

N-0

1951

*Onium*  
*aspa*

Wayne L.G., Yost D.M.,

J. Chem. Phys., 1951, 19, 41

Russena pearyuta memon

$\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  u  $\text{H}_2\text{O}$

511-III

1952

$H_2O_6$  ( окислы азота )

Chalvet O., Daudel R.

J. chim. phys., 1952, 49, 77-81

Theoretical study of the structure  
of the nitrogen peroxide

C.A., 1953, 9073h

N

окислов

Nightingale R. & Sp. 1954.

J. Phys. Chem. 58, 1047-50.

У. К. Смит окислов  
азота.



1955

Арнольд Т.И.

перекиси азота

Исследование процесса взаимнодействительных окислов азота с озонированным кислородом и окислы азота высших окислов азота.

Диссертация ИОНХ АН СССР, 1955

Окисл азота  $N_2O_6$  при взаимодействии окислов азота с озном.  $N_2O_4, N_2O_5$

(1)

$N_2O_6$ , также  $\bullet$  с азотом  $NO_2, N_2O_5$  взаимодействие при каталитическом  $\bullet$ .

микрофид.  
серии. N

Brown J.F.

1955

JACS 77, 6341-51

И.к. смесь микрофидных  
соединений азота

окунь  
азы

Astein N., Johannin-Gilles A.,  
Granier-Mayence J., Romand J.,  
The Threshold of Space, p. 136.

Ук. гавоне но чекроне но-  
маеуеуе завадаваеуе N2O,  
NO и H2O в гавонеуе гуопа-  
гмонеуе (150-1000A)

1957

Оксиды  
азота

Barth C.A., Kaplan J.,

The Threshold of Space, p. 3 (1957)

Углекислородно-азотной  
атмосферы.

Краткий обзор современного вопроса  
предела влияния науч. космо-  
логической картины жизни фи-  
зики атмосферы.

1957

Апперсунне Bates D.R.,

The Threshold of Grace, p. 14 (1957)

Темами которого <sup>всего</sup> являются.

Обзор работы с указанием на  
ключевые моменты.



1957


Оксиды

Kartick P

азота

The Threshold of Space, p. 32 (1957)

Дискуссия ассоциативной реакции азота и его оксидов, происходящих в верхних слоях атмосферы.

Кривая полная таблица  
различных процессов с газом  
N и его оксидов, с рентгеном  
электронами  и Eq Kr и др. 2007

1957

Okunev  
asya

Nicolet M.,

The Threshold of Space, p. 40 (1957)  
Okunev asya u ~~koacbereme~~  
basyra

1957

Оксиден  
азота

Ray, J. D., Ogg, R. A., Jr.,

J. Chem. Phys., 1957, 26, 984.

Курсовая оксиден азот, ка-  
манушпробавенно збы оксиден азот



1958

~~Смена~~

Травернин Г.,

~~с/п~~

Г. физ. рад., 1958, 19, 639.

Диссоциация и рекомбинация

возникает в газовой смеси.

Okunaka  
ayofa

Isolation and identification of new oxides of nitrogen. Henry A. Bent. *Intern. Symp. Free Radical Stabilization, 4th, Washington, D.C. 1959, D-II-1-D-II-7.* An infrared study of films frozen at 4.2°K. from NO, NO<sub>2</sub>, and mixts. of NO and NO<sub>2</sub> in self-matrixes and matrixes of Ar, N, O, CO<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub>O-H is discussed. At 4.2°K. monomeric NO has a simple peak at 1883 that splits on heating to 77°K. into peaks at 1768 and 1862 cm.<sup>-1</sup> This is due to formation of the cis dimer, O:N-N:O. The monomer-dimer thermal dissocn. is explored by infrared methods. There are spectral indications of a metastable O:N-O-NO<sub>2</sub> and metastable ON-O-NO. Soter George Kokalis

C.A. 1963.58.5  
4054e

1959

Оксиды

Маркесвич А. М.; Тамм И. И.; Рядыкин Ю. И.

азота

Ж. Ф. Х., 1959, 33, 764.

Роль закалики в реакции синтеза  
оксида азота. II.

1959

Ноксис Райзер ЧО.Т.,

МС.Ф.У., 1959, 33, 700.

Образование осколков атома  
образования в ударной волне при срыве  
волн взрыва в воздухе.  
Атомный взрыв.

1960

Оксиды

азота

ЗБ95. Соотношения между силовыми постоянными, порядками связей, их длинами и частотами колебаний для некоторых связей азота с кислородом. Jonathan N. B. H. Relations between force constants, bond orders, bond lengths, and bond frequencies for some nitrogen-oxygen bonds. «J. Molec. Spectrosc.», 1960, 4, № 1, 75—83 (англ.).—Ранее описанным методом «самосогласованных» МО (Nagakura S. «Bull. Chem. Soc. Japan», 1952, 25, 164, 179) вычислены порядки связей  $N-O(p)$  в  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $NO_2^+$ ,  $N_2O$ ,  $NO_2^-$  и  $NO_3^-$  (в случае  $NO$  расчет произведен для основного и трех возбужденных состояний). Полученные значения  $p$  сопоставлены с  $r(N-O)$ , силовыми постоянными  $k(N-O)$  и  $\nu(N-O)$ . График  $k(N-O)/r(N-O)$  представляет собой прямую линию. Графики  $k(N-O)/p$ ,  $r(N-O)/p$  и  $k(N-O)/\nu(N-O)$  являются кривыми, близкими к прямой линии. Найденные соотношения между рассматриваемыми величинами используются для определения параметров связей  $N-O$  в некоторых многоатомных структурах как нитрометан, нитрамид, азотная кислота и фтористый натрий.

В. Алексанян

з.1961.3

1960

Asaj  
Sources

Relations between force constants, bond orders, bond lengths, and bond frequencies for some nitrogen-oxygen bonds. N. B. H. Jonathan (Univ. Coll. Wales, Aberystwyth). *J. Mol. Spectroscopy* 4,75-83 (1960).—Bond orders have been calcd. by the self-consistent M.O. method used by Anno, *et al.* (CA 50, 14281c), with the Coulomb integral and the resonance integral being adjusted for the formal changes acquired by the atoms of simple N—O compds. The mols. studied included NO, NO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub><sup>+</sup>, N<sub>2</sub>O, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, and NO<sub>3</sub><sup>-</sup>. Bond lengths and force consts. are correlated with the calcd. bond orders, and the stretching NO frequencies are correlated with the force consts. and bond lengths. Data currently available provided a sensibly coherent and uniform picture of the simple N—O bonds.

Robert A. Bleidt

C. A. 1961-55-14-13053de

1961

N-  
-Oxide

Shock-wave studies by mass spectrometry. I. Thermal decomposition of nitrous oxide. J. N. Bradley and G. B. Kistiakowsky (Harvard Univ.). *J. Chem. Phys.* 35, 256-63 (1961).—An app. is described in which the reacting gas behind a reflected shock wave is sampled continuously and analyzed at intervals of 50 or 100  $\mu$ sec. by a time-of-flight mass spectrometer. The thermal decompn. of  $N_2O$  in the temp. range 1780-2000°K. was used as a test case to demonstrate that the exptl. technique is valid. It was shown that the mechanism and rate consts. of this reaction at high temps. are consistent with earlier measurements at much lower temp. II. Polymerization and oxidation of acetylene. *Ibid.* 264-70.—The polymerization and oxidation of  $C_2H_2$  were studied at 1800°-2700°K. and 950°-1100°K., resp., by the technique of time-of-flight mass spectrometry in reflected shock waves. In the absence of oxygen, a simple

coll. ref. 5.

C. A. 1961. 55. 25. 254.34 gr

bimolecular reaction produces a dimer, probably vinyl-acetylene, and higher polymers, which appear to reach "equil." with the acetylene. A sharp drop in the concn. of these polymers is observed at a later time, which is correlated with the formation of carbon after an induction period. In the presence of oxygen, a dimer, probably biacetylene, is formed simultaneously with the formation of CO and H<sub>2</sub>O, after an induction period. This suggests that it is a product of the branching-chain reaction, a specific mechanism for which is proposed.

P. M. B.



original  
Dyoga

1961

Vibrations in nitrogen oxides. Joseph Paul Devlin  
(Kansas State Univ., Lawrence). *Univ. Microfilms* (Ann  
Arbor, Mich.), L.C. Card No. Mic 60-5319, 120 pp.; *Dis-  
sertation Abstr.* 21, 2124-5(1961). P. M. B.

C.A. 1961, 55, 16.  
15118 B

Соединения

Медвен К. Л.,

азот + кислород

J. Chem. Phys., 1961, 34, 547 (N2).

Электронные спектры и спектры  
<sup>ИК.</sup> соединений, содержащих азот и  
 кислород)

1962

The empirical dependence among force constants, distances, and stretching frequencies of nitrogen-oxygen bonds. Yu. Ya. Kharitonov. *Izv. Akad. Nauk SSSR, Old. Khim. Nauk* 1962, 1953-8. Formulas for obtaining distances and force const. are: for  $1.06 \leq r_{NO} \leq 1.22$  and  $9 \leq k_{NO} \leq 25$ ,  $r_{NO} = 1.30_9 - 0.010 k_{NO}$ ,  $k_{NO} = 130.9 - 100r_{NO}$ ; for  $1.20 \leq r_{NO} \leq 1.45$  and  $4.3 \leq k_{NO} \leq 11$ ,  $r_{NO} = (5.267/k_{NO}^2) + 1.157$ ,  $k_{NO} = 2.2_9/(r_{NO} - 1.157)^{1/2}$ ; for  $1.36 \leq r_{NO} \leq 1.48$  and  $4 \leq k_{NO} \leq 5$ ,  $r_{NO} = 1.997 - 0.12_9 k_{NO}$ ,  $k_{NO} = 15.4_8 - 7.7_8 r_{NO}$ , where  $r_{NO}$  is the N-O distance in A., and  $k_{NO}$  is the force const. in millidynes/A. The value of  $k_{NO}$  for  $NH_2OH$ , used in the construction of a curve, is calcd. according to the formula for a model with 2 masses, under the assumption that each of the groups  $NH_2$  and  $OH$  is a single oscillating mass. The validity of this assumption is proved by correctly calcg. the stretching frequency of the  $ND_2-OD$  bond with the same formula. The exptl. and calcd. values are tabulated of  $r_{NO}$  and  $k_{NO}$  for  $NO$ ,  $NO^+$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O_4$ ,  $HNO$ ,  $N_2O$ ,  $NO_2^+$ ,  $NOCl$ ,  $NOBr$ ,  $NO_2^-$ ,  $N_2O_2^{--}$ , and  $NH_2OH$ . The equations allow the values of  $r_{NO}$  to be calcd. to an error of  $\pm 0.01$  to  $\pm 0.03$ .

N-O

C.A. 1963.



C.A. 1963.

C.A. 1963. 58. B

13156 de

A. Equations for calcg.  $r_{NO}$  in nitro groups directly from vibrational frequencies ( $\nu$ , in  $\text{cm.}^{-1}$ ) are given:  $r_{NO} = 1.315 - 0.67 \times 10^{-4} \nu_{\text{asym}}(\text{NO})$ , and  $r_{NO} = 1.377 - 1.21 \times 10^{-4} (\nu_{\text{sym}}(\text{NO}) + \nu_{\text{asym}}(\text{NO}))/2$ . Values for  $r_{NO}$  calcd. with these equations are not more than 0.02 Å. in error for several compds. contg. the nitro group.  $r_{NO}$ , calcd. for more than 100 complex compds. of elements of Group VIII of the periodic table, is 1.21–1.22 Å.

William C. Ruebsamen

Ureth  
azoma

1962

J. sp.

30381) POTENTIAL CONSTANTS AND THERMODYNAMIC FUNCTIONS OF ISOTOPIC OXIDES OF NITROGEN.

G. Nagarajan (Annamalai Univ., Annamalainagar, South India). Bull. soc. chim. Belges, 71: 222-5(Mar.-Apr. 1962). (In English)

By using the observed zero-order frequencies of isotopic oxides of nitrogen, the evaluation of potential constants on the basis of Wilson's group theoretical method and the calculation of molar thermodynamic functions for the temperature range from 200 to 2000°K on the basis of a rigid rotator, harmonic oscillator model were carried out. (auth)

NSA-1962-16-22

Окислы  
азота

3 Д60. Электронная структура различных окислов азота. Serge Josiane. Electronic structures of different nitrogen oxides. «Internat. Sympos. Molec. Struct. and Spectrosc. Tokyo, 1962». S. 1., s. a., B119/1 (англ.)

С целью выяснения природы N—N-связи между двумя группами NO<sub>2</sub> для плоских димеров методом МО исследована структура электронных оболочек молекул NO<sub>2</sub> и N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Для определения π-молекулярных орбит использован метод самосогласованного поля. Многоцентровые интегралы были вычислены в приближении Паризера и Парра. При расчетах учитывалось взаимодействие между π-электронами и одной неподеленной парой каждого кислородного атома. Как показано, предположение, что N—N-связь в N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> есть чистая π-связь, ведет к результатам, которые не согласуются с эксперим. данными.

Е. Пшеничнов

ор. 1963. ЗД

$N_2^{14}O^{16}$ ,  
 $N^{15}N^{14}O^{16}$ ,  
 $N_2^{15}O^{16}$

Снег

Угроссо R.P. 1964  
Diss. Abstr., 1964, 25, N2, 862

Снежур оженн аџоџа и  
ее иџоџов в 8м облаџи

Снежур Конџаџелитно-враџ. пољоси  
Рассџџанн враџ. конџанџи  
пољос (100-000), (02°0-000), (11°0-  
-01°0) и (03°0-01°0)

№ 04

1967

8 В38. Оксиды азота. Hicks D. Oxides of nitrogen.  
«В.С.У.Р.А. Gaz.», 1967, № 62, 7—11 (англ.)  
Обзор. Библ. 16

X. 1968. 8



Di, em. noch. ( $\text{SPO}_3^-$ ;  $\text{MPO}_3^-$ ;  $\text{FPO}_3^-$ ;  $(\text{OH})\text{PO}_3^-$   
 $\text{SBO}_3^-$ ;  $\text{HBO}_3^-$ ;  $\text{FBO}_3^-$ ;  $\text{ClBO}_3^-$ ;  $(\text{OH})\text{BO}_3^-$ ;  $(\text{OH})\text{SeO}_3^-$   
 $\text{SReO}_3^-$ ;  $\text{FReO}_3^-$ ;  $\text{ClReO}_3^-$ ;  $\text{NO}_3\text{O}_3^-$ ;  $\text{FClO}_3^-$ ;  
 $(\text{OH})\text{ClO}_3^-$ ) Müller H., Nagarajan G.,  
Z. anorgan. und allgem. Chem., 1964,  
399, N 1-2, 87-91

Mittlere Schwingungsamplituden  
in verschiedenen Ionen und Molekülen  
vom Typ  $\text{ZXY}_3$  mit  $\text{C}_{2v}$ -Symmetrie

PX 1964  
185 175

LIBRARY OF THE  
UNIVERSITY OF TORONTO

VII 3949

1968

N-0

105400v Matrix isolation infrared study of metastable nitrogen oxide compounds. Dodge, Marcia C. (Univ. of California, Berkeley, Calif.). 1968, 158 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 69-14,872. From *Diss. Abstr. Int. B* 1969, 30(3), 1066. SNDC

(+1) в одній

C.A. 1970. 72.20

(X)

N-O-coeg

1969

114908u Theoretical aspects of the carbon-nitrogen oxide and carbon-nitrogen dioxide bonds. Wagniere, Georges (Univ. Zurich, Zurich, Switz.). *Chem. Nitro Nitroso Groups* 1969, 1-77 (Eng). Edited by Feuer, Henry. Intersci. Publ.: New York, N.Y. Quantum mech. calcs. of the mol. properties, esp. the electronic structure and spectroscopic properties, of nitrosoalkanes, nitroxide, N-oxides, nitroalkanes, and aromatic nitroso and nitro compds. were reviewed with 232 refs. C.M. Buess

Справочник

М.Н.

М.Мех. парен

C.A. 1970. 72. 22

1971

$N_2O$

Kelkar V. K.,

$N_2O_4$

Bhalla K. C., Khubchandani

$N_2O_5$ ;

"J. Mol. Struct.", 1971, 9,

4, 383-391.

( $\mu_{\text{exp}}, \mu$ ,  
 $\mu_{\text{th}}, \nu_0$ )

(see  $NO_2$ , III)

2767 1971

$2O_m^{n-}$  ;  $BrO_m^{n-}$  ;  $IO_m^{n-}$  ;  $SO_m^{n-}$  ;  $SeO_m^{n-}$  ;  
 $TeO_m^{n-}$  ;  $NO_m^{n-}$  ;  $PO_m^{n-}$  ;  $AsO_m^{n-}$  ;  $CO_m^{n-}$  ;  
 $SiO_m^{n-}$  ;  $BO_m^{n-}$  ;  $HClO$  ;  $ClOH$  ;  $HClO_2$  ;  
 $ClO_2H$  ,  $HClO_3$  ;  $ClO_3H$  ;  $HBrO$  ;  $BrOH$  ;  
 (I, Ae<sup>-</sup>)

XI 3037

Bosch S.S., "Jon" (Esp), 1972,  
32, N.368, 153, 154, 157

10

INSTITUTO QUÍMICO

Humpambe (Vi)

1-108.

Smith D.E.,

86-A-2035 <sup>1972</sup>

Diss. Absto. Int. 1972, B33, N2,  
671 (ann.)

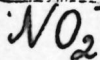
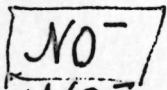
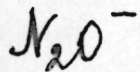
Vibrational study of a series  
of matrix-isolated nit-  
rates.

20

$\frac{10}{(cu. \text{opurnal})}$

⊕

CA, 1973, 78, N2, 9721a



(образов-  
иона.)

R. Marx, G. Mauclaire, 1973.  
Fehsenfeld F.C., Dunker D.B.,  
Ferguson E.E.

"J. Chem. Phys." 1973, 58, N 8,  
3267-73.

$N_4O_6^{2+}$

\* 4-10427

1975

) 4 Б37. Электронное строение  $N_4O_6^{2+}$  и связывающее взаимодействие  $NO^+$  с  $NO_3^-$ . Paoloni L., La Manna G. The electronic structure of  $N_4O_6^{2+}$  and the bonding interaction of  $NO^+$  and  $NO_3^-$ . «J. Mol. Struct.», 1975, 28, № 2, 319—322 (англ.)

Электр.  
строение  
геометрия

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ПДП/2 исследовано электронное строение ионного кластера  $N_4O_6^{2+}$  (I), обнаруженного с помощью рентгеноструктурных и ИК-спектроскопич. исследований аддукта  $Fe(NO_3)_3$  с  $N_2O_4$  состава 2:3. Рассмотрена эксперим. геометрия: 3 катиона  $NO^+$  (II), расположенных асимметрично вокруг аниона  $NO_3^-$  (III) приблизительно на биссектрисах углов  $O-N-O$ . Расположение II с ориентацией к III атомами N, выгоднее структуры с противоположной ориентацией. С частичной

X 1976 N4

~~2-10427~~



оптимизацией расположения II и III в I при фиксированной геометрии II и III рассмотрены структура симметрии  $D_{3h}$ , а также несколько структур симметрии  $C_{3v}$ . Все эти структуры на  $\sim 0,5$  ат. ед. стабильнее эксперим. и расстояние O (II)—N (III) существенно короче эксперим. (1,53—1,55 Å и 2,42—2,71 соотв.). Энтальпии образования оптимизированных структур различаются менее чем на 5%. Полученные результаты свидетельствуют в пользу высказанного ранее предположения о возможности существования I как стабильного ионного кластера в р-рах (в частности, в р-рах  $N_2O_4$ ), причем II играют роль мостиков, аналогичных протонам в H-связанных системах.

В. Л. Лебедев

$N_4O_6^{2+}$

электр.  
структ.

2 Д158. Электронная структура  $N_4O_6^{2+}$  и взаимодействие между  $NO^+$  и  $NO_3^-$ . Paoloni L., La Manna G. The electronic structure of  $N_4O_6^{2+}$  and the bonding interaction of  $NO^+$  and  $NO_3^-$ . «J. Mol. Struct.», 1975, 28, № 2, 319—322 (англ.)

Методом ППДП/2 проведен расчет электронной структуры группировки  $N_4O_6^{2+}$ , на существование которой указывают результаты недавних рентгеноструктурных и ИК-исследований. Рассмотрены экспериментально установленная геометрия, при которой три иона  $NO^+$  расположены в плоскости иона  $NO_3^-$ , причем каждая связь N—O направлена по биссектрисе угла ONO, а также структуры, характеризующиеся выходом групп  $NO^+$  из плоскости. Показано, что все структуры достаточно устойчивы. Энергетически более выгодны непланарные структуры. Связь  $NO^+$  с  $NO_3^-$  осуществляется за счет взаимодействия неподеленной пары атома кислорода  $NO_3^-$  и вакантной орбитали азота  $NO^+$ .

В. И. Барановский

1975

Х-2101-597

Ф 1976 №2

Окисел азота

1975

(I, эмпыкт. напач., I)

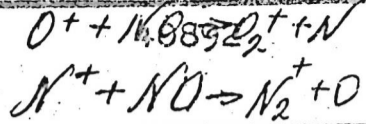
(0532p)

70592g Nitrogen oxides and oxvacids. Vosper, A. J.  
(Portsmouth Polytech., Portsmouth, Engl.). *MTP Int. Rev.*  
*Sci.: Inorg. Chem., Ser. Two* 1975, 2, 123-65 (Eng). Edited  
by Sowerby, D. B. Butterworth: London, Engl. A review with  
309 refs. on the structures, spectra, ionization potentials and  
electron affinities, reactions. and complexes of the title compds.

P. A. 1975. 83. NS

60326.9397

Gph, TC, Ch



1976

4175

Rutherford J. A., Vroom D.A.

Ion-molecule reactions of  $N^+$  and  $O^+$  with nitric oxide. "J. Chem. Phys.", 1976, 64, N 3, 1251-1252 (англ.)

0588

564 565

ВИНИТИ

60417.1951

TC, MGU, Ch

$O_2NO-H-ONO_2^-$

40771

1976

\* 4-12625

Williams Jack M., Dowling Noreen, Gundē R., Hadži D., Orel B. An x-ray diffraction and infrared-raman spectroscopic study of the hydrogen dinitrate ion,  $(O_2NO-H-ONO_2)^-$ , the cesium hydrogen dinitrate.

см. прод. 0807

"J. Amer. Chem. Soc.", 1976, 98, N 6,  
1581-1582 (англ.)

(N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>

фото-  
диссоц.

1978

9 Д428. Фотоиндуцированная колебательная предиссоциация ван-дер-ваальсовских молекул. Gough T. E., Miller R. E., Scoles G. Photo-induced vibrational predissociation of van der Waals molecules. «Adv. Laser Chem. Proc. Conf., Pasadena, 1978». Berlin e. a., 1978, 433—436 (англ.)

В области 2220—2216 см<sup>-1</sup> получена кривая эффективности фотодиссоциации димеров (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, образование которых происходило в сверхзвуковой струе. Возбуждение димеров осуществлялось лазером. Установлено, что возбуждение светом ~2233 см<sup>-1</sup> приводит к эффективной диссоциации ван-дер-ваальсовских молекул (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>, происходящей за время, меньшее 10<sup>-4</sup> сек. М. Т.

Ф. 1979/19

(N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>

DM-8794, XIII - 5594

1979

7 Б254. Интерпретация инфракрасного непрерывного спектра димера N<sub>2</sub>O и других ван-дер-ваальсовых комплексов при низких температурах. Bernstein L. S., Kolb C. E. Understanding the infrared continuum spectrum of the N<sub>2</sub>O dimer and other van der Waals complexes at low temperatures. «J. Chem. Phys.», 1979, 71, № 7, 2818—2823 (англ.)

И. К. Скелер

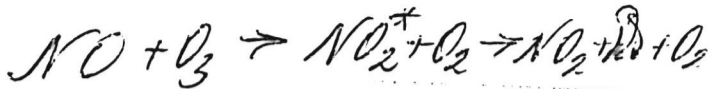
На основе модельного расчета интерпретирован непрерывный ИК-спектр полосы поглощения димера (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> в области 4,5 мкм, полученный ранее (Т. Е. Gough et al. «J. Chem. Phys.», 1978, 69, 1588) при измерениях с помощью диодного лазера с разрешением  $7 \cdot 10^{-4}$  см<sup>-1</sup>. Нижняя граница для вращательной т-ры (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> в эксперименте составляла приблизительно  $T \approx 10^\circ$  К. При этих условиях оценена т-рная зависимость формы полосы поглощения и плотности линий в полосе. Установле-

Х. 1980 № 7

но, что при вращательных и колебательных т-рах в диапазоне от 10 до 30 К плотность линий в полосе достигает величины порядка  $10^4$ — $10^5$  линий/см<sup>-1</sup>, что находится вне пределов разрешающей способности использованного лазерного спектрометра. Из полученных данных оценено время жизни преддиссоциации димера, равное приблизительно  $10^{-7}$  сек. Аналогичные оценки выполнены для других ван-дер-ваальсовых комплексов: AgN<sub>2</sub>O, AgOCS, AgClF, AgHCl, AgHF и (HF)<sub>2</sub>. С. Н. Мурзин







1980

Хемилумин.  
р-ция

4 Д822. Влияние поступательной и внутренней энергии на хемилуминесцентную часть экзотермической реакции  $\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2^* + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2 + h\nu + \text{O}_2$ . Influence of translational and internal energy upon the chemiluminescent part of the exothermic reaction  $\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2^* + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2 + h\nu + \text{O}_2$ . Van den Ende D., Stolte S. «Chem. Phys.», 1980, 45, № 1, 55—64 (англ.)

С помощью техники молекулярных пучков исследовалось влияние внутренней ( $E_v$ ) и поступательной энергии относительного движения ( $E_n$ ) на хемилуминесценцию в реакции  $\text{NO}$  с  $\text{O}_3$  для энергий, превышающих порог этой реакции. Поступательная энергия молекул  $\text{NO}$  изменялась в диапазоне 0,4—1,6 эв селектором скорости при постоянной внутренней т-ре пучка. Установле-



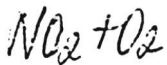
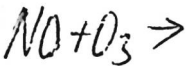
Ф. 1980 №4

но, что сечение исследуемого экзотермич. процесса сильно растет с увеличением  $E_{\text{п}}$  ( $\sigma_{\text{h}\nu} \sim E_{\text{п}}^{3,75}$ ), начиная с  $E_{\text{п}} = 1,2$  эв. Изучение влияния внутренней энергии молекул NO на интенсивность хемилюминесценции в этой реакции позволило получить зависимость сечения от т-ры ( $T_{\text{п}}$ ):  $\sigma_{\text{h}\nu} \sim [1 + \alpha(kT_{\text{п}}/E_{\text{пр}})]$ , где  $T_{\text{п}}$  — внутренняя т-ра пучка ( $T_{\text{п}} = 100 \div 300^\circ \text{K}$ ),  $E_{\text{пр}} = 0,129$  эв,  $\alpha = 4,5 \pm 0,5$  для  $E_{\text{п}} \sim 0,62 \div 0,84$ . Предполагая, что вращательная и электронная т-ры равны  $T_{\text{п}}$ , получили что  $(d\sigma_{\text{h}\nu}/d\bar{E}_{\text{в}})/(d\sigma_{\text{h}\nu}/d\bar{E}_{\text{п}}) = 4,5 \pm 0,5$  при  $E_{\text{п}} = 0,7$  эв. Делается вывод, что увеличение  $\bar{E}_{\text{в}}$  более эффективно усиливает хемилюминесценцию в видимой области, чем увеличение  $E_{\text{п}}$ .

В. В. Хмеленко

1980

PEAKYUR



95: 70220g Molecular beam chemiluminescence studies of the nitric oxide + ozone reaction and modeling of global monomeric nitrogen dioxide distribution. Kowalczyk, M. (Lawrence Berkeley Lab., California Univ., Berkeley, CA USA). Report 1980, LBL-12106, 133 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Energy Res. Abstr.* 1981, 6(9), Abstr. No. 12744. Thesis. The results of a crossed mol. beam study of the chemiluminescence reaction  $\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$  are discussed. The chemiluminescence as a function of collision energy and an excitation function were obtained using a translationally cooled supersonic NO beam. An

CAKMP

XENIUMOM.

CA 1981, 95, N 8

investigation into the role of the internal energy states using an effusive NO beam and a supersonic O<sub>2</sub> beam is presented. The results show that chemiluminescence enhancement occurs when high and low temp. NO expts. are compared. The role that other energy modes may have is discussed. The obsd. enhancement is consistent with the concept that the chemiluminescence cross section increases with NO mol. rotation for low *J* states. The role of NO<sub>2</sub> in preserving a global O<sub>3</sub> balance is discussed. NO<sub>2</sub> vertical profiles based on Noxon's (1979) column measurements were derived. The method of instantaneous rates was used to calc. the rate of O<sub>3</sub> prodn. and destruction by O<sub>1</sub> and NO<sub>x</sub> on a grid that covered the entire globe. The results are presented as a function of altitude and latitude in contour plots.

Окислы азота

1980

4 Б238. Колебательные спектры окислов азота. Characterization of nitrogen oxides by vibrational spectroscopy. Laane J., Ohlsen J. R. «Progr. Inorg. Chem. Vol. 27». New York e. a., 1980, 465—513 (англ.)

Обзор. Библ. 182.

Б. В. Л.

Колебат.  
спектры

(обзор)

Х. 1983, 19, N 4

$\text{NO}_x$  (окислы азота)

1980

93: 34036b Characterization of nitrogen oxides by vibrational spectroscopy. Laane, Jaan; Ohlsen, James R. (Dep. Chem., Texas A and M Univ., College Station, TX USA). *Prog. Inorg. Chem.* 1980, 27, 465-513 (Eng). A review with 182 refs.

(Li)

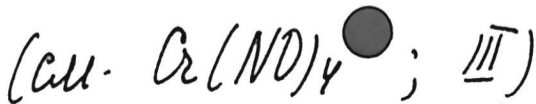
CA 1980.93 N4

1980



спектр.  
строение

Loubriel F.,  
" J. Vac. Sci. and Technol."  
1980, 17, N1, 169-171.



(N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>

1077246 10689

1980

94:199378m Vibrational predissociation of the van der Waals dimeric nitrous oxide molecule. Morales, Daniel A.; Ewing, George E. (Dep. Chem., Indiana Univ., Bloomington, IN 47405 USA). *Chem. Phys.* 1980, 53(1-2), 141-7 (Eng).  
The lifetimes for predissocn. of the vibrationally excited van der Waals mol. (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> were calcd. through different possible processes and compared with the values obtained exptl. The vibration-vibration channel is the most efficient for predissocn. of the dimer and that the transfer occurs through a dipole-dipole coupling mech.

нрзгук  
сбгуау

C.A. 1981, 94, N24



$N_2O_6$

1981

7 Б41. Квантовохимический расчет конформаций молекулы  $N_2O_6$  методом МЧПДП/3. Глорнозов И. П., Хаджи-Оглы М. Р., Ягодковская Т. В., Некрасов Л. И. «Ж. физ. химии», 1981, 55, № 12, 3086—3088

Кв. мех.  
расчет

Методом МЧПДП/3 рассчитаны полная электронная энергия, теплота образования и геометрич. структура молекулы  $N_2O_6$ . Расчет проводился с полной оптимизацией всех валентных углов и связей для плоской и неплоской моделей по критерию минимума полной электронной энергии. Показана принципиальная возможность существования молекулы  $N_2O_6$  с неплоской структурой, выбрана оптим. конфигурация и оценена теплота ее образования. По резюме

X. 1982, 19, N 7.

$(NO)_3$

1981

Linn S. H., et al.

J. Chem. Phys, 1981,  
74, N 6, 3372-3374.

М. Гусев,  
фотохимия.

● (сер.  $(CO)_2$ ; III)

$(N_2O)_2$

1981

Linn S. M., et al.

J. Chem. Phys. 1981,  
75 (10), 4921-4926.

I.P.

●  
(cell.  $(CO)_n$ ; I)

$N_2 O^+ \cdot N_2 O$

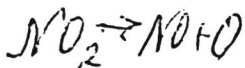
1981

Linn S. M., et al.

группа  
иониза-  
ции

J. Chem. Phys., 1981,  
75, N 10, 4921-4926.

(см.  $(CO_2)_2$ ; III)



Оттиски 11217

1981

8 Д591. Лазерная фотофрагментная спектроскопия молекулы  $\text{NO}_2$ , диссоциирующей при 337 нм. Нестатистические процессы распада. Laser photofragment spectroscopy of the  $\text{NO}_2$  dissociation at 337 nm. A nonstatistical decay process. Zacharias H., Geilhaupt M., Meier K., Welge K. H. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 1, 218—225 (англ.)

Методом лазерной фотофрагментной спектроскопии исследована динамика фотодиссоциации молекулы  $\text{NO}_2$  на  $\text{NO}$  ( $X^2\Pi_{1/2,3/2}; -v, J$ ) +  $\text{O}$  ( $^3P_{0,1,2}$ ) при длине волны 337 нм ( $\text{N}_2$ -лазер). Распределения электронной, колебательной и вращательной энергий возбуждения радикала  $\text{NO}$  ( $X^2\Pi$ ) получены в результате анализа спектра индуцированной лазером флуоресценции  $\text{NO}$  ( $A-X$ ). Колебательные и вращательные заселенности значительно отклоняются от равновесных, что указывает на нестатистич. механизм распада. Так, избыточная энергия, равная  $4842 \text{ см}^{-1}$ , распределяется следующим образом: 30% — кинетич. энергия фотофрагментов, 70% — внутренней энергии радикала  $\text{NO}$ . При этом отношение величины колебательной энергии к вращательной составляет 3:1, а заселенность колебательных уровней  $v=0, 1, 2$  имеет инверсный характер. Библиограф. 23. В. А. Е.

Лазерная  
фотофрагментная  
спектроскопия

Ф 1981 N 8

$N_2O_6$

1982

12 Д106. Расчет частот и форм нормальных колебаний молекул  $N_2O_6$ . Хаджи-Оглы М. Р., Ягодовская Т. В., Некрасов Л. И. «Ж. физ. химии», 1982, 56, № 9, 2356—2357.

Проведен расчет частот и форм норм. колебаний плоской и неплоской структур молекулы  $N_2O_6$ . Геометрия  $N_2O_6$  выбрана по данным квантовохимич. расчета. Получено хорошее согласование расчета с эксперим. данными, на его основе проведена идентификация молекулы  $N_2O_6$  по связям  $NO'$  и  $O'O'$ . Резюме

геометр.,  
структ.,  
v<sub>i</sub>;

сп. 1982, 18, 1112

$N_2O_6$

1982

$\nu_2$ ,  $\nu_3$ ,  $\nu_4$ ,  $\nu_5$ ,  $\nu_6$ ,  $\nu_7$ ,  $\nu_8$ ,  $\nu_9$ ,  $\nu_{10}$ ,  $\nu_{11}$ ,  $\nu_{12}$ ,  $\nu_{13}$ ,  $\nu_{14}$ ,  $\nu_{15}$ ,  $\nu_{16}$ ,  $\nu_{17}$ ,  $\nu_{18}$ ,  $\nu_{19}$ ,  $\nu_{20}$ ,  $\nu_{21}$ ,  $\nu_{22}$ ,  $\nu_{23}$ ,  $\nu_{24}$ ,  $\nu_{25}$ ,  $\nu_{26}$ ,  $\nu_{27}$ ,  $\nu_{28}$ ,  $\nu_{29}$ ,  $\nu_{30}$ ,  $\nu_{31}$ ,  $\nu_{32}$ ,  $\nu_{33}$ ,  $\nu_{34}$ ,  $\nu_{35}$ ,  $\nu_{36}$ ,  $\nu_{37}$ ,  $\nu_{38}$ ,  $\nu_{39}$ ,  $\nu_{40}$ ,  $\nu_{41}$ ,  $\nu_{42}$ ,  $\nu_{43}$ ,  $\nu_{44}$ ,  $\nu_{45}$ ,  $\nu_{46}$ ,  $\nu_{47}$ ,  $\nu_{48}$ ,  $\nu_{49}$ ,  $\nu_{50}$ ,  $\nu_{51}$ ,  $\nu_{52}$ ,  $\nu_{53}$ ,  $\nu_{54}$ ,  $\nu_{55}$ ,  $\nu_{56}$ ,  $\nu_{57}$ ,  $\nu_{58}$ ,  $\nu_{59}$ ,  $\nu_{60}$ ,  $\nu_{61}$ ,  $\nu_{62}$ ,  $\nu_{63}$ ,  $\nu_{64}$ ,  $\nu_{65}$ ,  $\nu_{66}$ ,  $\nu_{67}$ ,  $\nu_{68}$ ,  $\nu_{69}$ ,  $\nu_{70}$ ,  $\nu_{71}$ ,  $\nu_{72}$ ,  $\nu_{73}$ ,  $\nu_{74}$ ,  $\nu_{75}$ ,  $\nu_{76}$ ,  $\nu_{77}$ ,  $\nu_{78}$ ,  $\nu_{79}$ ,  $\nu_{80}$ ,  $\nu_{81}$ ,  $\nu_{82}$ ,  $\nu_{83}$ ,  $\nu_{84}$ ,  $\nu_{85}$ ,  $\nu_{86}$ ,  $\nu_{87}$ ,  $\nu_{88}$ ,  $\nu_{89}$ ,  $\nu_{90}$ ,  $\nu_{91}$ ,  $\nu_{92}$ ,  $\nu_{93}$ ,  $\nu_{94}$ ,  $\nu_{95}$ ,  $\nu_{96}$ ,  $\nu_{97}$ ,  $\nu_{98}$ ,  $\nu_{99}$ ,  $\nu_{100}$ .

97: 190618f Calculation of frequencies and forms of normal vibrations of a nitrogen oxide ( $N_2O_6$ ) molecule. Khadzi-Ogly, M. R.; Yagodovskaya, T. V.; Nekrasov, I. I. (Khim. Fak., Mosk. Univ., Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1982, 56(9), 2356-7 (Russ). A calcn. was conducted of the frequencies and shape of normal vibrations of planar and nonplanar structure of  $N_2O_6$  mols. The geometry of  $N_2O_6$  was chosen according to data from quantum classical calcns. Good agreement was obtained of the calcns. with exptl. data and on this basis an identification was conducted of  $N_2O_6$  mols. according to bonding  $NO$  and  $O'O$ .

c.A. 1982, 97, w22



$N_2O_4 + NO$   
(смесь)

1983

) 3 Л158. Спектр поглощения жидкой смеси  $N_2O_4$  и  $NO$  в ближней ИК-области. Гришук М. Х., Курганова Ф. И. «Весті АН БССР. Сер. фіз.-энерг. н.», 1983, № 4, 35—38 (рез. англ.)

Исследованы спектры поглощения в ближней ИК-области ( $8000-5000 \text{ см}^{-1}$ ) жидкой смеси  $N_2O_4$  и  $NO$  в пределах т-р  $20-70^\circ \text{C}$ . Дано отнесение полос поглощения.

Автореферат

di;

ср. 1984, 18, N 3



№

Am. 18093

1983

структура,  
спектр,  
лазерная  
спектроскопия.

Hirota E.,  
J. Phys. Chem.,  
1983, 87, N 18,  
3375-3383.

Оксид азота

1983

20 Б173. Инфракрасные спектры поглощения оксидов 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. «J. Chem. Phys.», 1983, 78, № 6, Pt 1, 2928—2941 (англ.)

ИК спектры  
поглощения

Изучены ИК-спектры поглощения (область 250—4000  $cm^{-1}$ ) р-ров NO (I) и  $NO_2$  (II) в жидк. Xe при различных т-рах ( $T=160—220$  K). Анализ спектров показал, что в р-рах присутствуют I, II,  $(NO)_2$  (III),  $N_2O_4$  (IV) и  $N_2O_3$  (V). Произведено отнесение полос к различным колебаниям I—V. Оценено содержание I, II и IV в р-рах. Отмечено присутствие в р-рах одновременно симметричного и асимметричного изомеров V. По т-рной зависимости отн. интенсивностей полос поглощения различных изомеров разность энергии изомеров оценена в  $1,8 \pm 0,2$  ккал/моль. А. В. Бобров.

X. 1983, 19, № 20

$(N_2O)_n$   
 $2 \leq n \leq 7000$

Келатин

1983

10 Б1120. Масс-спектрометрическое определение размеров кластеров  $N_2O$ . Mass spectrometric size analysis of  $N_2O$ -clusters. Echt O., Knapp M., Sattler K., Resknagel E. «Z. Phys.», 1983, B53, № 1, 71—74 (англ.)

На времяпролетном масс-спектрометре исследована зависимость распределения размеров кластеров  $(N_2O)_n$  ( $2 \leq n \leq 7000$ ), образующихся при истечении газа  $N_2O$  (давл. 100—10 000 мбар) через капилляр (диам. 0,2 мм, длина 20 мм, т-ра 215 К) от давл.  $N_2O$  на входе в капилляр. Прослежен переход от режима последовательной конденсации молекул мономера (приблизительно экспоненциально спадающее с ростом  $n$  распределение получающихся при ионизации электронным ударом ионов  $(N_2O)_n^+$ , давл. до 400 мбар) к режиму слияния кластеров (одномодальное распределение, отсутствие кластеров с малыми  $n$ ). В переходном режиме наблюдалось бимодальное распределение. Описаны меры, принятые для уменьшения дискриминационных эффектов в масс-спектре. Приведены распределения радиусов ионов кластеров и полученные из них распределения размеров нейтралей, а также зависимости средних значений  $n$  ионов и нейтралей от давления. Д. В. Чеховской

Х. 1984, 19,  
N 10

Окислы азота

1984

101:119640c Vibrational spectroscopy of nitrogen oxides.  
Chen, Li Heng (Texas A and M Univ., College Station, TX USA).  
1983. 89 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No.  
DA8408413. From *Diss. Abstr. Int. B* 1984, 45(1), 204-5.

(Vi)

C.A. 1984, 101, N14

(NO)<sub>3</sub><sup>+</sup>

1984

3-Д293. — Динамика фотодиссоциации ионов-кластеров. II. Фотодиссоциация (NO)<sub>3</sub><sup>+</sup> кластеров в видимой области длин волн. The dynamics of photodissociation of cluster ions. II. Photodissociation of the (NO)<sub>3</sub><sup>+</sup> cluster in the visible wavelength range. Jarrold Martin F., Illies Andreas J., Bowers Michael T. «J. Chem. Phys.», 1984, 81, № 1, 222—230 (англ.)

Методом скрещенных высокоэнергетического ионного и лазерного пучков исследована динамика фотодиссоциации ионов-кластеров (NO)<sub>3</sub><sup>+</sup> в видимой области спектра с длиной волны в пределах 460—660 нм. Измерены полные сечения фотодиссоциации, отношение вероятностей распада на различные продукты, распределения продуктов по кинетич. энергии и их угловые распределения. Полное сечение имеет максимум, превышающий величину  $5 \cdot 10^{-17}$  см<sup>2</sup> в КВ-углу исследованной части спектра. Продуктами распада являются ионы  
(ан)

фотодиссо-  
циация

ср. 1985, 18, N3

$\text{NO}^+$  и  $(\text{NO})_2^+$ , причем доля ионов  $(\text{NO})_2^+$  составляет  $26 \pm 4\%$  независимо от длины волны излучения. Распределение по кинетич. энергии продуктов для  $(\text{NO})_2^+$  является узким и характерным для диссоциации, происходящей на отталкивательной части поверхности потенц. энергии. Доля полной поглощенной энергии, переходящая в кинетич. энергию, при длине волны в 610 нм составляет 24%, причем эта величина возрастает до значения 32% при уменьшении длины волны до 488 нм. Угловое распределение ионов  $(\text{NO})_2^+$  хорошо описывается ф-цией вида  $1 + \beta P_2(\theta)$  с  $\beta = 1,5$ , что свидетельствует о том, что диссоциация происходит за время малое в сравнении с периодом вращения кластера. Основную роль в динамике играют ограничения, связанные со стабильностью продуктов, поэтому при распаде на  $(\text{NO})_2^+$  происходит эффективное перераспределение полученной энергии во внутренние степени свободы нейтральной молекулы  $\text{NO}$ . Распределение по кинетич. энергии для  $\text{NO}^+$  является бимодальным при высоких энергиях фотонов, что свидетельствует о двух механизмах его образования: прямого и через образование промежуточного комплекса. Ч. 1. см. «J. Chem. Phys.», 1983, 79, 6086.

А. А. Зембеков

$\text{NO}_5$

1984

Kleier Daniel A.,  
Lipton Mark A.

расчёт  
структуры.

J. Mol. Struct., 1984,

109, N1-2, Suppl.:

Theochem, 18, N1-2, 39-

-49.

(ср.  $\text{BH}_2\text{NO}_2$ ; III)

$(N_2O)_n$

От 18293

1984

9 Б1110. Спектры колебательной преддиссоциации кластеров закиси азота. Vibrational predissociation spectra of nitrous oxide clusters. Miller R. E., Watts R. O., Ding A. «Chem. Phys.», 1984, 83, 155—169 (англ.)

Исследованы спектры колебательной преддиссоциации кластеров  $(N_2O)_n$  в сверхзвуковом мол. пучке под действием излучения лазера на центрах окраски (область поглощения полосы  $\nu_1 + \nu_3$  мономера  $N_2O$ ). Описана схема установки. Для регистрации использовали охлаждаемый жидк. гелием болометр и времяпролетный

Колебательная  
преддиссоциация



X. 1984, 19, N 9



квадрупольный и ионный масс-спектрометр. Давление газа в источнике достигало 3500 кПа, содержание  $N_2O$  в He составляло 15 и 45%. По мере увеличения давления в источнике вид спектра ИК-преддиссоциации меняется, т. к. увеличивается доля кластеров с большими значениями  $n$  ( $n \leq 160$ ). При больших давлениях в спектре наблюдается пик, положение к-рого близко к положению соотв. полосы в спектре кристалла. Отмечается, что даже для больших кластеров, таких как  $(N_2O)_{100}$ , время колебательной преддиссоциации меньше  $10^{-4}$  с. Основной источник уширения линий — неоднородные эффекты, напр., вращение и распределение по внутренним колебательным состояниям. Судя по спектрам, первые признаки появления тв. фазы наблюдаются между  $(N_2O)_{20}$  и  $(N_2O)_{60}$ . Это согласуется с полукласич. статистич. модельными расчетами (метод Монте — Карло), согласно к-рым такой переход должен наблюдаться при  $n=55$ . Полученные результаты сопоставляются со спектрами колебательной преддиссоциации  $(CO_2)_n$ .

В. М. Ковба



вращающ.  
структ.  
в ИК спектре

1984  
Miller R.E., Watts

R.O.

Chem. Phys. Lett.  
1984, 105(4), 409-13.

(сер.  $(CO_2)_2$ ; III)

N-0

Ommuck 18775

1984

Zhixing C.,

неоп.  
расем  
неприм  
св.е.е

J. Mol. Struct., 1984,  
108, N1-2, suppl. ;  
"Theochem", 17, N1-2, 139 -  
147. ●

N-O

связь

1985

8 Б1162. Эмпирическая корреляция между силовой постоянной связи и порядком связи для системы азот—кислород. Empirical correlation between the stretching force constant and the bond order for nitrogen—oxygen systems. Hase Yoshiyuki. «Monatsh. Chem.», 1985, 116, № 11, 1305—1307 (англ.; рез. нем.)

Получено эмпирич. соотношение между силовой постоянной связи N—O (силовое поле Юри—Бредли),  $K$ , и порядком связи (метод МПДП, Tetrahedron», 1968, 24, 1083),  $P$ , в ионах  $\text{NO}^+$ ,  $\text{NO}^-$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_2^+$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NO}_4^{3-}$  и молекулах  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$  —  $K$  (мдн/А) =  $= 11,791 \cdot P - 9,565$ . В. М. Ковба

X. 1986, 19, N 8

N-O

1985

104:58539q Empirical correlation between the stretching force constant and the bond order for nitrogen-oxygen systems. Hase, Yoshiyuki (Inst. Quim., Univ. Estad. Campinas, 13100 Campinas, Brazil). *Monatsh. Chem.* 1985, 116(11), 1305-7. (Eng). The stretching force const. correlates satisfactorily with the Wiberg's bond order,  $K(\text{N-O}) = 11.791 [p(\text{N-O})]^{-9.565}$ , with a correlation coeff. of 0.958, for N-O systems.

$K$  (cm<sup>-1</sup>·nm)

c. A. 1986, 104, 48

$\text{NO}^+(\text{N}_2)_n$

$n=1, 2$

структура,  
геометрия

OM 21784 1985

22 Б1087. Неэмпирическое исследование образования и структуры кластеров  $\text{NO}^+(\text{N}_2)_n$  ( $n=1$  и  $2$ ). An ab initio study of the formation and structure of  $\text{NO}^+(\text{N}_2)_n$  ( $n=1$  and  $2$ ) clusters. Nguyen Minh Tho. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 6, 571—576 (англ.)

Неэмпирически с оптимизацией геометрии в базисе 4-31 ГФ исследовано образование кластеров  $\text{NO}^+\cdot\text{N}_2$  (I) и  $\text{NO}^+(\text{N}_2)_2$  (II). Разности энергий для определения профиля р-ции образования I и стабильности II рассчитаны в базисах 6-31 ГФ и 6-31 ГФ\* с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллер—Плессета 4 порядка и с использованием геометрий, оптимизированных в базисе 4-31 ГФ. Оптимальная конформация I с  $R(\text{N}=\text{O})=0,1049$  нм,  $R(\text{N}\equiv\text{N})=10,85$  нм и  $\text{O}=\text{N}\dots\text{N}=100,5^\circ$ ,  $\text{N}\equiv\text{N}\dots\text{N}=172,4^\circ$  при  $R(\text{N}\dots\text{N})=0,2618$  нм отвечает расположению молекул в одной плоскости. В II две величины отличны от I:  $R(\text{N}\dots\text{N})=0,2660$  нм и  $\text{O}=\text{N}\dots\text{N}=98,5^\circ$ , симметрия  $\text{C}_{2v}$ . Приведены моменты инерции, вращат. постоянные и колебат. частоты I и II, энтропии и энергии образования на разных уровнях расчета.

В. А. Болотин

x. 1985, 19, n22

$\text{NO}^+ \cdot (\text{N}_2)_n$   
( $n=1,2$ )

DM 21784

1985

10 Д149. Неэмпирическое изучение образования и структуры кластеров  $\text{NO}^+ \cdot (\text{N}_2)_n$  ( $n=1,2$ ). An ab initio study of the formation and structure of  $\text{NO}^+ \cdot (\text{N}_2)_n$  ( $n=1$  and 2) clusters. Nguyen Minh Tho. «Chem. Phys. Lett.», 1985, 117, № 6, 571—576 (англ.)

С помощью неэмпирич. методов рассчитаны структуры и энергии кластеров  $\text{NO}^+ \cdot (\text{N}_2)_n$  ( $n=1,2$ ). Применялись методы, описанные ~~в работах~~ (Ditchfield R. et al. «J. Chem. Phys. (1971), 54, 724»; Krishnan R. et al. «J. Chem. Phys.», (1980, 72, 4244)). Разности энергий кластеров и соответствующих фрагментов составляют  $-5,3$  и  $-4,1$  ккал/моль для  $n=1$  и 2 соответственно. Эти величины хорошо согласуются с экспериментальными. Рассчитано взаимодействие между  $\text{NO}^+$  и молекулами  $\text{N}_2$  в зависимости от углов и расстояний. Приведены также данные о величинах моментов инерции, вращательных констант, силовых постоянных и колебательных частот кластеров. Проведены расчеты распределения заряда в кластерах и энтропий образования кластеров. Рассмотренные кластеры играют роль в формировании ионного состава D-области ионосферы и могут наблюдаться в плотных межзвездных облаках.

Г. К.

см. пост.  
М. П., Vi)

ф. 1985, 18,  
N10

(NaD)<sub>2</sub>

[om. 22 664]

1985

Sodeau J.R., Withnall R.,

Di,  
спектр;  
лампца.

J. Phys. Chem., 1985,  
89, N 21, 4484-4488.



ОН<sub>4</sub>

1986

Барановский В.И.,

Сизова Д.В. и др.,

Исследование структуры и

ав initio энергетика молекул.

расчеты

Межвузовский сборник науч-  
ных трудов Ивановского Хи-  
мико-технологич. института,  
Ивано<sup>во</sup>, 1986,

34-39. (есть в картотеке) 39

$(\text{N}_2\text{O})_2$

(Im. 23540)

1986

104: 158697h Negative ion photoelectron spectroscopy of oxodinitrate(1-) ( $\text{N}_2\text{O}^-$ ) and nitrous oxide dimer ion(1-) ( $(\text{N}_2\text{O})_2^-$ ). Coe, J. V.; Snodgrass, J. T.; Freidhoff, C. B.; McHugh, K. M.; Bowen, K. H. (Dep. Chem., Johns Hopkins Univ., Baltimore, MD 21218 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 124(3), 274-8 (Engl.). The photoelectron spectra were recorded for the gas phase neg. ions  $\text{N}_2\text{O}^-$  and  $(\text{N}_2\text{O})_2^-$  both of which were prepd. in a nozzle ion source. The shift between the max. of the 2 spectra is interpreted in terms of the dissozn. energy of the dimer ion.

(Do)

C. A. 1986, 104, N 18.

Крамерс

1986

$(\text{N}_2\text{O})_n$  Kondow Tamotsu.

Electron. At. Collisions,

Invited Pap. Int. Conf.

Ae; Phys. Electron. At. Collisions,  
14th 1985 (Pub. 1986),  
517-28. ●

(see. Крамерс  $(\text{CO}_2)_n$ ; III)

$(\text{NaO})_2$

(om. 24632)

1986

Miller R. E.

дублю-  
графия  
по  
спектро-  
скопии

J. Phys. Chem., 1986,  
90, N 15, 3301 - 3313.


$(\text{NaCl})_2$

1986

Spackman Mark A.

теорет.  
расчет  
водородн.  
связи,  
сест. носей.,  
vi;

J. Chem. Phys, 1986,  
85 (11), 6587-6601.

 (сест.  $(\text{HF})_2$ ; iii)

(Dm. 29088)

1987

$\text{NO}^-(\text{N}_2\text{O})_{n=1,2}$

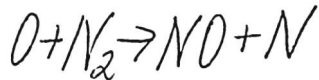
Loe J.V., Snodgrass J.T.  
et al.,

оромо-  
нехромит.  
снелмр

J. Chem. Phys., 1987,  
27, N 8, 4302-4304.

[om. 27 813]

1987



Walch S.P., Jaffe R.H.,

номерус.  
номерхн.  
номер.  
номер

J. Chem. Phys.,

1987, 86, N12,

6946 ● - 6956.



1987

Walch S.P., Tappe R.L.,

по методу  
поверхности,  
теорет.  
расчет

J. Chem. Phys.,  
1987, 86, N12,

6946 - ● 6956.



(NO)п

(DM-27893)

1987

Вигасин А. А.,

Структура,  
Di сел.  
ност.  
(обзор)

Ж. структур. химии,  
1987, 28, №, 120-147.

$N_2O_x$

$x = 1-5$

М.П.

Х. 1989, №3

(71)

$P_2O_x$

$x = 1-5$

1988

3 Б1025. Теоретическое исследование структуры и стабильности биядерных оксидов азота и фосфора / Чабан Г. М., Клименко Н. М., Чаркин О. П. // Строение и свойства молекул.— Иваново, 1988.— С. 20—31.— Рус.

Выполнены неэмпирич. расчеты наиболее интересных участков потенциальных Пв в окрестности различных альтернативных изомеров у серий молекул биядерных оксидов азота  $N_2O_x$  и фосфора  $P_2O_x$ , где  $x = 1-5$ . Определены равновесные геометрич. параметры основных и возбужденных изомеров, оценены их относит. энергии для каждой молекулы этих серий. Выяснено, какие изомеры энергетически наиболее выгодны и какие намного нестабильнее пр. Прослежены тенденции изменения геометрич. параметров и  $x$ -к электронной структуры оксидов при изменении  $x$  от 1 до 5 и при переходе от  $N_2O_x$  к  $P_2O_x$ . Проанализировано, как меняется относит. положение альтернативных изомеров на энергетич. шкале при переходе от  $N_2O_x$  к  $P_2O_x$ . Из резюме

$N_2O_x$

1988

2 Д48. Теоретическое исследование структуры и стабильности биядерных оксидов азота и фосфора / Чабан Г. М., Клименко Н. М., Чаркин О. П. // Структура и свойства молекул.— Иваново, 1988.— С. 20—31

Проведены неэмпирич. расчеты некоторых участков потенц. поверхностей в окрестности различных альтернативных изомеров у серий молекул биядерных оксидов азота  $N_2O_x$  и фосфора  $P_2O_x$  ( $1 \leq x \leq 5$ ). Определены равновесные геометрич. параметры основных и возбужденных изомеров; оценены относит. энергии для каждой молекулы серии.

М.П.

(4) [X]



ср. 1989, №2

$(\text{N}_2\text{O})_2$

От. 29818 1988

24 Б1394. Спектры и структура димеров и кластеров закиси азота. Spectra and structure of nitrous oxide dimers and clusters. Gauthier M. «J. Chem. Phys.», 1988, 88, № 9, 5439—5449 (англ.)

На ИК-фурье-спектрометре в обл. частот 500—4000  $\text{см}^{-1}$  с точностью 0,2  $\text{см}^{-1}$  с использованием сверхзвуковой молек. струи измерены спектры поглощения димера  $(\text{N}_2\text{O})_2$  и кластеров закиси азота. Анализ спектров выполнен вблизи полос  $\nu_2$ ,  $2\nu_2$ ,  $\nu_1$ ,  $\nu_3$ ,  $\nu_1+2\nu_2$ ,  $2\nu_1$ ,  $\nu_2+\nu_3$  и  $\nu_1+\nu_3$  мономера  $\text{N}_2\text{O}$ . Для димера были зарегистрированы вблизи  $\nu_1$  и  $\nu_3$  две полосы 1282,4 и 2222,8  $\text{см}^{-1}$  и для кластера семь полос 1165,1; 1295,2; 2245,6; 2467,4; 2578,3; 2811,7 и 3505,8  $\text{см}^{-1}$ . Измерены ширины и сдвиг полос димера и кластеров относительно спектра мономера. Обсуждены с учетом спектроскопич. данных возможные механизмы образования димеров и кластеров.

С. Н. Мурзин

М.П.

Х: 1988, № 24

$(N_2O)_2$

Om. 29818

1988

(Pi)

/ 109: 29298h Spectra and structure of nitrous oxide dimers and clusters. Gauthier, Michel (Div. Chem., Natl. Res. Council, Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Chem. Phys.* 1988, 88(9), 5439-49 (Eng). Supersonic expansions of  $N_2O$  seeded in Ar were studied by single pass FTIR absorption at right angles with the jet axis. In dil. mixts., 0.2%  $N_2O$ ,  $(N_2O)_2$  bands at 1282.4 and 2228.9  $cm^{-1}$  were obsd. corresponding to the  $\nu_1$  and  $\nu_2$  stretches of  $N_2O$ .  $(N_2O)_2$  bands (due to clusters of undetd. size) were readily obsd. in 20-100%  $N_2O$  mixts. at 1165.1, 1295.2, 2245.6, 2457.4, 2578.2, 2811.7, and 3505.8  $cm^{-1}$ . All bands are shifted from the corresponding  $N_2O$  bands more than in the crystal and in the same direction. Changing the diln. from 10 to 20% shifted all cluster bands 1-3  $cm^{-1}$  towards low frequencies but still far away from the crystal frequencies. This is probably due to cluster melting. No increase in bandwidth is assocd. with the shifts, indicating that, if present at all, the coexistence region described by R. S. Berry et al. (1984) is rather limited in  $N_2O$  clusters.

C.A. 1988, 109, NY

1988



Gutowski Maciej,  
Simons Jack, et al.

meoprem. J. Phys. Chem., 1988,  
pacrëm 92 (22), 6179-82.

(cer.  $\text{H}_3\text{CH}_2^-$ ; III)

$O_3^- (N_2)_n$

$$n = 1 \div 5$$

$O_4^- (N_2)_n$

стабильно  
то смб

(Dm. 30990)

1988

Miraoka K.,

Chem. Phys. 1988,

125, N2-3, 439-444.

(Kad)a

DM 31023

1988

5 Л141. Строение димеров окиси азота по данным ИК-спектроскопии с субдоплеровским разрешением. The structure of the nitrous oxide dimer from sub-Doppler resolution infrared spectroscopy / Huang Z. S., Miller R. E. // J. Chem. Phys.— 1988.— 89, № 9.— С. 5408—5416.— Англ.

На фоне перестраиваемого по частоте ИК-лазера получены спектры поглощения димеров газообразных молекул  $N_2O$  (I) и их изотопич. аналогов в молекулярном пучке. Идентифицированы компоненты вращательной структуры ИК-полос I. Отмечены корреляции параметров ИК-полос димеров и ИК-полосы сложного колебания  $\nu_1 + \nu_3$  мономеров I. Рассчитаны молекулярные постоянные в основном и колебательно-возбужденном состояниях I. Определены параметры равновесной геометрич. структуры димеров, обладающих центром симметрии. Расстояние между молекулами в димере и угол между осью молекулы и осью димера I равны  $3,493(4)$  Å и  $59,2(5)^\circ$  соответственно. Библ. 41. И. В. А.

М. А.

ср. 1989, № 5



$(N_2O)_n$

[om. 30 555]

1988

Di, UK  
срелкрп,  
до  
(обзор)

Nesbitt A. J.,

Chem. Rev. 1988, 88,  
N 6, 843-870.



$(N_2O)_2$

1988

7 Л132. Абсорбционная ИК-спектроскопия ван-дер-ваальсовских комплексов  $(N_2O)_2$  в сверхзвуковой струе. Free-Jet infrared absorption spectroscopy of the van der Waals complex  $(N_2O)_2$  / Ohshima Yasuhiro, Matsumoto Yoshiyasu, Takami Michio, Kuchitsu Kozo // Рэдза кагаку кэнкю=Laser Sci. Prog. Rept IPCR.— 1988— № 10.— С. 8—10.— Яп.; рез. англ.

Колебательно-вращательный спектр ван-дер-ваальсовских комплексов  $(N_2O)_2$  в области мономерной полосы  $\nu_1$  ( $\sim 1280 \text{ см}^{-1}$ ) исследован методом абсорбционной спектроскопии в сверхзвуковой струе. Выполнен анализ спектра. В приближении жесткого ротатора определены вращательные постоянные комплекса.

В. С. Иванов

М.И.

ср. 1989, № 7

(N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>

1988

№ 12 Б1206. Инфракрасная спектроскопия поглощения вандерваальсова комплекса (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> в свободной струе. / Ohshima Y., Matsumoto Y., Takami M., Kuchitsu K. // Рэдза кагаку кэнкю=Laser Sci. Prog. Rept Iprc.— 1988.— № 10.— С. 8—10.— Яп., рез. англ.

В диапазоне 1276—1283 см<sup>-1</sup> (обл. полосы  $\nu_1$ N<sub>2</sub>O) методом диодной лазерной спектроскопии измерен колебательно-вращат. спектр поглощения вандерваальсовых комплексов (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> образующихся в сверхзвуковой струе. Анализ вращат. структуры выполнен в предположении, что комплекс имеет плоское строение. Значение рассчитанных молек. постоянных (в см<sup>-1</sup>):  $\nu_0 = 1279, 7107, A' = 0,29824, B' = 0,06005, C' = 0,04990, A'' = 0,29922, B'' = 0,05999, C'' = 0,04988$ . Рассмотрены две возможные структуры с параллельной ориентацией в противоположных направлениях фрагментов ONN. Расстояние между центр. атомами азота во фрагментах составляет в основном состоянии 3,419 А, в верхнем колебат. состоянии — 3,416 А. Угол между этим направлением и осями ONN фрагментов составляет в обеих состояниях 61,2° (или 118,8°). В. М. Ковба

М.М.

х. 1989, N 12

$(N_2O)_2$

1988

110: 201881b Free-jet infrared absorption spectroscopy of the van der Waals complex nitrous oxide dimer. Ohshima, Yasuhiro; Matsumoto, Yoshiyasu; Takami, Michio; Kuchitsu, Kozo (Coll. Sci., Tokyo Univ., Tokyo, Japan). *Reza Kagaku Kenkyu* 1988, 10, 8-10 (Japan). The vibrational-rotational spectrum of the  $(N_2O)_2$  van der Waals complex was measured in the monomer  $\nu_1$  region ( $\sim 1280\text{ cm}^{-1}$ ) by free-jet IR spectroscopy. The spectrum revealed the features of a hybrid band and was assigned and analyzed by assuming the slipped parallel geometry of the complex. Rotational consts. and the band origin were detd. under a rigid-rotor approxn.

(UK, GRA -  
USAM. NOCM)

C.A. 1989, 110, N22

(№ 2)

DM 31378

1988

9 Б1335. Инфракрасная спектроскопия поглощения в области 8 мкм вандерваальсова комплекса  $(N_2O)_2$  в сверхзвуковом потоке. Free-jet infrared absorption spectroscopy of the  $(N_2O)_2$  van der Waals complex in the 8  $\mu m$  region / Ohshima Y., Matsumoto Y., Takami M., Kuchitsu // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 152, № 4—5.— С. 294—298.— Англ.

С использованием перестраиваемого диодного лазера с высоким разрешением измерены спектры поглощения вандерваальсового комплекса  $(N_2O)_2$ , образующегося в импульсном сверхзвуковом потоке при расширении смеси  $N_2O$  (5—15%) с Ar. Разрешена колебательно-вращат. структура полосы димера в обл. полосы  $\nu_1$  мономера. Идентифицировано 30 переходов  $a$ -типа и 102  $b$ -типа с  $K_a < 6$  и  $l < 13$ . Вычислены спектроскопич. постоянные для основного и возбужденного состояний димера ( $cm^{-1}$ ):  $\nu_0 = 1279,7107$  (6),  $A' =$

М.П.

X. 1989, № 9

$=0,29824$  (7),  $B' = 0,06005$  (4),  $C' = 0,04990$  (3),  $\Delta' =$   
 $=0,58$  (22),  $A'' = 0,29922$  (7),  $B'' = 0,05999$  (4),  $C'' =$   
 $=0,04988$  (4),  $\Delta'' = 0,62$  (21). Из полученных значений  
рассчитаны эфф. структурные параметры димера, для  
к-рого принята центросимм. структура со сдвинутыми  
параллельными фрагментами  $N_2O$ . Нижний предел вре-  
мени жизни колебат. преддиссоциации оценен в  $10^{-9}$  с.  
С. Б. Осин



$(N_2O)_2$

(DM 31378) 1988

4 Л208. ИК адсорбционная спектроскопия в области 8 мкм ван-дер-ваальсовых комплексов  $(N_2O)_2$  в сверхзвуковой струе. Free-jet infrared absorption spectroscopy of the  $(N_2O)_2$  van der Waals complex in the 8  $\mu m$  region / Ohshima Yasuhiro, Matsumoto Yoshiyasu, Takami Michio, Kuchitsu Kozo // Chem. Phys. Lett.— 1988.— 152, № 4—5.— С. 294—298.— Англ.

С помощью диодного лазера получен в области  $1280 \text{ см}^{-1}$  спектр поглощения димера  $(N_2O)_2$  в сверхзвуковой струе. Проведено отнесение переходов и вычислены вращательные постоянные комплекса  $(N_2O)_2$  в основном состоянии. Установлены конфигурац. свойства комплексов в основном и возбужденном колебательном состоянии. Показано, что по сравнению с мономером основная частота  $\nu_0$  комплекса  $(N_2O)_2$  сдвинута в сторону больших длин волн. Библ. 21. Е. Н. Т.

М.А.

ср. 1989, № 4

$(N_2O)_2$

cm.

31378

1988

110: 47607h. Free-jet infrared absorption spectroscopy of the nitrous oxide dimer  $(N_2O)_2$  van der Waals complex in the 8  $\mu m$  region. Ohshima, Yasuhiro; Matsumoto, Yoshiyasu; Takami, Michio; Kuchitsu, Kozo (Inst. Phys. Chem. Res., Wako, Japan 351-01). *Chem. Phys. Lett.*, 1988, 152(4-5), 294-8 (Eng). The vibration-rotation spectrum of  $(N_2O)_2$  was studied in the monomer  $\nu_1$  region ( $\approx 1280 \text{ cm}^{-1}$ ) by free-jet absorption spectroscopy. The rotational consts. detd. are consistent with the centrosym. slipped parallel structure reported recently by Z. S. Huang and R. E. Miller and by B. J. Howard (1987). The band origin,  $1279.7107(6) \text{ cm}^{-1}$ , is red shifted from that of the monomer by  $5.1926(6) \text{ cm}^{-1}$ .

KON. FRANK-  
CHERMP,  
V1

c.A. 1989, 110, N6



$N_2N_2O$

1988

111: 242956u Infrared spectroscopy of the nitrogen molecule-nitrous oxide van der Waals complex. Randall, Robert W.; Dyke, Thomas R.; Howard, Brian J. (Phys. Chem. Lab., Oxford Univ., Oxford, UK OX1 3QZ). *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 1988, 86(Spectrosc. Low Temp.), 21-9 (Eng). The rotationally resolved spectrum of the  $N_2.N_2O$  van der Waals complex was obtained in the region of the  $\nu_3$   $N_2O$  monomer vibration by using the technique of diode-laser absorption spectroscopy of a pulsed mol. beam. Detn. of accurate rotational and centrifugal distortion consts. enabled the effective structure of the complex to be calcd. This has been rationalized by the construction of potentials based on a distributed multipole and distributed dispersion model.

UK-CRAMP,  
Di

C.A. 1989, 111, N 26

N<sub>2</sub>O

1989

Burkholder J. B.,

Orlando J. J. et al.,

High Resolut. Fourier Trans-  
form Spectrosc. Sum. Pap.

High Resolut. Fourier Trans-  
form Spectrosc. Top. Meet.,

Santa Fe, N. M., Feb. 13-15, 1989.

Washington, 1989, ● c. 94-97.

$(N_2O)_n$

om 34071

1990

$2 \leq n \leq 2$  Greer J.C., Gotzeina W.,  
et al.,

Chem. Phys. Lett., 1990,  
168, N 3-4, 330-336

Trepico obser●vation of the

threshold region of  $N_2O$   
clusters.

$(N_2O)_2^+$

OM 33265

1990

15 Б1081. Теоретическое исследование  $(N_2O_2)_2^+$ ,  $(C_2O_2)_2^+$  и  $N_2O_2+CO_2$ . Сравнение двухцентровой трехэлектронной связи и ион-дипольного комплекса. A theoretical study of  $(N_2O)_2^+$ ,  $(CO_2)_2^+$  and  $N_2O+CO_2$ . Comparison of the two-center-three-electron bond and the ion-dipole complex / McKee Michael L. // Chem. Phys. Lett.— 1990.— 165, № 2—3.— С. 265—271.— Англ.

Неэмпирическим методом ССП в базе 6—31ГФ\* изучено электронное и геометрич. строение двух возможных конфигураций комплексов состава  $(N_2O_2)_2^+$  (I),  $(C_2O_2)_2^+$  (II) и  $N_2O_2+CO_2$  (III). В одной из них положит. заряд распределен по двум взаимодействующим фрагментам, приводя к образованию двухцентровой трехэлектронной связи (А), а во второй — положит. заряд сконцентрирован в основном на одном фрагменте, что приводит к образованию ион-дипольного (Б) комплекса. Энергии конформеров уточнены по

М.П.

(42)

~~15~~

X. 1990, N 15

теории возмущений Меллера—Плессета 4-го порядка (МП4) в базисе 6—31ГФ\* и на уровне МП2/6—31+ГФ\*. В случае I и II найдено, что конформер А соотв. на 9 и 6 ккал/моль стабильнее, чем Б. Энергия связывания в II хорошо согласуется с эксперим. значением, в то время как для I она на  $\approx 6$  ккал/моль завышена. Обсуждено влияние кач-ва базисного набора и учета электронной корреляции на результаты расчета.

И. Н. Сенченя



1990



Ongstad A.P., Henshaw T.L.,  
et al.,

J. Phys. Chem. 1990, 94,  
N 17; 6724 - 6730

Chemiluminescent Reactions

of Group II Atoms ( $O(3p)$   
and  $Se(3p)$ ) with  $H_2$  side.  
Radicals.



(MINDO)3

1990

21 Б1080. О возможности существования циклического тримера закиси азота / Станкевич И. В., Чистяков А. Л., Шур В. Б., Вольпин М. Е. // Докл. АН СССР.— 1990.— 313, № 1.— С. 118—120.— Рус.

Проведены расчеты полуэмпирич. методами MINDO/3, MNDO и AM1 с оптимизацией геометрии. Из резюме

X. 1990, № 21



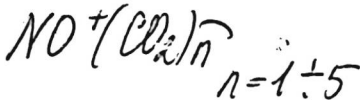
$$n = 1 \div 5$$

1991

116: 28475w Cluster ions: Gas-phase stabilities of nitrosyl ion-molecular oxygen clusters and nitrosyl ion-carbon dioxide clusters ( $\text{NO}^+(\text{O}_2)_n$  and  $\text{NO}^+(\text{CO}_2)_n$  with  $n=1-5$ ). Hiraoka, Kenzo; Yamabe, Shinichi (Fac. Eng., Yamanashi Univ., Kofu, Japan 400). *J. Chem. Phys.* 1991, 95(9), 6800-5 (Eng). Thermodyn. stabilities of cluster ions  $\text{NO}^+(\text{O}_2)_n$  and  $\text{NO}^+(\text{CO}_2)_n$  with  $n = 1-5$  were detd. with a pulsed electron beam mass spectrometer. The measured binding energies of  $\text{NO}^+(\text{O}_2)_n$  were found to be considerably smaller than those of  $\text{NO}^+(\text{N}_2)_n$ , i.e., the solvating power of  $\text{O}_2$  toward  $\text{NO}^+$  is weaker than that of  $\text{N}_2$ . For both  $\text{NO}^+(\text{O}_2)_n$  and  $\text{NO}^+(\text{CO}_2)_n$ , the cluster ions with  $n = 3$  were found to be relatively more stable toward dissociation. The exptl. energies of  $\text{NO}^+(\text{CO}_2)_n$  agree well with ab initio ones and are much larger than those of  $\text{NO}^+(\text{N}_2)_n$  and  $\text{NO}^+(\text{O}_2)_n$ . Structural difference between  $\text{NO}^+(\text{N}_2)_n$  and  $\text{NO}^+(\text{CO}_2)_n$  is also discussed. It is postulated that not  $\text{NO}^+(\text{O}_2)$  but  $\text{NO}^+(\text{CO}_2)$  is the key intermediate for conversion of  $\text{NO}^+$  to the hydronium series ions in the D region of the Earth's atm.

неоп. пункт,  
массеный;  
смазеньков

С.А. 1992, 116, N4



[Om. 36451]

1991

$N_2O^+N_2O$

Ying D., Ekern S., et al.,

Chem. Phys. Lett. 1991,  
187, N3, 245-249

Reinvestigation of the experimental  $N_2O^+ \bullet N_2O$  cluster

binding energy.



1991

116: 113725x Computational analyses of structural properties of the dinitramide ion,  $\text{N}(\text{NO}_2)_2^-$ , and some related molecules: dinitroamine and trinitroamine. Redfern, P. C.; Politzer, P. (Dep. Chem., Univ. New Orleans, New Orleans, LA USA). *Report 1990*, Order No. AD-A228 139, 9 pp. (Eng). Avail. NTIS. From *Gov. Rep. Announce. Index (U. S.) 1991*, 91(9), Abstr. No. 121,792. Ab initio SCF calcn. of the structures of  $\text{N}(\text{NO}_2)_2^-$  (I),  $\text{HN}(\text{NO}_2)_2$  (II), and  $\text{N}(\text{NO}_2)_3$  were carried out. Their stability in, the proton affinity of I as a measure of the acidity of II < and the interaction energy of I with  $\text{NO}_2^+$  to yield  $\text{N}(\text{NO}_2)_3$  were computed. The proton affinity of I was greater than that of  $\text{NO}_2^-$ .

(AP)

C. A. 1992, 116, n 12

1992

$(\text{NONO})_n$ ,  
 транс. и цис  
 $(\text{ONNO})_n$

(теор. расчет)  
 с таб.

116: 46525a Metastable polymers of the nitrogen oxides. 2. Open-chain polymers of the nitric oxide dimers and of nitrous oxide: a MNDO/AM1 study. Jones, Walter H. (Dep. Chem., Univ. West Florida, Pensacola, FL 32514-5750 USA). *J. Phys. Chem.* 1992, 96(2), 594-603 (En.). The previous MNDO/AM1 study of  $(\text{SN})_n$  and its  $(\text{NO})_x$  analog is extended to open-chain oligomers of ONNO and NNO. Thermodyn. and kinetic comparisons are made of the neat oligomers and of a no. of deriv. species, the most pertinent of which, on the basis of similarities to the infinite polymers, are  $\text{HO}(\text{NONO})_n\text{H}$ ,  $\text{HO}(\text{ONNO})_n\text{H}$ , and  $\text{HO}(\text{NNO})_n\text{H}$ . Oligomers of up to eight monomer units are investigated. All of the oligomerizations are endothermic. AM1 correctly indicates that the cis-ONNO species is more stable than the trans but gives poor geometry; it can however be argued, on the basis of structural differences between the polymer and the monomer (which has been extensively investigated theor. by others), that the results for the polymer may be meaningful. A cyclic, high-energy ONNO dimer is found also on the AM1 surface, in qual. agreement with published ab initio treatments. For all of the oligomers of the nitrogen oxides,

C.A. 1992, 116, N.6

charge transfer in the chain (generally N to O) is less uniform and pronounced than in their polythiazyl counterparts. Thermodynamically, it is concluded that *cis*- and *trans*-(ONNO)<sub>n</sub> oligomers are favored over (NONO)<sub>n</sub> oligomers. Kinetic analyses, based on presumed homolytic scission of the weakest bond (selected by a bond enthalpy-bond order treatment), also suggest that the most stable nitric oxide polymers would be derived from the sym. dimer and that the barriers to decomn. may be significant. The most interesting results arise from study of open-chain oligomers of nitrous oxides: AM1 and MNDO give good geometries and reasonable energies for the monomer and afford oligomers which are similar in structure to polythiazyl, in being straight, planar *cis,trans* chains with reasonable kinetic stability.

$N(NO_2)_2$

[Dm. 37 332]

1993

Michels H.H., Montgomery F.A., Jr.,

(Ae) J. Phys. Chem., 1993, 97, N25,  
6602 - 6606





Om: 37 185

1993

119: 34680n Structure and stability of trinitramide. Montgomery, J. A., Jr.; Michels, H. H. (United Technol. Res. Cent., East Hartford, CT 06108 USA). *J. Phys. Chem.* 1993, 97(26), 6774-5 (Eng). Ab initio calcns. of the structure and thermochem. of trinitramide,  $N(NO_2)_3$ , are reported. A vibrationally stable  $C_3$  structure having 1.545 Å N-N bond lengths is found at the MP2/6-31G\* level of theory. The heat of formation of trinitramide is 59 kcal/mol. Thermal decompn. of trinitramide most likely occurs via N-N bond cleavage, which is estd. to required 26 kcal/mol.

структура,  
 $\Delta_f H$

C.A. 1993, 119, N4

$N(NO_2)_3$

(Dm 37185)

1993

✓ 11Д77. Структура и стабильность тринитрамида. Structure and stability of trinitramide / Montgomery J. A. (Jr), Michels H. H. // J. Phys. Chem.. — 1993. — 97, № 26. — С. 6774—6775. — Англ.

Ab initio calculations of the structure and thermochemistry of trinitramide,  $N(NO_2)_3$ , are reported. A vibrationally stable  $C_3$  structure having ~~1.545~~ A N—N bond lengths is found at the MP2/6-31G\* level of theory. The heat of formation of trinitramide is estimated to be 59 kcal/mol. Thermal decomposition of trinitramide most likely occurs via N—N bond cleavage, which is estimated to require 26 kcal/mol.

М.Н.



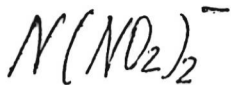
до 1993, N 11-12

$N(NO_2)_2^-$

1993

24 Б1200. Изучение методом функционала плотности структуры и некоторых реакций разложения динитрамидного аниона  $N(NO_2)_2^-$ . Density functional study of the structure and some decomposition reactions of the dinitramide anion  $N(NO_2)_2^-$  / Politzer P., Seminario J. M., Concha M. C., Redfern P. C. // J. Mol. Struct. Theochem. — 1993. — 106, Nov. — С. 235—240. — Англ.

X. 1995, N 24



1993

120: 200571v Density functional study of the structure and some decomposition reactions of the dinitramide anion  $\text{N}(\text{NO}_2)_2^-$ . Politzer, Peter; Seminario, Jorge M.; Concha, Monica C.; Redfern, Paul C. (Department of Chemistry, University of New Orleans, New Orleans, LA 70148 USA). *THEOCHEM* 1993, 106(1-3), 235-40 (Eng). The authors have used a non-local d. functional procedure (DF/GGA/DZVPP) to compute the structure of the dinitramide anion  $\text{N}(\text{NO}_2)_2^-$  and the energetics of some possible decompn. steps. The structures are in good agreement with crystallog. results, and show the  $\text{NO}_2$  groups to be rotated out of the N-N-N plane, with a considerable difference between the two N-N-O angles of each  $\text{NO}_2$  group. Of three possible N-N bond breaking reactions, the authors find that the least energy is required to yield  $\text{NNO}_2$  and  $\text{NO}_2$  ( $49.8 \text{ kcal mol}^{-1}$ ). The authors suggest that these products have the option of forming a loosely bound complex.

структура,  
неопределен

C.A. 1994, 120, N 16

NO<sub>n</sub>

1994

Б 20 Б1042. Исследование оксидов азота методом функционала плотности. Density functional study of nitrogen oxides /Stirling Andras, Papai Imre, Mink Janos, Salahub Dennis R. //J. Chem. Phys. .—1994 .—100 ,№ 4 .—С. 2910—2923 .—Англ.

М.А.

X. 1994, № 20

N<sub>4</sub>O

1996

124:299421p The Nitrosyl Azide Potential Energy Hypersurface: A High-Energy-Density Boom or Bust? Galbraith, John Morrison; Schaefer, Henry F., III (Center for Computational Quantum Chemistry, University of Georgia, Athens, GA 30602 USA). *J. Am. Chem. Soc.* 1996, 118(20), 4860-70 (Eng). Motivated by the recent isolation and spectroscopic characterization of nitrosyl azide (N<sub>4</sub>O), we have undertaken an ab-initio investigation of the originally reported structure as well as various structural isomers on the potential energy hypersurface. Geometries and harmonic vibrational frequencies have been predicted for the trans-chain isomer along with the 6  $\pi$ -electron potentially arom. ring structure with various levels of theory up through the triple- $\zeta$  plus double polarization single and double excitation coupled cluster (TZ2P CCSD) method and the multireference CI method (MR-CISD). In addn., ests. are made for extension to higher levels of theory, arriving at final predictions of  $r_e(\text{ON}_1) = 1.176 \text{ \AA}$ ,  $r_e(\text{N}_1\text{N}_2) = 1.472 \text{ \AA}$ ,  $r_e(\text{N}_2\text{N}_3) = 1.272 \text{ \AA}$ ,  $r_e(\text{N}_3\text{N}_4) < 1.130 \text{ \AA}$ ,  $\theta_e(\text{ON}_1\text{N}_2) = 110.5^\circ$ ,  $\theta_e(\text{N}_1\text{N}_2\text{N}_3) = 105.4^\circ$ ,  $\theta_e(\text{N}_2\text{N}_3\text{N}_4) = 174.5^\circ$ , and  $r_e(\text{ON}_1) < 1.389$ ,  $r_e(\text{N}_1\text{N}_2) < 1.250$ ,  $r_e(\text{N}_3\text{N}_4) > 1.423$ ,  $\theta_e(\text{N}_1\text{ON}_4) = 106.3^\circ$  for the trans-chain and ring isomers, resp. Energy relationships, bond lengths, vibrational frequencies, Mulliken bond indexes, and MO arguments are used to

структура  
парацетил,  
Di, метр  
расиен

C. A. 1996, 124, N 22

elucidate nitrogen oxide bonding. While the ring isomer is predicted to be the most stable structure on the hypersurface, the barrier to dissocn. is most likely between 1 and 2 kcal mol<sup>-1</sup> (including zero-point vibrational energy [ZPVE], the existence of any barrier becomes questionable) making isolation theor. possible but exptl. difficult. This small barrier also detracts from the attractiveness of the N<sub>4</sub>O ring structure as a high-energy-d. material. The trans-chain isomer, however, lies in an energy valley with higher sides, consistent with its previous exptl. observation.

$N(NO_2)_2^-$

1996

125: 126293r The Dinitramide Anion,  $N(NO_2)_2^-$ . Christe, Karl O.; Wilson, William W.; Petrie, Mark A.; Michels, Harvey H.; Bottaro, Jeffrey C.; Gilardi, Richard (Propulsion Directorate, Phillips Laboratory, Edwards Air Force Base, CA 93524 USA). *Inorg. Chem.* 1996, 35(17), 5068-5071 (Eng). The IR and Raman spectra of the  $NH_4^+$ ,  $K^+$ , and  $Cs^+$  salts of  $N(NO_2)_2^-$  in the solid state and in soln. were measured and are assigned with the help of ab initio calcns. at the HF/6-31G\* and MP2/6-31+G\* levels of theory. In agreement with the variations obsd. in the crystal structures, the vibrational spectra of  $N(NO_2)_2^-$  are strongly influenced by the counterions and the phys. state. Whereas the ab initio calcns. for free  $N(NO_2)_2^-$  indicate a min. energy structure of  $C_2$  symmetry, Raman polarization measurements on solns. of  $N(NO_2)_2^-$  suggest point group  $C_1$  (i.e., no symmetry). This is attributed to the small (<3 kcal/mol) N-NO<sub>2</sub> rotational barrier in  $N(NO_2)_2^-$  which allows for easy deformation.

(UK, CRP)

©. A. 1996, 125, N10



$N_3 - N = 0$

1996

Chem. Berichte, 1996,  
129, N11; p. 1373-1377

$N_4O_2$

1996

124: 38191e: An ab Initio Study of the Structures of Cyclic  $N_4O_2$ . Mana, M. Riad; Chabalowski, Cary F. (U.S. Army Research Laboratory, AMSRL-WT-PC, Aberdeen Proving Ground, MD 21005 USA). *J. Phys. Chem.* 1996, 100(2), 611-15 (Eng). The structures of the cyclic  $N_4O_2$  mol. are investigated using three levels of ab initio electronic structure methods. Hartree-Fock SCF, second-order Moeller-Plesset perturbation theory (MP2), and quadratic CI including single and double substitutions (QCISD) calcns. are performed employing two basis sets of double- $\zeta$  plus polarization (DZP) and a triple(plus)- $\zeta$  double polarization (TZ+2P) quality. Two structures are located. A boat conformation ( $C_{2v}$  structure) is detd. to be a min. equil. structure with exothermicity of -80, 140, and 100 kcal/mol relative to dissocn. to  $2N_2O$ ,  $2N_2 + O_2$ , and  $2NO + N_2$ , resp. A planar ( $D_{2h}$  structure) previously reported to be a min. [Jones, W. H. J. *Phys. Chem.* 1992, 96, 5184] is confirmed in this study to be a transition state (saddle point) lying -7-10 kcal/mol above the boat min. as calcd. at all levels of theory. A search for a chair and a twisted conformation has proven unsuccessful. Harmonic vibrational frequencies and IR intensities are reported for both optimized boat and planar structures at all levels of theory. The consideration of the stable form of this mol. as a high energy d. material is discussed.

ab initio  
paper

C.A. 1996, 124, N 4

1996

N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

15. Б. 150. Неэмпирическое исследование структуры циклического

циклического N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>. An ab initio study of the structures of cyclic N<sub>4</sub>O<sub>2</sub> / Манаа М. Riad, Chabalowski Cary F. // J. Phys. Chem. — 1996. — 100, № 2. — С. 611—615. — Англ. . Место хранения ГПНТБ

Неэмпирическим методом ССП с учетом электронной корреляции в рамках МП2 и КВ в базисах до трехэкспонентного с включением поляризационных функций исследовано электронное строение циклич. форм N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>. Наиболее выгодной найдена конформация ванны (C<sub>2v</sub>) с теплотой диссоциации на 2N<sub>2</sub>O, 2N<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> и 2NO+N<sub>2</sub> в 80, 140 и 100 ккал/моль, соответственно. Найденная ранее плоская структура (D<sub>2h</sub>) оказалась переходным состоянием. Приведены колебательные частоты и интенсивности полос. Библ. 35. В. Л.

структура

X. N 15, 1996.

1996

F: N3NO

P: 3

17Б133. Теоретическое изучение тионитрозилазида ( $N[3]-N=S$ ), тиазилазида ( $N[3]-S'=\overset{\cdot}{N}$ ) и нитрозилазида ( $N[3]-N=O$ ) [неэмпирическими методами ХФ, МП2, связанных кластеров и квадратичным методом конфигурационного воздействия]. A theoretical study of thionitrosyl azide ( $N[3]-N=S$ ), thiazyl azide ( $N[3]-S'=\overset{\cdot}{N}$ ) and nitrosyl azide ( $N[3]-N=O$ ) / Nguyen Ming Tho, Flammang Robert // Chem. Ber. - 1996. - 129, 11. - С. 1373-1377. - Англ.

РШХ 1997

$N_3O_2$

1996

1 19Б138. Ковалентно связанная молекула  $N_3O_2$ . Два возможных изомера. The covalently bound  $N_3O_2$  molecule: Two possible isomers / Pápai Imre, Stirling András // Chem. Phys. Lett.— 1996.— 253, № 1-2.— С. 196-200.— Англ.

Методом функционала плотности с использованием различных функционалов исследована возможность существования нейтральной молекулы  $N_3O_2$ . Определены несколько стационарных точек на поверхности потенциальной энергии и показано, что минимумам отвечают два изомера и только циклическая структура имеет минимальную энергию во всех использованных приближениях метода. Показано, что циклическая и открытая формы (ONNNO) термодинамически неустойчивы для превращений  $NO + N_2O$  и  $N_2 + NO_2$ . Н. С.

М.Л.

Х. 1997, N 19

$N_3O_2$

1996

125: 19475e The covalently bound  $N_3O_2$  molecule: two possible isomers. Papai, Imre; Stirling, Andras (Institute of Isotopes of the Hungarian Academy of Sciences, Spectroscopy Department, H-1525/77 Budapest, P.O.B., Hung.). *Chem. Phys. Lett.* 1996, 253(1,2), 196-200 (Eng). D. functional theory has been applied to investigate the possibility of the existence of the neutral  $N_3O_2$  mol. Two isomers (cyclic and open ONNNO) are found to be min. on the potential energy hypersurface at the local level of theory. The cyclic structure represents a min. with the nonlocal functionals as well, while the open form is predicted to be a transition state with one of the applied nonlocal functionals. The open isomer lies about 20 kcal/mol lower in energy than the cyclic mol., but both isomers are thermodynamically unstable with respect to  $NO+N_2O$  and  $N_2+NO_2$ . The calcd. equil. geometries, vibrational frequencies and bond orders suggest that both isomers are covalently bound structures.

исомеры,  
стабильность,  
теор. расчет

C. A. 1996, 125, N 2

(N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>

1997

127: 211780h Infrared diode laser jet spectroscopy of the van der Waals complex (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>. Qian, Hai-Bo; Herrebout, Wouter A.; Howard, Brian J. (Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, University of Oxford, Oxford, UK OX1 3QZ). *Mol. Phys.* 1997, 91(4), 689-696 (Eng), Taylor & Francis. The rotationally resolved spectrum of the dimer (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> was recorded in the region of the monomer N<sub>2</sub>O ν<sub>3</sub> vibrational band using a diode laser absorption spectrometer which incorporates a multiple-pass cell and a pulsed-jet expansion. A double-modulation technique involving a fast modulation of the laser frequency and a slow modulation of the gas pulse was developed in the expts. The spectrum is completely analyzed and the rotational consts. and effective structures are accurately detd. for both the ground and the excited vibrational states. The centrosym. slipped parallel structure of (N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub> is well explained by an intermol. potential contg. a combination of electrostatic interactions between distributed multipoles of different monomers and atom-atom Lennard-Jones potentials to describe the repulsion and dispersion interactions.

Kauffman -  
C.N.K.M.P.,  
M.N.

C.A. 1997, 127, N 15

$N_2O \cdots O_2$

1997

126: 230916c Infrared matrix spectra of the  $N_2O \cdots O_2$  complex in solid nitrogen. The  $N_2O \cdots O_2 + O$  thermal diffusion limited reaction. Bahou, M.; Schriver-Mazzuoli, L.; Camy-Peyret, C.; Schriver, A.; Chiavassa, T.; Aycard, J. P. (Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications, Unité propre du CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Tour 13, case 76, 4 place Jussieu, 75252/05 Paris, Fr.). *Chem. Phys. Lett.* 1997, 265(1,2), 145-153 (Eng), Elsevier. The vibrational spectrum of  $N_2O$  dild. in a N matrix is compared to the spectrum of  $N_2O$  produced after the photolysis of ozone dild. in solid N. The small shift obsd. between the 2 spectra is due to the formation of a 1-1 complex between nitrous oxide and mol. O. Upon increasing the temp., the complex formed after the photolysis of ozone in N reacts with an O atom leading to  $O_3$  and  $N_2O$ . Anal. of the results brings new information on O atom diffusion in cryogenic solids. As predicted by theor. studies, the long-range diffusion of at. O in a nearly perfect matrix is negligible between 20 and 30 K. However, a fast motion of  $O(^3P)$  at short range, independent of the matrix morphol., is exptl. suggested between 15 and 20 K.

uk b

manuscript

C. A. 1997, 126, N 17



1997

NO<sub>x</sub>

x = 2 ÷ 6

теорет.

расчет

стабильности

и структуры

127: 140879j Theoretical study of cyclic radicals NO<sub>x</sub> (x = 2-6). Li, Yumin; Iwata, Suehiro (Institute for Molecular Science Myodaiji, Okazaki, Japan 444). *Chem. Phys.* 1997, 219(2,3), 209-220 (Eng). Elsevier. Ab initio MO calcns. at the UHF and MP2 levels with 6-31G\* basis set are carried out to examine the stability and the structure of a series of NO<sub>x</sub> (x = 2-6) radicals. We have located a series of exotic but stable radicals with a ring comprised of one nitrogen atom and two to six oxygen atoms. The stability is confirmed by evaluating the harmonic frequencies at both levels. The bonds in the cyclic radicals are discussed by comparing with both lengths and bond stretching vibrational frequencies of the related known mols. The reaction energy for NO<sub>x</sub> → NO<sub>2</sub> + (x-2)/2 O<sub>2</sub> is evaluated with the MP4SDTQ approxn., and it is shown that the cyclic NO<sub>x</sub> is a new type of energy-rich mols. All the ring radicals stable not only at UHF/6-31G\* but also at MP2/6-31G\* are further investigated by d. functional theory with nonlocal corrections (Becke3LYP). Most of them become unstable, except for three-membered NO<sub>2</sub> ring and four-membered NO<sub>3</sub> ring. The different stability for some NO<sub>x</sub> ring radicals at MP2 and DFT levels is illustrated.

C. A. 1997, 127, 1410

$\text{NO}_x$

(Om. 38890)

1997

( $x=2-6$ )

Yumin Li, Suehiro  
Iwata,

meopem.  
pavem

Chem. Phys., 1997,  
219, 209-220

NO. N<sub>2</sub>

(OM. 39806)

1998

Jonathan D. Barr, John M.  
Dyke et al.,

J. Electron Microsc.  
and Related Phenomena  
1998, 97, 159-170

некорр.  
и фотоп.  
снимки,  
исслед.  
и аб initio  
papers

$N_2 \cdot NO$

1998

distance from the plane of the ...

128: 263322a Preliminary report of the observation of the  $\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi$  transition in  $N_2 \cdot NO$ . Mack, Paul; Dyke, John M.; Smith, David M.; Wright, Timothy G. (Department of Chemistry, University of Southampton, Southampton, UK SO17 1BJ). *Chem. Phys. Lett.* 1998, 284(5,6), 423-428 (Eng), Elsevier Science B.V.. A structured spectrum of the  $\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi$  transition of the  $N_2 \cdot NO$  complex has been recorded for the first time, employing the technique of one-color (1+1) resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI) spectroscopy. The  $T_0$  value of the  $\tilde{A}^2\Sigma^+ - \tilde{X}^2\Pi$  transition is detd. as  $44143.2 \pm 0.5 \text{ cm}^{-1}$  and the dissocn. energies of the  $\tilde{X}$  and  $\tilde{A}$  states are estd. as  $-88$  and  $144 \text{ cm}^{-1}$ , resp. The expected geometries and modes of bonding in the  $\tilde{X}$  and  $\tilde{A}$  states are discussed by comparison with those of similar complexes.

$A^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi$   
 $T_0, D_e$

C.A. 1998, 128, N21

(NO) 13

OM

39159

1998

<sup>As</sup>  
128: 67859s The infrared spectrum and structure of the nitrous oxide trimer. Miller, R. E.; Pedersen, L. (Department of Chemistry, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 USA). *J. Chem. Phys.* 1998, 108(2), 436-443 (Eng), American Institute of Physics. Spectroscopic observations of the nitrous oxide trimer are reported. Two rotationally resolved vibrational bands were obsd. using the optothermal detection method. The ground vibrational state rotational consts. obtained from these spectra are  $A = 0.052606(40)$ ,  $B = 0.043571(15)$ , and  $C = 0.028736(7) \text{ cm}^{-1}$ . Ab initio calcns. are also reported at the MP2/6-31+G(2d,2p) level which yielded  $A = 0.05492$ ,  $B = 0.04517$ , and  $C = 0.03052 \text{ cm}^{-1}$ . The structure of the nitrous oxide trimer can be thought of as a slightly distorted dimer, which has a slipped parallel geometry [Z. S. Huang and R. E. Miller, *J. Chem. Phys.* 89, 5408(1988)], with a 3rd monomer unit lying above this dimer. This structure is similar to the recently obsd. nonplanar isomer of  $(\text{CO}_2)_3$  [M. J. Weida and D. J. Nesbitt, *J. Chem. Phys.* 105, 10,210(1996)].

CRKMP,  
A, B, C.

C.A. 1998, 128, N6

$N_3O(N_2 \cdot NO)$  [Um. 39843]

1998

Paul Mack, John M. Dyke  
et al.,

u-n

Chem. Phys. Lett., 1998,  
284, 423 - 28

$(N_2O)_2^+$

[Um 3945]

1998

Sergey A. Nizkorodov,  
et al.,

Chem. Phys. 1998, 239,  
369 - 378

Photofragmentation dynamics  
of the  $(N_2O)_2^+$  ● and  $(N_2O)_3^+$

clusters: fragment  $N_2O^+$   
 $A \leftarrow X$  spectra.



$[N_3O]^+$

Om. 40101

1999

Ray Engelke, Norman C. Blais  
et al.,

J. Phys. Chem. A 1999,  
103, 5811 - 5814

F: N2N2O

P: 3

1999

130:258841 Rotational spectroscopy and molecular structure of  $^{15}\text{N}_2\text{-}^{14}\text{N}_2\text{O}$ . Leung, Helen O. (Department of Chemistry, Mount Holyoke College, South Hadley, MA 01075, USA).

J. Chem. Phys., 110(9), 4394-4401 (English)  
1999 The rotational spectrum of  $^{15}\text{N}_2\text{-}^{14}\text{N}_2\text{O}$  was recorded in the 7-19 GHz region with a pulsed mol. beam, Fourier transform microwave spectrometer. An in motion of the  $^{15}\text{N}_2$  subunit was obsd. and the nuclear quadrupole hyperfine structure in each internal motion state was analyzed using the Watson S-r Hamiltonian with the inclusion of nuclear quadrupole coupling interaction spectroscopic consts. of the ground internal motion state

---

are not well defined since only 4 transitions were obsd., but they are similar to those of the excited internal motion state that are detd. from the anal. of 14 a- and transitions. The rotational and centrifugal distortion consts. (in MHz) excited internal motion state are  $A = 12,791.307\ 0(2)$ ,  $B = 2,014.982\ 4(1)$ ,  $1,728.950\ 45(7)$ ,  $DJ = 1.052\ 5(2) \cdot 10^{-2}$ ,  $DJK = 3.933\ 7(3) \cdot 10^{-1}$ ,  $1.822(3) \cdot 10^{-3}$ ,  $d_2 = -1.118(6) \cdot 10^{-3}$ . The nuclear quadrupole c consts. (in MHz) in the excited internal motion state for the terminal 14 nucleus in N2O are  $\chi_{aa} = 0.3465(4)$ ,  $\chi_{bb} = -0.7445(5)$ , and  $\chi_{cc} = 0.3$  while those for the central 14N nucleus are  $\chi_{aa} = 0.1023(9)$ ,  $\chi_{bb} = -0.2528(8)$ , and  $\chi_{cc} = 0.1505(8)$ . These spectroscopic consts. are consis with a T-shaped structure, with 15N2 forming the leg of the T. The intern distance is 3.691 A. The 15N2 axis and the 14N2O axis make an angle of 13.degree. and 81.degree. with the intermol. axis, resp. The nuclear qua coupling consts. show elec. field gradient perturbation in the N2O subuni the field gradient at the central N affected to a greater extent than tha the terminal N. This perturbation is likely due to electron charge redistribution in N2O upon complexation with N2.

F: (NO)3-

P: 3

131:107062 Characterizations of (NO)3- and N3O2- molecular anions. Snis, Anders; Panas, Itai (Department of Inorganic Environmental Chemistry, Chalmers University of Technology, Goteborg S-412 96, Swed.). Chem. Phys. Lett., 305(3,4), 285-292 (English) 1999 Isomers of (NO)3- are characterized by means of B3LYP d. functional theory and the wavefunction-based CASPT2 method. Stabilities, vertical electron detachment energies (VDEs), vertical electron excitation energie (VEEs), and vibration frequencies are detd. Exptl. isotope shifts in the IR spectrum of (NO)3- and theory were previously employed to det. the structure of an N-N-N connected anion. Further support for this assignme is obtained in the present study by comparing exptl. and theor. VDEs and VEEs. A parallel anal. of a w-shaped N3O2-mol. anion along the above lines is performed for ref., as a comprehensive understanding of the two systems is sought.

C.A. 199  
7101

1999

Okuytu N

2000

La Violette, Randall A.

et al.

meopen.  
pa nem

J. Chem. Phys., 2000,  
112 (21), 9269-75

(Call. Uspuon B; III)

NO · N<sub>2</sub>  
Kovalevsk

2000

134: 170305f The  $\bar{A} - \bar{X}$  (1+1) REMPI spectrum and high-level ab initio calculations of the complex between NO and N<sub>2</sub>. Lozelle, Jerome; Daire, Sophia E.; Gamblin, Stuart D.; Wright, Timothy G.; Lee, Edmond P. F. (Spectroscopy of Complexes and Radicals (SOCAR) Group, School of Chemistry, Physics and Environmental Science, University of Sussex, Falmer, Brighton, UK BN1 9QJ). *J. Chem. Phys.* 2000, 113(24), 10952-10961 (Eng), American Institute of Physics. The results of 2 sep. studies of the complex between NO and N<sub>2</sub> are reported. The (1+1) REMPI spectrum of the  $\bar{A} - \bar{X}$  transition of the complex between NO and N<sub>2</sub> is presented of improved quality over that reported previously, and the appearance of the spectrum is discussed. The results of high-level ab initio calcns. [RCCSD(T)/aug-cc-pVQZ//QCISD/6-311+G(2d)] on the  $\bar{X}^2\Pi$  state are reported. The indications are that the NO moiety is more freely rotating in the complex than is N<sub>2</sub>, and that a wide angular space is sampled in the zero-point energy level. The appearance of the REMPI spectrum suggests that the  $\bar{A}^2\Sigma^+$  state is (close to) linear, and RCCSD(T)//QCISD calcns. on the  $\bar{A}$  state, using Rydberg-function-augmented basis sets, suggest that the lowest energy linear isomer is the ON·N<sub>2</sub> linear orientation.

(A<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup> ← X<sup>2</sup>Π)  
CCKMP,  
CMP-PA

C-A. 2001, 134, N42

2001

F: N2O22-  
P: 3

134:317814 Infrared Spectrum of the Hyponitrite Dianion, N2O22-, Isolated and Insulated from Stabilizing Metal Cations in Solid Argon. Andrews, Lester; Liang, Binyong. Department of Chemistry, University of Virginia, Charlottesville, VA, USA. J. Am. Chem. Soc. (2001), 123(9), 1997-2002. in English.

UV irradiation of a rigid 7 K argon matrix containing alkali or alk. earth metal atoms and (NO)2 isolated from each other by one or two layers of argon forms N2O22- dianions insulated from two M+ cations by argon atoms, and visible photolysis reverses this electron-transfer process likely involving the N2O2- anion intermediate. The isolated N2O22- dianion is identified from isotopic



substitution and isotopic mixts., which show that the new 1028.5 cm<sup>-1</sup> metal independent absorption involves two equiv. NO subunits. DFT calcns. predict a strong 1078.1 cm<sup>-1</sup> fundamental for the Li(NO)<sub>2</sub>Li mol. and isotopic frequency ratios in excellent agreement with the obsd. values, which provides a model for the matrix dianion system. The spectrum of solid Na<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub> exhibits a 1030 cm<sup>-1</sup> IR band, which strongly supports the present N<sub>2</sub>O<sub>2</sub><sup>2-</sup> dianion assignment. The electrostatic stabilization of N<sub>2</sub>O<sub>2</sub><sup>2-</sup>, which is probably unstable in the gas phase, is made possible by metal cations sepd. by one or two insulating layers of argon in the rigid 7 K matrix.



$N_2(NO)$

2001

Venavagamoothy M.,  
et al.,

ab initio  
paper,  
конспект  
список

J. Mol. Struct., 2001,  
565-566, 399-408.

( $Clu, N_2 \bullet (Cl_2)$ ); III