

NSC

NSCl

1967

спектр

м. н. ;

Т. ф. ;

Сил. носий.

6 Б165. Инфракрасный спектр, структура, силовые постоянные, средние амплитуды колебаний, термодинамические функции и молекулярная поляризуемость NSCl.

Muller A., Nagarajan G., Glemser O., Cuyvin S. F., Wegener J. Infra-red spectrum, structure, force constants, mean amplitudes of vibration, thermodynamic functions and molecular polarizability of NSCl. «Spectrochim. acta», 1967, A23, № 10, 2683—2689 (англ.)

Газообразный NSCl был приготовлен нагревателем $N_3S_3Cl_3$ при $t_{ре} 110^\circ$ в высоком вакууме. Получен ИК-спектр NSCl в области $300—4000\text{ см}^{-1}$. В спектре обнаружены также полосы примесей HNSO и SO_2 , возникшие, вероятно, вследствие взаимодействия NSCl с парами воды. Из ИК-спектра NSCl определены фунда-

Х. 1968. 6

17

ментальные частоты: $\nu_1 = 1325$ (вал. кол. NS), $\nu_2 = 414$ (вал. кол. SCI), а частота $\nu_3 = 273 \text{ см}^{-1}$, соответствующая деф. колебанию, рассчитана из обертонов и составных тонов. Молекула NSCl имеет структуру NSCl с симметрией C_s , а не SNCl. Вычислены значения силовых постоянных и средних амплитуд колебаний: $f_{NS} = 10,03 \text{ мдин/А}$, $U_{NS} = \sigma_{NS}^{1/2} = 0,0392 \text{ А}$; $f_{SCI} = 1,67 \text{ мдин/А}$, $U_{SCI} = \sigma_{SCI}^{1/2} = 0,0539 \text{ А}$; $f_\alpha = 0,22 \text{ мдин/А}$, $U_{NSCl} = \sigma_{NSCl}^{1/2} = 0,0847 \text{ А}$. Проведена оценка структурных параметров NSCl: $\nu_{NS} = 1,45 \text{ А}$; $\nu_{SCI} = 2,00 \text{ А}$, $\angle NSCl = 116$. На основании полученных значений молекулярных постоянных проведен статистический расчет термодинамич. функций молекулы NSCl в газовой фазе в широком интервале т-р ($200 - 2000^\circ \text{ К}$) при давлении 1 атм в приближении жесткий ротатор—гармонический осциллятор. Значения термодинамических функций при стандартных условиях ($T = 298,16^\circ \text{ К}$) следующие: $(H_0 - H_0^0)/T = 9,546$, $-(F_0 - H_0^0)/T = 54,112$, $S^0 = 63,658$, $C_p^0 = 11,243$ (все значения даны в $\text{кал/град} \cdot \text{моль}$). Рассчитана молекулярная поляризуемость NSCl как сумма всех параллельных и перпендикулярных компонент поляризуемости связей NSCl: $\alpha_M = 62,04 \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$.

Н. Кузьменко

NSCl

1967

7754m Infrared spectrum, structure, force constants, mean amplitudes of vibration, thermodynamic functions, and molecular polarizability of thionitrosyl chloride. A. Mueller, G. Nagarajan, O. Glemser, S. F. Cyvin, and J. Wegener (Univ. Goettingen, Ger.). *Spectrochim. Acta, Part A* 23(10), 2683-9(1967)(Eng). The ir spectrum of NSCl was studied from 300 to 4000 cm^{-1} . The two fundamentals ν_1 and ν_2 were directly observed and the third one ν_3 was calcd. from the overtone and combination bands. It was confirmed that NSCl has the structure NSCl with C_s -symmetry and not SNCl. Force consts., mean amplitudes of vibration, molar thermodynamic functions, and mol. polarizability were computed and the results briefly discussed. 22 references. RCSQ

+ (KMM)

C.A. 1968. 68. 2

NSP, NSe, ONF, ONCe, ONBr 1. 1969
(ans. noes.) 13 XIII 498

Peacock C. J. Heidborn U. Müller A.
J. Mol. Spectrosc., 1969, 30(2), 338-44.

Properties of the eigenvector
matrix in the theory of g
molecular

~~Equations~~
ЕСТЬ Ф. Н.
С. Н.

10

⊕

1969, 10, 522, 597218

NSCl

Вар-840-ХIII

1970

6 Д441. Микроволновый спектр, структура, постоянные квадрупольного взаимодействия и силовые постоянные NSCl. Берри Tatsuho, Hirota Eizi, Morino Yonezo. Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling constant, and force constants of NSCl. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 36, № 3, 386—397 (англ.)

Исследован микроволн. спектр молекулы NSCl (I). Образец I, полученный при нагревании $N_3S_3Cl_3$ при $70^\circ C$ в высоком вакууме, нагнетался в волноводную ячейку непрерывно, вследствие быстрого распада I. Получены вращательные постоянные для 4 изотопич. образцов I в основном колебательном состоянии. Найдены парамет-

мол. стр.

vi

м. н.

мн. н.

ар. 1971. 6 Д

ры вращательной структуры: $r(\text{NS}) = 1,450$; $r(\text{SCl}) = 2,161$ Å; угол $\text{NSCl} = 117^\circ 42'$. Определены постоянные квадрупольного взаимодействия для ядер Cl. В спектре обнаружены и отождествлены несколько последовательностей колебательных сателлитов для ν_2 -, ν_3 -, $2\nu_2$ - и $2\nu_3$ -состояний. Найденные силовые постоянные находятся в хорошем соответствии с расчетами Мюлера (РЖФиз, 1968, 4Д279). Г. П.

[47749u] Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling
 constant, and force constants of NSCl. Beppu, Tatsuro;
 Hirota, Eizi; Morino, Yonezo (Fac. Sci., Univ. Tokyo, Tokyo,
 Japan). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 36(3), 386-97 (Eng). Micro-
 wave spectra of the NSCl mol. were obsd. by pumping the
 products of thermally decomp. $N_3S_3Cl_3$ continuously through
 the cell. The rotational const. were obtained for $^{14}N^{32}S^{35}Cl$,
 $^{14}N^{32}S^{37}Cl$, $^{14}N^{34}S^{35}Cl$, and $^{15}N^{32}S^{35}Cl$, all in the ground vibrational
 states. The r_e structure calcd. from these rotational const. is
 the configuration N:SCl with $r(NS) = 1.450 \text{ \AA}$, $r(SCl) = 2.161 \text{ \AA}$,
 and $\angle NSCl = 117^\circ 42'$. The nuclear quadrupole coupling
 const. of ^{35}Cl in the $^{15}N^{32}S^{35}Cl$ species is $\chi_{aa} = -38.51$, $\chi_{bb} =$
 23.51 , and $\chi_{cc} = 15.00 \text{ MHz}$, which corresponds to χ_{bond} of
 -43.36 MHz . In addn. to the ground-state spectra, several sets
 of vibrational satellites were obsd. and assigned to the ν_2 , ν_3 ,
 $2\nu_2$, and $2\nu_3$ states. The vibrational increments of the inertia
 defects, Δ_2 and Δ_3 , are combined with 2 known vibrational fre-
 quencies, ω_1 and ω_2 , to calc. the force const. The value of ω_3 ,
 261 cm^{-1} , calcd. by using the inertia defect increments is in
 agreement with 273 cm^{-1} , estd. by Mueller and others from the
 ir spectra. Redundancy among the 3 inertia-defect increments
 is noted for triat. mols. with the C_s symmetry; its consequence is
 discussed briefly.

RCKP

NSCl

ν_2

city
no pass

u.b. enerp

C.H. 1971. 74. 10.

1971

III

248-669

XIII 2268

1972

NSC, NF₃ (pomosa. chick))

Cowan D.O., Gleiter R.,
Glemser O., Heilbrunner E.,
Helv. Chim. Acta, 1972, 55, N 7,

2418-21

XIII 2062

1972

NSCL (a.n., c.u.n.)

Mizumoto S., Izumi J., Beppu T.,

Mizota E.,

Bull. Chem. Soc. Jap., 1972, 45, N3,
786-789 (a.u.n.)

PMX, 1972, 185350

10

NSCl

1972

У 3 Д399. Фотоэлектронные спектры NSCl, NSF и NSF₃. Cowan D. O., Gleiter R., Glemser O., Heilbronner E. The photoelectron spectra of NSCl, NSF and NSF₃. «Helv. chim. acta», 1972, 55, № 7, 2418—2421 (англ.)

С целью уточнения интерпретации фотоэлектронного спектра (ФЭС) NSF (I) проведено сравнительное изучение ФЭС NSCl (II) и NSF₃ (III). Для всех изученных молекул выполнены полуэмпирич. вычисления положения первых четырех полос ФЭС. Показано, что если предположить принадлежность второй полосы в спектре II суперпозиции 15 a' (σ) и 4 a'' (π) орбиталей, то ФЭС для II смещен к более низким ионизационным потенциалам чем для I. Первая полоса III (12,5 эв) приписана ионизационному процессу с участием SN π -орбитали 7 e (π), а вторая (14,15 эв) орбитали неподеленной пары 10 a_1 (σ) атома азота. Эти орбитали по энергии лежат выше соответствующих орбиталей I, что объяснено большей локализацией связи SN и неподеленной пары на атоме азота для молекулы III.

П. Ш.

Спектр.

гр. 1973. № 3.



+2

NSCl

структ.

8Д193. Исследование при помощи электронной дифракции молекулярной структуры и амплитуд колебаний газообразного тиазилхлорида, NSCl. Emken Walter C., Hedberg Kenneth. Electron-diffraction investigation of the molecular structure and amplitudes of vibration of gaseous thiazyl chloride, NSCl. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 5, 2195—2196 (англ.)

По методу дифракции электронов определены геометрич. параметры молекулы тиазилхлорида: длины связей $N \equiv S$ и $S-Cl$ равны 1,448 и 2,159 Å, расстояние $N \dots Cl$ 3,106 Å, угол NSCl 117,5°. Эти данные полностью согласуются с результатами анализа микроволн. спектра и интерпретируются с точки зрения резонанса ковалентной и ионных структур. Измеренные колебательные амплитуды, соответственно, равны 0,037; 0,052 и 0,076 Å и хорошо согласуются с рассчитанными по фундаментальным частотам и силовым постоянным. Приводятся кривые интенсивности и радиального распределения.

М. А. Ковнер

1973

ВФ-ХИИ-2164
III-28

Ф 1973 №8

NSCl

ВФ-ХИИ - 21/24

1973

16 Б88. Электроннографическое исследование молекулярной структуры и амплитуд колебаний газообразного тиазилхлорида. Emken Walter C., Hedberg Kenneth. Electron-diffraction investigation of the molecular structure and amplitudes of vibration of gaseous thiazyl chloride, NSCl. «J. Chem. Phys.», 1973, 58, № 5, 2195—2196 (англ.)

(геом.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы NSCl. Найдены след. значения межъядерных расстояний (А) и среднеквадратичных амплитуд колебаний (в скобках, А): $N \equiv S$ $1,448 \pm 0,003$ ($0,037_8 \pm 0,002_9$), $S-Cl$ $2,159 \pm 0,003$ ($0,052_6 \pm 0,003_0$), $N \cdots Cl$ $3,106 \pm 0,016$ ($0,076_6 \pm 0,012_1$), NSCl $117,5 \pm 1,0^\circ$. В. Спиридонов

Х. 1973 №16

40108.7207
Ch, Ph, TE

NSCL (G) 96201

1973
1542

Frost D.C., Lee S.T., McDowell C.A.

The HeI photoelectron spectrum of S₂O.

"Chem. Phys. Lett.", 1973, 22, N 2, 243-246

(англ.)

0018

1021 1021 - 0 1 1

ВИНИТИ

CLSA

1973

Wang Victor K.
et al.

"J. Mol. Spectrosc"
1973, 46, N3, 509-512.

u.h.

(cell. N_2O ; III)

NSC

1974

Muller A., Mohan N., Rai N.,

J Chem Phys., 1974,

60, N10, 3958-62.

д.т.в., расчет,

(дефект инерции) (см. H₂O; III)

ClSN

BrSN

~~опт. № 5015~~
ЖЗ-5015

1974

9 Д443. ИК-спектры, структура и силовые постоянные галоидотиазидов ClSN и BrSN, изолированных в матрице. Peake Stephen C., Downs Anthony J. Infrared spectra, structures, and force constants of the

(м.п.; сил. пост.;
геом. структ.)

(см. на обороте)

ф. 1974. №9

1974

matrix-isolated thiazyl halides ClSN and BrSN. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1974, № 8, 859—864 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения в области 200—4000 cm^{-1} молекул XSN ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$), получаемых при пиролизе соединений $\text{S}_4\text{N}_3^+\text{X}^-$ и изолированных в матрице из аргона при t -ре 15° K. Проведено отнесение эксперим. колебательных частот всевозможных изотопных модификаций. По полученным данным рассчитано силовое поле молекул (все шесть силовых постоянных). Обнаружено, что силовая постоянная связи S—N уменьшается при уменьшении электроотрицательности атома X. Рассчитаны (с учетом ангармоничности) величины валентных углов: $117 \pm 3^\circ$ для ClSN и $118 \pm 3^\circ$ для BrSN. Библ. 38.

Ю. М. Л.

Ф. 1974. № 9

CSN

аттестат-5015

1974

19 B287. Спектры инфракрасного поглощения, структура и силовые постоянные тиазилгалогенидов CISN и BrSN, изолированных в матрице. Peake Stephen C., Downs Anthony J. Infrared spectra, structures, and force constants of the matrix-isolated thiazyl halides CISN and BrSN. «J. Chem. Soc. Dalton Trans.», 1974, № 8, 859—864 (англ.)

Di; теом.

Измерены спектры ИК-поглощения ($4000-200 \text{ см}^{-1}$) CISN (I) и BrSN (II), изолированных в Ar матрице при $M/A=800$. Проведены эксперименты по контролируемой диффузии в матрице при 30°K . В спектрах идентифицированы полосы поглощения I и II и их изотопич. модификаций с ^{37}Cl , ^{34}S и ^{15}N . Проведен расчет нормальных кол. I и II. Установлено, что обе молекулы имеют изогнутое строение с $\angle \text{CISN} = 117 \pm 3^\circ$ и $\angle \text{BrSN} = 118 \pm 3^\circ$. Для величин K_{SN} I и II получены значения $1009,5$ и $987,5 \text{ нм}^{-1}$, соотв. Рассматриваются закономерности изменения K_{SN} (а также K_{NO} и K_{SS} в сходных соединениях) как функции электроотрицательности атома X.

Г. Кузьянц

2.1974 N19



S_2O , NSF, O_3 , SO_2 , NSCl 1974.
(Do). XI 4499
11/2, 130

Rosmus P., Dævre P.D., Solouki B.,
Bock H.,

Theor. Chim. Acta, 1974, 35 (2),
129-39.

Photoelectron spectra and molecular properties. xxxvii. Hartree-Fock calculation and photoelectron spectra of S_2O and NSF.

C.A. 1975, 82 n14. 902839

10

(5) 10

NSCE

#4-13917

1976

11 D364. УФ-фотоэлектронные спектры тиазилхлорида. DeKock R. L., Shehfeh M. A., Lloyd D. R., Roberts P. J. Ultraviolet photoelectron spectra of thiazyl chloride. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 4, 807—813 (англ.)

(y) Получены HeI, HeII и NeI фотоэлектронные спектры NSCl (I). Вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) Гравны (в эв), 10,95; 11,82; 13,83; 14,49; 16,96. Спектр I интерпретирован при помощи корреляции с электронной структурой изоэлектронных молекул и результатов

(41) mic. 

4.1976 N11

полуэмпирич. расчета энергий МО в приближении ППДП/2. На основании соотношения интенсивностей полос в HeI и HeII фотоэлектронных спектрах сделан вывод о том, что первые 3 ионных состояния (1-й и 2-й ПИ) образуются при удалении электронов из МО, имеющих значительный вклад АО $3p\ Cl$. Следующие 3 ионных состояния (3-й и 4-й ПИ) соответствуют МО, локализованным на группе NS. 5-й ПИ I связан с удалением электронов из МО, имеющей характер $3s\ S$.
Библ. 38. Ю. В. Чижов

NSCl

* 45 - 13917

1976

from 2nd.
Crick
(3)

84: 171882c Ultraviolet photoelectron spectra of thiazyl chloride. DeKock, R. L.; Shehfeh, M. A.; Lloyd, D. R.; Roberts, P. J. (Dep. Chem., Am. Univ. Beirut, Beirut, Lebanon). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1976, 72(4), 807-13 (Eng). He I, He II, and Ne I photoelectron spectra of NSCl were recorded and the bands assigned by comparison with the spectra of NSF and S₂O and using CNDO/2 calcs. of eigenvalues which were related to ionization potentials by Koopmans' theorem. Seven ionic states were assigned. The 1st 3 states arise from electron ejection from orbitals contg. a proportionately larger share of Cl 3p character, whereas the next 3 correspond to orbitals contg. more NS orbital character. The last ionic state was assigned to ionization from an orbital contg. significant S 3p character.

C.A. 1976 84 N24

NSCL

ЖЗ-13917

1976

21 Б105. Фотоэлектронные спектры тиазилхлорида. DeKock R. L., Shehfeh M. A., Lloyd D. R., Roberts P. J. Ultraviolet photoelectron spectra of thiazyl chloride. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1976, Part 2, 72, № 4, 807—813 (англ.)

фото-
электр.
спектр.

Измерены He-I, He-II и Ne фотоэлектронные спектры NSCl. В He-I-спектре присутствует пять полос, которые идентифицированы на основе анализа корреляц. диаграмм состояний изоэлектронных молекул NSCl, NSF и S₂O, а также расчетов методом ППДП/2. Из сопоставления относительных интенсивностей полос в He-I и He-II-спектрах установлено, что первые три ионные состояния возникают при удалении электронов с орбиталей, имеющих характер 3p-АО Cl, тогда как следующие три ионные состояния соответствуют орбиталям близким к орбиталям NS. Последнее ионное состояние, проявляющееся в спектре, приписано ионизации орбитали, имеющей характер 3s орбитали S.

По резюме

X 1976 N 21

NSCL

1976

Conbeau D., et al.

J. chim. phys. et

chim. - phys. biol., 1976,

73, N7-8; 787-94.

(переп.
судеб.
техн. направ.)

● (all H₂O₂; IV)

NSCl

NSF

#4-13601

1976

1 Д417. Молекулярные постоянные NSCl и NSF.
Müller A., Mohan N., Cyvin S. J., Wein-
stock N., Glemser O. Molecular constants for
NSCl and NSF. «J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 2,
161—170 (англ.)

Изучен спектр основных колебаний газообразного NSCl. Впервые зарегистрирована деформационная полоса ν_3 ($271,6 \text{ см}^{-1}$). С использованием полученных и ранее известных данных (изотопич. сдвиги колебательных частот в Ag-матрице, значения постоянных колебательно-вращательного взаимодействия) по методу наименьших квадратов решена задача восстановления матрицы F . Найдено два набора решений, обнаруживающих примерно одинаковое согласие с экспериментом. В обоих случаях константы силового взаимодействия угловой координаты с валентными пренебрежимо малы. Аналогичным образом по совокупности литературных данных уточнено силовое поле молекулы NSF.
Библ. 17. А. К.

(м.н)

(+1)



Ф1977 N1

NSCL

Хз-13601

1976

NSF

23 Б235. Молекулярные константы для NSCl и NSF.
Müller A., Mohan N., Cyvin S. J., Weinstock N.,
Glemser O. Molecular constants for NSCl and NSF.
«J. Mol. Spectrosc.», 1976, 59, № 2, 161—170 (англ.)

Измерен ИК-спектр поглощения молекулы NSCl в газовой фазе. По частотам колебаний NSCl и ее изотопич. разновидностей вместе с лит. данными по значениям постоянным квартичного центробежного искажения и дефекта инерции вычислены гармонич. силовые коэф. NSCl. Аналогичный расчет выполнен также для NSF.

М. Р. Алиев

(М. П.)

(+1) A

Х. 1976. № 23

NSCl

X-4-13601

1976

(u.n)
- 84: 82072w Molecular constants for thionitrosyl chloride and thionitrosyl fluoride. Mueller, A.; Mohan, N.; Cyvin, S. J.; Weinstock, N.; Glemser, O. (Inst. Chem., Univ. Dortmund, Dortmund, Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1976, 59(2), 161-70 (Eng). The complete ir spectrum of gaseous NSCl, including the hitherto unobsd. ν_3 , is reported. A set of force consts. for gaseous NSCl consistent with a no. of pieces of independent data such as the isotopic shifts ($^{14}\text{N}^{32}\text{S}^{35}\text{Cl}$), $^{15}\text{N}^{32}\text{S}^{35}\text{Cl}$, $^{14}\text{N}^{32}\text{S}^{37}\text{Cl}$, $^{15}\text{N}^{32}\text{S}^{37}\text{Cl}$, $^{14}\text{N}^{34}\text{S}^{35}\text{Cl}$ and $^{15}\text{N}^{34}\text{S}^{35}\text{Cl}$), centrifugal distortion consts. ($^{14}\text{N}^{32}\text{S}^{35}\text{Cl}$), and the inertia defect ($^{14}\text{N}^{32}\text{S}^{35}\text{Cl}$) was computed. Also, the force field of NSF was redetd. by using the vibrational frequencies and the centrifugal distortion consts.

C.A. 1976, 84, 1412

1976

NSC

(encl. w/CF)

Müller A. et al.
J. Mol. Spect. 1976, 30,
N2, 297-310.

(all-DNF) III

ce 3N

XU-17381

1976

Br 3N

7 Д488. Силовые константы и средние амплитуды колебаний галогенидов тиазила CISN и BrSN. Sanyal Nitish K., Goel R. K., Pandey A. N. Force constants and mean amplitudes of vibration of the thiazyl halides CISN and BrSN. «Spectrosc. Lett.», 1976, 9, № 10, 681—688 (англ.)

сил. пост

Выполнен расчет колебаний молекул CISN и BrSN с использованием силового поля Юри—Бредли по частотам этих молекул в матрице Ag. Определены матрицы силовых постоянных и средние амплитуды колебаний при 0, 298 и 500° K для разных изотопных модификаций изученных молекул. Рассмотрены также силовые константы, определенные методом обобщенного силового поля с включением молекулы FCN. Силовая константа f_{s-N} уменьшается с уменьшением электроотрицательности галогена, что согласуется с результатами для серии молекул XNO, XSSX и XOOX, где X=галоген. Также ведет себя константа K_{s-N} поля Юри—Бредли. Изменения остальных констант анало-

(+1) ☒

ф. 1977. №7

гичны, исключение составляет f_{S-Br} , некоторое возрастание которой может быть связано с использованными в расчете приближениями. Отмечено отсутствие влияния галогенозамещения на амплитуды колебаний N—S и увеличение амплитуд S—Hal с уменьшением электроотрицательности галогена. Библ. 17. М. Тонков

CeSN
BrSN

свойств
и средн.
амплитуд,
колебаний

(41) ☒

х. 1977. №13

13 Б236.

Силовые постоянные и средние амплитуды

1976

колебаний тиазилгалогенидов CIsN и BrSN. Sanyal Nitish K., Goel R. K., Pandey A. N. Force constants and mean amplitudes of vibration of the thiazyl halides CIsN and BrSN. «Spectrosc. Lett.», 1976, 9, № 10, 681—688 (англ.)

Вычислены силовые постоянные CIsN и BrSN (симметрия C_s), а также их изотопозамещ. по азоту, сере и хлору, в обобщенном валентно-силовом поле и поле Юри—Бредли. Значения эксперим. частот взяты из ИК-спектров соединений в матрицах Ar при 15° K. Полученные результаты сравнены с соотв-щими данными по FSN. Показано, что при понижении электроотрицательности атома X в ряду XSN значение f_{sX} падает, что согласуется с результатами для серий XNO, XSSX, XOOX (X=F, Cl, Br). Величины f_{s-X} и f_a также снижаются с понижением электроотрицательности атома X. Силовые постоянные в обобщенном валентно-силовом поле лучше воспроизводят эксперим. частоты, чем константы Юри—Бредли. Вычислены средние амплитуды колебаний U при 0, 298,15 и 500° K. Величина U_{sX} растет с понижением электроотрицательности X, а U_{NX} — падает, хотя в целом тот и другой эффекты невелики, поскольку величины U мало изменяются с заменой X.

Е. Разумова

18671-54

CLSN
BrSN

* 68-17381

1976

86:23706z Force constants and mean amplitudes of vibration of the thiazyl halides thiazyl chloride and thiazyl bromide. Sanyal, Nitish K.; Goel, R. K.; Pandey, A. N. (Dep. Phys., Univ. Gorakhpur, Gorakhpur, India). *Spectrosc. Lett.* 1976, 9(10), 681-8 (Eng). Force consts. were calcd. for CLSN and BrSN by using the general valence force field and Urey-Bradley force field. The computed results show some interesting features. The mean amplitudes of vibration were also calcd. at 0, 298.15, and 500 K.

Calc. not
sp. relap.
assumed.

Корр. данни.

(+1) 



C.A. 1977 86 N4

NSC.

AMMULE 5792

1977

математ.

10

Shimanecki T.

5. 2000

1977. 6

4405-171

002-302

Ref. Info.

CLNS

Lovas F. J.

1978.

M.H.

J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1978, 7 (4), 1445-1750.

Магнито-и. в. спектроскоп.

II Преходимые моменты

NSCL

annua 7127
BP - XIII - 4405

1978

M.N.

90: 94539r Molecular constants of the sulfide chloride nitride (NSCl) molecule. Namasivayam, R.; Nair, K. Viswanathan (Dep. Phys., Annamalai Univ., Annamalainagar, India). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1978, 259(6), 1117-20 (Eng). The mol. force consts. and mean vibrational amplitudes of the NSCl mol. were calcd. by using the method of the characteristic coordinate set (e.g., K. Ramaswamy and N., 1970), which gave a very good approxn. to the force field of NSCl. The potential-energy distributions were also calcd. to verify the correctness of the choice of the symmetry coordinates.

C.A. 1979. 90 N12

NSC
NSB

1979

Namasivayam R, et al.

Z. Naturforsch, 1979, A34,
N6, 416-20.

ew. 10000.

ew. NSF - II

NSC

SUMMER 12892 1981

NSF

94: 92749t Molecular force fields of thiazyl halides. Gopinath, C. R.; Rao, K. S. Raghavendra (Dep. Phys., Bangalore Univ., Bangalore, 560 001 India). *Indian J. Pure Appl. Phys.* 1981, 19(1), 89-91 (Eng). The method of characteristic set of valence coordinates of J. Herranz and F. Castano (1965,1966), was applied to the case of 2 thiazyl halides (NSCl and NSF), and the applicability of the method to study the mol. force fields of f.mols. of XYZ-type was investigated. The potential energy consts., mean amplitudes of vibration and Coriolis coupling consts. were obtained. The method used leads to consistent force fields, and gives a reasonably close (with exptl. ones) set of values, not only for the force consts., but also for other mol. consts.

C.A. NO. 5.

M.N.

⑦ 12

C.A. 1981.94112

NSCl

Оттиск 12892

1981

7 Б40. Молекулярное силовое поле тиазилгалогенидов. Gopinath C. R., Rao Raghavendra K. S. Molecular force fields of thiazylhalides. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1981, 19, № 1, 89—91 (англ.)

Для молекул NSCl и NNSF с помощью метода характеристич. набора валентных координат рассчитаны силовые поля, а также среднеквадратичные амплитуды колебаний и постоянные корриолисова взаимодействия. Полученные наборы силовых постоянных позволяют с достаточно хорошей точностью воспроизвести эксперим. данные.

Б. И. Жилинский

Сел. пост.


(H) NNSF

Х. 1982, 19, № 4.

CSN 10mmuck 16074 1982

Chopra J.R., Verma U.P.,
et al.,
C.S.N. noem.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1982, 20,
N 6, 500-502.

CLSN

[Orn. 20765]

1984

Burdett J. K., Lawrence N. J.,

Электро-
отрицат.,
структура
и
связи в
молекулах

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

NSCl

1984

18 Б1083. Неэмпирический расчет силового поля для тиазилхлорида. Ab initio force field for thiazyl chloride. Cervellati R., Lister D. G., Palmieri P. «J. Mol. Struct.», 1984, 108, № 3—4, Suppl.: «Theochem», 17, № 3—4, 321—323 (англ.)

Выполнен расчет электронного строения молекулы NSCl ограниченным методом Хартри—Фока (ОХФ) в базисе Данинга для атома N и базисе Вайяра для атомов S и Cl, расширенном включением *d*-АО с экспонентами 0,8 для S и 0,6 для Cl. Оптимизация геометрии проведена двумя способами — интерполяцией ОХФ-энергий и методом релаксации сил. Силовое поле (СП) построено при помощи интерполяционной схемы по трехмерной сетки ОХФ-энергий. Рассчитанное СП оказалось ближе к тому полученному экспериментально, в котором недиагональн. константа F_{13} отлична от нуля ($\sim 0,4-0,5$). Рассчитаны также кубич. и диагональные силовые постоянные 4-й степени. Отмечено, что ОХФ-расчет систематич. завышает значения силовых постоянных примерно на 15—20%.

С. Долин

расчет строен,
Сил. пост.

X. 1984, 19, № 18

NSCl

1984

9 Д59. Силовое поле тиазилхлорида, рассчитанное неэмпирически. Ab initio force field for thiazyl chloride. Cervellati R., Lister D. G., Palmieri P. «J. Mol. Struct.», 1984, 108, № 3—4, Suppl.: «Theochem», 17, № 3—4, 321—323 (англ.)

Силовое поле молекулы NSCl исследовано неэмпирич. методом ССП с использованием базиса сгруппированных гауссовых ф-ций Даннинга для атома N и базиса Вейяра, расширенного *d*-ф-циями, для атомов Cl и S. Путем расчета значений полной энергии в узлах 3-мерной сетки и построения интерполирующей гиперповерхности найдены квадратичные и кубические силовые константы. Величины диагональных квадратичных констант несколько завышены по сравнению с экспериментальными, для недиагональных констант расхождение теории и эксперимента находится в пределах ошибки последнего.

А. В. Зайцевский

см. ЛОСМ.

ф. 1984, 18, № 9

CLSN.

(om. 24696)

1986

Bendazzoli G. L., Cazzoli G.,
Esposti C. D., et al.,

J. Chem. Phys., 1986,
N10, 5351-5364.

суд.ноет.,
м.н., теор.
пререм.

NSCL

[Om. 25068]

1986

Ehrhardt Claus,
Ahleichts Reinhart.

meop.
pariem. Chem. Phys. 1986,
108 (3), 717-28.

(Cen. NSF; III)

$NSCl_2$

Dim. 25 115

1986

Ehrhardt C., Ahlrichs R.,

теорет.
расчет
ab-initio,
стабиль-
ность
ионеров

Chem. Phys., 1986, 108, N 3,
429 - 439.

NSC [от. 2.8370] 1987

Алتمان А.Б., Венгеллерова Т.И. и др.

струк-
тура
калейд.
частоты

Таблицы рекомендуемых
справочных данных.

Депомирована в ВНИИКИ
Госстандарт СССР

17.02.87. N 295.

ClSN

1988

75 B1179. Расчет молекулярных постоянных молекул типа XYZ методом Изотани. Molecular constants of XYZ type molecules by the method of Isotani / Gnanasekaran S., Gnanasekaran P., Krishnan S. S. // Acta Cien. Indica. Phys.— 1988.— 14, № 2.— С. 37—42.— Англ.

Метод Изотани (Isotani S. // J. Mol. Struct.— 1975.— 28.— С. 61) использован для расчета силовых полей нелинейной молекулы ClSN (I) и трех ее изотопомеров — ClS¹⁵N (II), Cl³⁴SN (III), Cl³⁴S¹⁵N (IV) в трех вариантах, в двух из которых метод Изотани сочетается с разделением высокочастотных и низкочастотных колебаний и включением данных по изотопомерам. С рассчитанными силовыми полями I-IV проведен расчет коэф. влияния, средних амплитуд колебаний, кориолисовых постоянных и постоянных центробежного искажения I-IV. Рассчитанные молек. постоянные I-IV удовлетворительно согласуются с лит. данными. Г. М. Курамшина

М.П.

X. 1991, N 5

CLNS⁺
(NSCL⁺)

Om. 30490 1988

Jacox M.E.,

Ti, Pi; J. Phys. and Chem. Ref.

Data, 1988, 17, N2, 332.

NSCl

1990

20 Б1134. • Колебательные спектры NSCl и $[\text{NS}]^+ - [\text{SbCl}_6]^-$ в твердом состоянии. Vibrational spectra of solid NSCl and $[\text{NS}]^+[\text{SbCl}_6]^-$ / Rost E., Sawodny W. // Spectrochim. acta. A. — 1990. — 46, № 12. — С. 1793—1795. — Англ. Место хранения ГПНТБ

Измерены ИК-спектры газообразного и тв. NSCl; ИК и КР спектры тв. $[\text{NS}]^+[\text{SbCl}_6]^-$. В спектре газообразного NSCl наблюдались две полосы, связанные с колебаниями сера—хлор ($\sim 410 \text{ см}^{-1}$) и азот—сера ($\sim 1320 \text{ см}^{-1}$). ИК-спектр поглощения NSCl в тв. состоянии получен после конденсации пара на пластинку из KBr и послед. охлаждением ее до т-ры жидк. азота. В спектре тв. NSCl полоса 410 см^{-1} исчезала полностью, а полоса 1320 см^{-1} смещалась на $\sim 75 \text{ см}^{-1}$ в высокочастотную область. Эти изменения объяснены ионным характером структуры тв. $[\text{NS}]^+\text{Cl}^-$. Соед. $[\text{NS}]^+[\text{SbCl}_6]^-$ получено хлорированием $\text{S}_4\text{N}_4 \cdot \text{SbCl}_5$ смесью Cl_2 , CH_2Cl_2 и CCl_4 . В ИК-спектре наблюдались две интенсивные полосы 1405 и 347 см^{-1} , отнесенные к колебаниям $\nu(\text{NS})$ и $\nu_3(\text{f}_{1u}) [\text{SbCl}_6]^-$. В спект-

М.А.

X: 1992, № 20

ре КР в низкочастотной области наблюдались интенсивная полоса 336 см^{-1} , слабая полоса 289 см^{-1} и полоса средней интенсивности 174 см^{-1} , отнесенные соотв. к колебаниям $\nu_1(a_{1g})$, $\nu_3(l_g)$ и $\nu_5(f_{2g})$ $[\text{SbCl}_6]^-$. Сопоставлены значения частот колебаний $\nu(\text{NS})$, соотв-щих силовых постоянных и порядков связи в соед. NSCl , $[\text{NS}]^+ - [\text{SbCl}_6]^-$, $[\text{NS}^+][\text{AsF}_6]^-$, $[\text{NS}^+][\text{SbF}_6]^-$. В. М. Ковба



NSCl^+

ClNS^+

NSCl

ClNS

М.П.

Х. 1997, № 2В

1996

№ 20Б146. Поиск тионитрозилхлорида ($\text{Cl}-\text{N}=\text{S}$) в газовой фазе. A search for thionitrosyl chloride ($\text{Cl}-\text{N}=\text{S}$) in the gas phase / Nguyen Minh Tho, Flammang Robert // Chem. Ber.— 1996.— 129, № 11.— С. 1379–1381.— Англ.

Квадратичным методом КВ с учетом одно-, двух- и трехкратных возбуждений в базисе $6-311++\text{ГФ}(3df, 2p)$ и с учетом энергии нулевых колебаний показано, что ClNS^+ на 36 кДж/моль более устойчив, чем NSCl^+ , в то время как нейтральная молекула NSCl на 77 кДж/моль устойчивее ClNS . Последнюю не удалось обнаружить проведенными авторами исследованиями методом масс-спектрометрии.

Н. С.