0,39$ мдин/А и для JNO_2 : $f(\text{NO})=9,49$, $f(\text{N—J})=1,87$, $f(\text{ONJ})=0,56$, $f(\text{ONO})=1,87$, $f_v=0,39$ мдин/А. Частоты, рассчитанные для изотопозамещенных по ^{15}N молекул, очень хорошо согласуются с полученными эксперим. частотами. С. Б. Осин

NO_2Br

NO_2I

и.к. спектры,

и

геометрия.

(+1) $\boxtimes$

Ф. 1980. № 2

XIII - 5585

1979

2 Д420. Об образовании нитрилбромидов и нитрилйодида. ИК-спектры, полученные методом матричной изоляции. On the formation of nitril bromide and nitril iodide and the infrared spectra of the matrix isolated molecules. Feuerhahn M., Minkwitz R., Engelhardt U. «J. Mol. Spectrosc.», 1979, 77, № 3, 429—439 (англ.)

Получены ИК-спектры газовой смеси йода или брома с аргоном, пропущенной через микроволн. разряд и замороженной с добавлением двуокиси азота при 9° К. В спектрах (как в случае брома, так и в случае йода) обнаружены 6 полос, которые могут быть приписаны образовавшимся молекулам NO_2X ($\text{X}=\text{Br}, \text{I}$). Ранее попытка синтеза этих соединений не приводила к успеху. Предположено, что, как и молекулы нитрилхлорида и нитрилфторида, молекулы NO_2Br и NO_2I плоские с симметрией C_{2v} . На основании такой модели произведено отнесение полос в спектрах и произведен расчет норм. колебаний. Библ. 20.

И. С. И.

BrNO_2

omruca 8555

1979

Tevault D. E.

J. Phys. chem., 1979, 83 (17)

2217-21.

Matrix reactions of bromine
atoms and NO_2 molecules.

BrN-O-Br₂

1982

/ 97: 153249r Matrix-isolation infrared spectra of hydrogen halide and halogen complexes with nitrosyl halides. Lucas, Donald; Allamandola, Louis J.; Pimentel, George C. (Dep. Chem., Univ. California, Berkeley, CA 94720 USA). *Croat. Chem. Acta* 1982, 55(1-2), 121-8 (Eng). Matrix-isolation IR spectra of nitrosyl halide (XNO) complexes with HX and X₂ (X = Cl, Br) are presented. The relative frequency shifts of the HX mode are modest (ClNO·H-Cl, $\Delta\nu/\nu = -0.045$; BrNO·H-Br, $\Delta\nu/\nu = -0.026$), indicating weak H bonds 1-3 kcal/mol. These shifts are accompanied by significant shifts to higher frequencies in the XN-O stretching mode (ClN-O·HCl, $\Delta\nu/\nu = +0.016$; BrN-O·HBr, $\Delta\nu/\nu = +0.011$). Similar shifts were obsd. for the XN-O·X₂ complexes (ClN-O·Cl₂, $\Delta\nu/\nu = +0.009$; BrN-O·Br₂, $\Delta\nu/\nu = +0.013$). In all 4 complexes, the X-NO stretching mode relative shift is opposite in sign and about 1.6 times that of the NO stretching mode. These 4 complexes are considered to be similar in structure and charge distribution. The XN-O frequency shift suggested that complex formation is accompanied by charge

lek, cnekip
6
mampuse

C.A. 1982, 97, N18 (H) $\square$ ClN-O-Cl₂

withdrawal from the NO bond, ranging from ~ 0.04 to 0.07 electron charges. The HX and X_2 mols. act as electron acceptors, drawing electrons out of the antibonding orbital of NO and strengthening the XN-O bond. The implications of the pattern of vibrational shifts concerning the structure of the complexes are discussed.

Br_2NO

1983

Barone V., Lelj F., et al.

meopem.
paczem. Chem. Phys. 1983,
76 (3), 385-396.

($\bullet$ H_2NO ; III)

NBrO₂

[om. 20295]

1983

Mohan S., Ravikumar
K.G.

расчет
симв.
полей,
и.п.

Proc. Indian natn. Sci.
Acad., 1983, A49, N2,
● 256 - 261.

NOBr_3

1983

Moser Mark D., Weitz
Eric., et al.

photo-
lyz.

J. Chem. Phys., 1983,
78, N2, 757-766.

(see NOCl_3 ; III)

NBr_3O

1984

Chopra J.R., Pandey A.N.

Indian J. Phys., 1984,

Chem.
News.,

B58, N4-5, 376-383.

Vi;

(Chem. NF_3O ; III)

BrNO_3

1987

† 21 Б1246. Нитраты брома. Bromine nitrates. Wilson W. W., Christie K. O. «Inorg. Chem.», 1987, 26, № 10, 1573—1580 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения (обл. 200—4000 cm^{-1}) BrONO_2 (I), образующегося при р-ции BrF_3 с избытком LiNO_3 ($T \sim 0^\circ \text{C}$), в газ. и тв. состоянии и в матрицах тв. N_2 и Ne , а также КР-спектр (λ 647,1 нм) тв. I. Анализ спектров указывает на то, что I имеет плоское строение с симметрией C_s . Проведен теоретико-групповой анализ колебат. спектров I, и произведено отнесение линий в спектрах к различным типам колебаний. Отмечено понижение частот колебаний NO_2 -группы при переходе из газ. в тв. состояние из-за образования агрегатов. Показано, что при взаимодействии N_2O_3 с I образуется неустойчивый аддукт $\text{NO}_2^+[\text{Br}(\text{ONO}_2)_2]^-$ (II) с симметрией C_2 . Произведено сравнение колебат. спектров II и $\text{Cs}^+[\text{Br}(\text{ONO}_2)_2]^-$ и уточнена их интерпретация.

А. В. Бобров

М.П.

X. 1987, 19, № 21

BrNO_2

1989

23 Б1369. Синтез и идентификация методом инфракрасной спектроскопии бромистого нитрила BrNO_2 . Synthesis and identification by infrared spectroscopy of gaseous nitryl bromide, BrNO_2 / Finlayson-Pitts B. J., Livingston F. E., Berko H.: N. // J. Phys. Chem., 1989.— 93, № 11.— С. 4397—4400.— Англ.

Методом ИК-фурье спектроскопии изучены продукты р-ции при 298 К смеси газов N_2O_5 и He с тв. NaBr или газ. BrNO . В обоих случаях в спектре появляются полосы 787, 1292 и 1660 см^{-1} , отнесенные с учетом лит. данных по спектрам в низкот-рных матрицах к молекуле бромистого нитрила BrNO_2 . Б. В. Локшин

X. 1989, N 23

BrONO_2

1992

Casper Bernd., Lambotte Peter,
Minkwitz R.; et al.,

аннотация J. Phys. Chem., 1993, 97,
N39, C. 9992 - 9995

(all. ClONO_2 ; III)

BrONO₂

(om. 37371)

1993

См. также,
в. групп.

Casper B., Lamotte P.,
et al.,

J. Phys. Chem., 1993,
97, N 39, 9992-9995

1996

От 38802

F: BrNO₂

P: 3

10Б138. Исследование BrNO[2], цис-BrONO и транс-BrONO [неэмпирическим методом связанных кластеров]. Приложение к атмосферной химии. Characterization of BrNO[2], cis-BrONO, and trans-BrONO. Implications for atmospheric chemistry / Lee Timothy J. // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 51. - С. 19847-19852. - Англ.

Место хранения ГПНТБ

РМХ 1997

1996

F: BrONO₂

P: 3

14Б1193. Исследование электронной структуры нитрата брома. BrONO[2] методом фотоэлектронной HeI-спектроскопии. He I photoelectron spectroscopy study on the electronic structure of bromine nitrate, BrONO[2] / Dianxun Wang, Peng Jiang [Journal of Physical chemistry] // J. Phys. Chem. - 1996. - 100, N 11. - С. 4382-4384. - Англ.

Место хранения ГПНТБ Измерен фотоэлектронный спектр газообразного нитрата брома. Интерпретация спектра выполнена на основании анализа контуров полос, колебательной структуры спектра и результатов неэмпирических расчетов.

РМХ 1997

BrONO_2

(DM-39198)

1998

crump, Masahiro Ehara, Yuxi
y, Ohtsuka et al.

particulate. Chem. Phys. 1998, 226,
cmp-pa 113-123

Ionization

spectra of
 XONO_2 ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \bullet, \text{Br}, \text{I}$) studied by

the SAC-CI method.

Br NO

Dm. 39486

1998

Luca Bizzocchi, Claudio
Degli Esposti et al.,

M.N.

Chem. Phys. Lett. 1998,
293, N 5-6, 441-449.

$^{79}\text{BrNO}_2$

[Am. 40292]

2000

$^{81}\text{BrNO}_2$

Orphal J.,

V₁

J. Mol. Spectr., 2000,
577-578, 181-186