

C-N-D-O

1826

1956

CH_3NO_2 , CD_3NO_2 (V₀, ABC, Dyke)

Tannenbaum E., Myers R.J., Gwinn W.D.
J.Chem.Phys., 1956, 25, N 1, 42-47

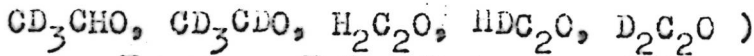
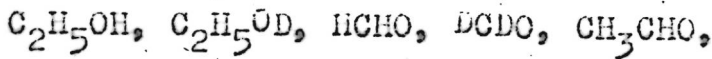
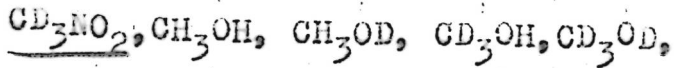
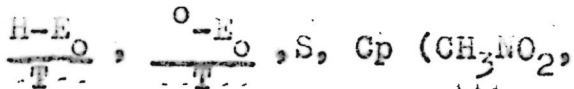
Микроволновые спектры, дипольный
момент и барьер ...

J

$\text{CN D}_3\text{O}_2$

17-16

1959



Журавлев Е.З., Рабинович И.Б.

Тр. по химии и хим. технол., /Горький/,
1959, вып. 3. 475-485

J

CND₃O₂

Есть оригинал.

ИЗОТОПНЫЙ ЭФФЕКТ В ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ
ФУНКЦИЯХ ...

CD_3NCO
 CH_3NCO

1962

ИК спектры

$\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$

N1256a

14 Б156. Инфракрасный спектр метилизоцианида- D_3 . Fletcher W. H., Mottern J. G. Infrared spectrum of methyl isocyanide- D_3 . «Advances Molec. Spectrosc. Vol. 2». Oxford — London — New York — Paris, Pergamon Press, 1962, 768 (англ.)

Получен ИК-спектр метилизоцианида- D_3 в области 1,6—25 μ и сделано отнесение всех наблюдаемых полос поглощения к типам колебаний. Определена агармоничность ряда колебаний. Результаты сопоставлены со спектрами CH_3NC и CH_3CN . Из резюме авторов

X. 1963. 14

IL - 8118.

1963

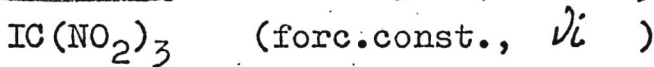
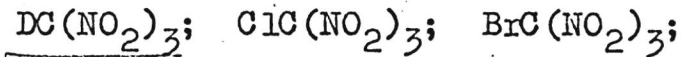
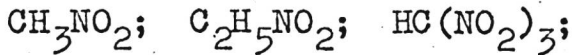
DNCO
(A₀, B₀, C₀, D₀,
2N-C)

Kewley R., Sastey K.V.L.,
Winnewisser M.,

J. Mol. Spectrosc. 1963,
10, 418-441

M-634

1963



Попов Е.М., Шляпошников В.А.

Оптика и Спектроскопия, 1963, 15/3/,
325-31

Analysis of the vibrational spectra...

J

CA, 1964, 60, N2, 1234f

DC N 30

СДЗ NO2

(ВФ-10181-IV)

1963

Томов Е.М. и др.

(спектр.)
Рентген и спектроскоп. Т. 2.
М.-Л., АН СССР, 1963, 1152-119.

HOCN

Jacob M. E., Milligan D. E.

DOCN

J. Chem. Phys., 1964, 40, 2457 (N:2)

ИК спектры

Низкотемпературные ИК исследования
продуктов фотохимического разложения
HNCN и DNCN.

Дано описание авт. спектров HOCN
и DOCN

CH_3NO_2 , CD_3ONO_2 (γ ; структура) 1965
 ~~CH_3ONO_2~~

Ильянтиников В.А., Завилов И.И.,
Новиков С.С., М 1132

Ж. Прикл. Спектроскопии АН БССР,
1965, 3(3), 272-5

Колебательный спектр метилнитрата

то CD_3NO_2 ф СА, 1966, 64, 55, 5939 с.

DNCO

Вар - М 1277 - V

1966

7 Б175. Инфракрасный спектр поглощения DNCO.
Ashby R. A., Werner R. L. The infra-red absorption
spectrum of DNCO. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 7,
1345—1353 (англ.)

Исследован ИК-спектр поглощения газ. DNCO в об-
ласти $400-3000\text{ см}^{-1}$. Проведено отнесение 6 наблюдае-
мых полос поглощения (см^{-1}): ν_1 2634,9; ν_2 2235;
 ν_3 1310; ν_4 460; ν_5 766,8 и ν_6 602,9. Показано, что вслед-
ствие кориолисова взаимодействия колебания ν_6 с ν_4
и ν_5 экспериментально получены частоты возмущенных
колебаний. Учет кориолисова взаимодействия дал сле-
дующие значения частот: ν_4 468,5, ν_5 758 см^{-1} .

Г. Кузьяни

Х. 1967. 7

DNCO

Вар М1277-IV

1966

✓ 7 Д284. ИК-спектр поглощения DNCO. Ashby R. A.,
Werner R. L. The infra-red absorption spectrum of
DNCO. «Spectrochim. acta», 1966, 22, № 7, 1345—1353
(англ.)

Исследован ИК-спектр поглощения (3000—400 см^{-1})
DNCO с разрешением 0,3—0,2 см^{-1} . Сделано отнесение
полос к фундаментальным колебаниям. Отмечено нали-
чие значительного кориолисова взаимодействия колеба-
ний ν_4 и ν_5 с ν_6 . Полученные величины $A'' = (17,3 \pm$
 $\pm 0,1) \text{ см}^{-1}$ и $B'' = (0,3405 \pm 0,0007) \text{ см}^{-1}$ совпадают с
микроволн. данными. Описан метод получения DNCO.
Библ. 10. С. Станкевич

X. 1967. 7P

DNCO

U.K.

N1753a

1966

The infrared absorption spectrum of DNCO. R. A. Ashby and R. L. Werner (Univ. New South Wales, Sydney). *Spectrochim. Acta* 22(7), 1345-53(1966)(Eng). The ir spectrum of DNCO has been examd., 400-3000 cm^{-1} , under medium resolution. The 6 fundamentals have been observed and assigned as follows: ν_1 , 2634.9 cm^{-1} ; ν_2 , 2235; ν_3 , 1310; ν_4 , 460; ν_5 , 766.8, and ν_6 , 602.9. The fundamentals ν_4 and ν_5 interact by Coriolis coupling with ν_6 ; their unperturbed frequencies are 468.5 and 758.3 cm^{-1} , resp. $A'' = 17.3 \pm 0.1 \text{ cm}^{-1}$ and $B'' = 0.3405 \pm 0.0007 \text{ cm}^{-1}$ RCSQ

y Reproduction see 4851

C.A. 1966. 65-4

4851 cd

DNCO

White K.F.
Cook R.L.

11967

BQP-M 2002-IV

J. Chem. Phys., 46, 1, 143

Вращательные и шарковские
спектры HNCO , DNCO , HN_3
в миллиметровом диапа-
зоне: измерение длиною-
по молекула с измерени-
ем квантового числа K . (см. HNCO)

DNCO

Краков В. и др.
7. Молекул. Спектроскоп.,
27, N1-4, 148

1968

Исследования с всевозможными
различиями в реакциях
спектров HN_3 , HNCO , HNCS
и их дейтерийсодержащих

(см. HN_3) III

ANCO

Neeby G.O.

1988

7. Mol. Spectrosc., 27, 1-4,
177.

Инейрипейдуня амо-
мального центробеж-
ного вращения

мод-е  MNCO и MNCS

и их дейтерир. производ-
ных.

(см. MN₃)
-III

ANCO

9976-11X

Warrior M. K. R.

1968

Devi V. M., Venkateswar-
lu K.

Indian J. Pure and Appl
Phys., 6, n 9, 469.

Синови постојанств
и постојанств
Корисно-миса нешто-

рост кварцитовых
массивов типа АХУЗ.

(см. МНС) III

DCNO

ν_i
и.и.

р. 1970. 68

6 Д478. Микроволновый спектр, структура и вращательно-колебательные взаимодействия в дейтерированной гремучей кислоте, DCNO. Bodenseh Hans Karl, Winnewisser Manfred. Microwave spectrum, structure and rotation—vibration interaction of deuterio—fulminic acid, DCNO. «Z. Naturforsch.», 1969, 24a, № 12; 1973—1979 (англ.)

Исследованы микроволн. спектры (9—42 ГГц) молекул DCNO. Определены вращательные постоянные B_0 для трех изотопич. образцов. Для двух вырожденных изгибных колебаний ν_4 и ν_5 наблюдаются дублеты l -типа перехода $J=1-2$ и соответствующие серии дублетных переходов. Приведены постоянные дублетного расщепления (в МГц) $q_4 = 17,9103 - (0,6467 \cdot 10^{-4}) \cdot J(J+1) + (0,188 \cdot 10^{-8}) [J(J+1)]^2$; $q_5 = 38,0907 - (0,3061 \cdot 10^{-3}) \cdot J(J+1) + (0,314 \cdot 10^{-8}) [J(J+1)]^2$. Найдена третья серия дублетных переходов l -типа, исходящая от Π -уровня колебательного состояния $\nu_5=3$: $q_{3 \times 5}^{(0)} = 29,2748 \pm 1,8 \cdot 10^{-4}$; $E_{\Phi} - E_{\Pi} = \Delta \simeq 41 \text{ см}^{-1}$.

Г. П.

1969

DCNO

1969

61087s Microwave spectrum, structure, and rotation-vibration interaction of deuteriofulminic acid, DCNO. Bodenseh. Hans K.; Winnewisser, Manfred (Univ. Ulm, Ulm, Ger.). Z: *Naturforsch. A* 1969, 24(12), 1973-9 (Eng). The microwave spectrum was investigated, 9-42 GHz. For the ground vibrational state of DCNO $B_0(\text{D}^{12}\text{C}^{14}\text{N}^{16}\text{O}) = 10,292.50 \text{ MHz}$, $B_0(\text{D}^{13}\text{C}^{14}\text{N}^{16}\text{O}) = 10,011.66 \text{ MHz}$, $B_0(\text{D}^{12}\text{C}^{14}\text{N}^{18}\text{O}) = 9758.87 \text{ MHz}$. The corresponding moments of inertia yield a combined r_s and r_o structure: $r_{\text{DC}} = 1.027 \pm 0.001 \text{ \AA}$, $r_{\text{CN}} = 1.168 \pm 0.001 \text{ \AA}$, $r_{\text{NO}} = 1.199 \pm 0.001 \text{ \AA}$. For the 2 degenerate bending modes ν_4 and ν_5 the l -type doublets of the transition $J = 1-2$ and the 2 corresponding series of l -type doubling transitions were obsd. The anal. of the 2 l -type doubling series revealed that P^4 and P^6 centrifugal distortion contributions are sufficient to account for the spectrum. The doubling consts. (in MHz) are: $q_4 = 17.9103 - (0.6467 \times 10^{-4})J(J+1) + (0.188 \times 10^{-3})[J(J+1)]^2$, $q_5 = 38.0907 - (0.3061 \times 10^{-3})J(J+1) + (0.314 \times 10^{-8})[J(J+2)]^2$. A 3rd series of l -type doubling transitions arising from the Π level of the $\nu_5 = 3$ vibrational state was found and analyzed: $q_{3x_5}^{(0)} = 29.2748 \pm 0.00018 \text{ MHz}$; $E_\Phi - E_\Pi = \Delta \cong 41 \text{ cm}^{-1}$.
GXJN.

11/16

11/17

u. u.

u. b. c. c. c. p.

C.A. 1970. 42.12

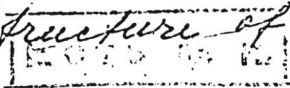
XIV 2098

u. n., rev. empy (CH₃ONO₂, 14 1969.
CD₃ONO₂, cum-CH₂ONO₂,
acum-CH₂ONO₂)

Riveros J. M.,

An. Acad. Brasil. Ciênc., 1969, 41, n 4,
513-515 (an. n.)

Molecular structure of methyl
nitrate.



Pm X40, 1970, 235271

10

6

dp

DCNO(201)

Beck W., et al.

1941

сущ. нощ;
Vi

Chem. Ber., 1941,
104, 2, 533.



(сущ. HCNO)^{III}

1971

ANCO

M.N.

M.B.

Cherry

39608y Molecular-beam microwave spectra of isocyanic acid and isocyanic acid-d. Kukolich, S. G.; Nelson, A. C.; Yamanashi, B. S. (Dep. Chem., Massachusetts Inst. Technol., Cambridge, Mass.). *J. Amer. Chem. Soc.* 1971, 93(25), 6769-71 (Eng). Deuteron quadrupole coupling in DNCO was obtained from splittings of the 1_{01} rotational state. The measured quadrupole coupling strength for the 1_{01} rotational state is $eqQ(1_{01}) = 53.6 \pm 0.2$ kHz, which leads to a value along the D-N bond $eqQ_{DN} = 345 \pm 2$ kHz. Hyperfine splittings were obsd. by using a mol.-beam maser spectrometer with 6-kHz resolution. The N quadrupole coupling strengths were $eqQ(1_{01}) = 2123.0 \pm 1.0$ kHz for DNCO and $eqQ(1_{01}) = 2052.7 \pm 1.0$ kHz for HNCO. High-precision values for the line-center frequencies and spin-rotation consts. are also reported.

C.A. 1972 46.8

DNCO

u.n.

Kickolich S.G., et al

1971

J. Amer. Chem. Soc.,

1971, 93, ~28, 6769.

(Cu. HNCO)III

HNCO
DNCO

1981

55976B Vibrational normal coordinate analysis of deuterated isocyanic acid and deuterated isothiocyanic acid. Orel, B.; Peterman, B.; Obradovic, M.; Hadzi, D.; Azman, A. (Chem. Inst. Boris Kidric, Univ. Ljubljana, Ljubljana, Yugoslavia). *Spectrosc. Lett.* 1971, 4(3-4), 39-41 (Eng). A vibrational normal-coordinate anal. of the ir spectra of HNCO, DNCO, HNCS, and DNCS supports frequency assignments of R. A. Ashby and R. L. Werner (1965) for HNCO and J. R. Durig and D. W. Wertz (1967) for HNCS.

Di,

cell. noc.

+1

C.A. 1981. 75. 8



CD_3NO_2

Papoušek D., et al. 1971

coll. n.

Collect. Czech. Chem.
Commun., 1971, 36,
~ 2,890.



($\text{Etter. CH}_3\text{NO}_2$) III

1874

XIV-238

DCNO

м.н.

 ν_i

X-18X/18

17 B257. Инфракрасные спектры DCNO: вращательный анализ полосы ν_1 . Sheasley W. David, Matthews C. Weldon, Ferretti Eugene L., Rao K. Narahari. Infrared spectra of DCNO: rotational analysis of the ν_1 band. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 2, 377—379 (англ.)

Измерен ИК-спектр поглощения молекулы DCNO (I) (газ) в области полосы ν_1 ($\sim 2590-2647$ см $^{-1}$). I приготовлялся смешением HCNO и D $_2$ O в газовой фазе. Наблюдалась разрешенная вращательная структура и R ветвей I ($0 \leq J \leq 42$). Определены молек. постоянные I: $\nu_0 = 2620,727 \pm 0,002$, $B'' = 0,34334 \pm 0,00006$, B' , $B'' = -(1,048 \pm 0,006) \times 10^{-3}$, $D'' = (1,4 \pm 0,2) \times 10^{-7}$, D' , $D'' = (1,3 \pm 0,4) \times 10^{-8}$ см $^{-1}$. А. Н. Александр

DCNO

XIV-238

1971

ИК-спектр

9 Д287. ИК-спектры DCNO; вращательный анализ
полосы ν_1 . Sheasley W. David, Mathews C. Wel-
don, Ferretti Eugene L., Rao K. Narahari.
Infrared spectra of DCNO: rotational analysis of the ν_1
band. «J. Mol. Spectrosc.», 1971, 37, № 2, 377—379 (англ.)

Получен ИК-спектр газообразной DCNO в области
3,7 мк, соответствующей основному колебанию C—D.
Образец получен изотопным обменом HCNO с D₂O.
Съемки проводились в кювете длиной 1 м, заполняемой
HCNO при давл. 1 мм рт. ст. с гелнем в кол-ве

м. н.

Ф. 1974. 9Ф

10 мм рт. ст. с добавлением D_2O при давл. 1 мм рт. ст. Т-ра кюветы поддерживалась в интервале от -30 до $-40^\circ C$. Приведены частоты наблюдаемых колебательно-вращательных линий и определены частота колебательного перехода, вращательные постоянные и их изменения при возбуждении колебания ν_1 . Наблюдены линии горячего перехода $\nu_1 \pm \nu_k - \nu_k$. Библ. 4. М. В. Тонков

DCNO

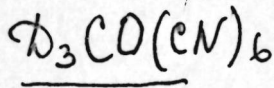
XIV-238

1971

93029g) Infrared spectra of DCNO: rotational analysis of the ν_1 band. Sheasley, W. David; Mathews, C. Weldon; Ferretti, Eugene L.; Rao, K. Narahari (Dep. Chem., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1971, 37(2), 377-9 (Eng). $D^{12}C^{14}N^{16}O$ was prepd. by filling a 1-m absorption cell with HCNO to 1 torr; an inert gas such as He, 10 torr was added, then D_2O 1 torr. The cell was cooled quickly to -30 to -40° . The rate of H-D exchange in this reaction exceeds by several orders of magnitude the rate of decompn. of HCNO. There was $\sim 20\%$ conversion to DCNO. The spectrum near 3.8μ ($2614-27 \text{ cm}^{-1}$) was examd. The line positions for $J = 1-42$ and the mol. consts. ν_0 , B'' , $B' - B''$, D'' , and $D' - D''$ are tabulated.

GXJN

C. H. 1971. 24. 18



1972

Güdel H.U.

(Vi, Uo)

"J. Chem. Phys.", 1972, 56,
N10, 4984-89.

(cnc $H_3CO(CN)_6$)

30115.8254

Ph, Ch

HCNO; DCNO (0;) 1972

41125

XIV 4506

Sheasley W. David, Mathews C. Weldon.

The ultraviolet absorption spectrum of
HCNO in the gas phase. "J. Mol.

Spectrosc.", 1972, 43, N 3, 467-471

(англ.)

Lo

0790 пик

776 779

ВИНИТИ

DOCH_2CN

1973

Cazzoli G.;
et al.

Uo; M.N. "J. Chem. Soc. Far. Trans"
1973, Part 2, 69, N4, 569-78.

● ($\text{CH}_4 \text{HOCH}_2\text{CN}$; III)

40730.9159

96615

1974

Ph, Ch, TC

SC(NO₂)₃

02

2284

Dakhis M.I., Shlyapochnikov V.A.Vibrational spectra and structure
of trinitromethane. "J. Mol. Struct.",
1974, 21, N 2, 305-310

(англ.)

0106 1974

133 134

158

ВИНИТИ

DNCO

omniscu 2918

1974

Kukolich S.C.

e^2q/K

Mol. Phys., 1975, 29,
N 1, 249-55

e^2q/k

Deuterium quadrupole
coupling in the gas phase

DCNO

10 Д609. Спектр молекулы DCNO в диапазоне миллиметровых волн; пример современных измерений в частотном диапазоне от 60 до 350 ГГц. Minnewisser Manfred, Winnewisser Brenda P. The millimeter wave spectrum of DCNO: an example of current measurements in the frequency range from 60 to 350 GHz. «Z. Naturforsch.», 1974, 29a, № 4, 633—641 (англ.)

Создана система автоматич. обработки микроволн. спектров молекул с привлечением ЭВМ. Система основана на многократном прохождении через линию поглощения и усреднении результатов измерений: для измерения положения центра линии при 500-кратном прохождении требуется около 3 мин, причем ошибка измерения частоты центра линии составляет $\approx 1/50$ ширины линии. В диапазоне 60—350 ГГц измерен микроволн. спектр молекулы DCNO. Идентифицированы линии вращательных переходов с $J \rightarrow J+1 = 0 \rightarrow 1 \div 15 \rightarrow 16$ в основном колебательном состоянии и переходов $1 \rightarrow 2 \div 13 \rightarrow 14$ в возбужденных колебательных состояниях 00010 и 00001. Определены значения вращательной постоянной ($B_0 = 10\,292\,4834$, $B_4 = 10306,0078$, $B_5 = 10338,6594$ МГц), постоянной центробежного искажения ($D_0 = 3,5418$, $D_4 = 3,6409$, $D_5 = 3,6208$) и постоянных l -удвоения ($q_5^{(0)} = 38,0898$, $q_4^{(0)} = 17,9099$ МГц, $q_5^{(1)} = 0,3025$, $q_4^{(1)} = 0,0644$ КГц). М. Р. Алнев

спектр

м.п.; герц.

ф. 1974
N10

1974

2155-5
*

40614.8837

Ch, Ph, TC

DCNO 54969

02

1974

микровактовый
измеритель

*45512 a

Winnewisser Manfred, Winnewisser Brenda F.

The millimeter wave spectrum of DCNO: an example of current measurements in the frequency range from 60 to 350 GHz.

"Z.Naturforsch.", 1974, 29a, N 4,
633-641

(АНГЛ.)

0130

105 103

0 1 2 2

ВИНИТИ

40626.8153

TC, Ph, Ch, Ex-C

41125 CR

1974

DNCО (сметр *4-5525)

Winnewisser Brenda P., Winnewisser
Manfred, Winther Flemming. The bending-
rotation spectrum of fulminic acid and
deuterofulminic acid. "J. Mol. Spectrosc",
1974, 51, № 1, 65-96

(АНГЛ.)

(см. HCNO ; III)

0439

115 117

ВИНИТИ

DCNO

XLS-10074

1975

XIV-6439

87812b Infrared spectrum of deuterated fulminic acid. The ν_2 band at 4.8 μm . Ferretti, Eugene L.; Rao, K. Narahari (Dep. Phys., Ohio State Univ., Columbus, Ohio). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 56(3), 494-6. (Eng). DCNO was prepd. by mixing HCNO 2.0 torr, D₂O 1 torr, and He 10 torr. Line positions and assignments ($J = 0 - 36$) are tabulated, 2071-2091 cm^{-1} , for the ν_2 fundamental band of D¹²C¹⁴N¹⁶O. The mol. consts. are derived and tabulated.

(Li.n)

C. A. 1975, 83 n10

DCNO

ЖЗ-10074

1975

XIV-6439

2 Д483. ИК-спектр DCNO: полоса ν_2 в области 4,8 мк. Ferretti Eugene L., Narahari Rao K. Infrared spectrum of DCNO: ν_2 band at 4,8 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 3, 494—496 (англ.)

и.к. спектр
поглащ.

Получен спектр ИК-поглощения газообразной DCNO в слое 1 м при давлении ~ 2 мм рт. ст. с разрешением $\sim 0,05$ cm^{-1} . Спектр связан с полосой ν_2 и соответствующими ей горячими переходами. Приведены частоты колебательно-вращательных линий основной полосы, определенные с точностью $\sim 0,005$ cm^{-1} . Для горячих переходов таких данных получить не удалось. По полученным

Ф 1976 N2

значениям частот с использованием данных для полосы ν_1 определены вращательная постоянная и постоянная центробежного растяжения молекулы в основном состоянии и их изменение при возбуждении различных колебаний. Библ. 5.

М. В. Тонков

* 4-10074

1975

DCNO

(м.п.)

XIV-6439

Литература

4 Б313. Инфракрасный спектр молекулы DCNO: полоса ν_2 при 4,8 мкм. Ferretti Eugene L., Nagrahari Rao K. Infrared spectrum of DCNO: ν_2 band at 4,8 μm . «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 3, 494—496 (англ.)

Измерена вращательная структура ИК-полос ν_2 , $\nu_2 + \nu_5 - \nu_5$, $\nu_1 + \nu_5 - \nu_5$ и $\nu_2 + \nu_4 - \nu_4$ молекулы DCNO, расположенных в области 2000—2600 cm^{-1} . Анализ спектра выполнен по сериальной ф-ле колебательно-вращательной энергии линейной молекулы и определены значения вращательной и центробежной постоянных для исследованных полос (ΔB и ΔD) и для нижнего колебательного состояния. Для состояний с $\nu_5=1$ и $\nu_4=1$ получены аномальные значения $D = -1,25$ и $0,21 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$ соответственно.

М. Р. Алиев

X. 1976. N 4

60129.9311

Ch, Ph, TC, MGU

35247 М.М.

ДНСС *с. 194*
М. В. Смирнов

1975

*45-11289

Hocking W.H., Gerry M.C.L., Winnewisser
Gisbert. The microwave and millimetre
wave spectrum, molecular constants, dipole
moment, and structure of isocyanic
acid, HNCO. "Can. J. Phys.", 1975, 53,
19, 1869-1901 (англ., рез. франц.)

521 526

53

3541

ВИНИТИ

XIV-6342

1975

исслед. и. н., по, тем. сфизике
(HCNO, DCNO, HNCO, ONCO)

Stone J. M. R.

J. Mol. Spectrosc., 1975, 54, N1,
179 (англ.)

10 (75)

Х 5-10072
XIV-6728

1975

DCNO

1 Д471. Микроволновый спектр дейтерированной
гремучей кислоты, DCNO, в возбужденных колеба-
тельных состояниях. Winnewisser Brenda P.,
Winnewisser Manfred. Millimeter wave rotation-
al spectrum of deuterofulminic acid, DCNO, in excited
vibrational states. «J. Mol. Spectrosc.», 1975, 56, № 3,
471—483 (англ.)

н.в.
Спектр

Измерены и анализированы вращательные переходы
молекулы DCNO в колебательных состояниях 00002,
00003, 00020 и 00011. Дано отождествление частот.
Обсуждаются результаты для каждого колебательного
состояния и дается сравнение с данными для HCNO.

1 п

Ф.1976 №1

*4-10072

1975

DCNO

4 Б319. Вращательный спектр деутерированной гре-
мучей кислоты DCNO в возбужденных колебательных
состояниях в области миллиметровых волн. Winne-
wischer Brenda P., Winnewisser Manfred.
Millimeter wave rotational spectrum of deuterofulminic
acid, DCNO, in excited vibrational states. «J. Mol. Spec-
trosc.», 1975, 56, № 3, 471—483 (англ.)

Измерены частоты вращательных переходов DCNO
в возбужденных колебательных состояниях 00002,
00003, 00020 и 00011 в области частот от 20 до 250 Гц.
Для всех состояний определены вращательные постоян-
ные B_v и D_v , а также параметры резонанса l -типа.
При ряде предположений методом наименьших квадра-
тов вычислены спектроскопич. постоянные колебатель-
но-вращательного взаимодействия: $q_i^{(i)}$, g_{ii} , γ_{ll_i} и ρ_{ii} .

Как и в случае HCNO, в спектре DCNO явно прояв-
ляется квазилинейность молекулы. Полученные резуль-
таты хорошо согласуются с известными данными по
ИК-спектрам.

С. Н. Мурзин

(v_i)
(м.п.)
XIV-6428

X.1976 N4

DCNO

X45-10072

1975

(u.n)

88555d Millimeter wave rotational spectrum of deuterioformic acid, in excited vibrational states. Winnewisser, Brenda P.; Winnewisser, Manfred (Phys.-Chem. Inst., Justus-Liebig-Univ., Giessen, Ger.). *J. Mol. Spectrosc.* 1975, 56(3), 471-83 (Eng). Rotational transitions of DCNO in the vibrational states 00002, 00003, 00020, and 00011 were measured and analyzed. These results complete the presentation of assigned mm wave transitions of DCNO. The anal. of rotational l-type resonance in the 00002 and 00020 states is more satisfactory in the case of DCNO than in that of HCNO due to the absence of accidental resonances. The values obtained for the vibrational anharmonicity const. g_{55} for 00002 and 00003 agree within exptl. error with those found from the vibrational spectrum. An ambiguity in the assignment of the symmetry of the transitions in the 4 components of the 00011 vibrational state is discussed.

C. A. 1975. 83. N8

51020.246

TC, Ch, EPh

41125

DCNO

1975

* 13-10071

Yamada_Koichi, Winnewisser Brenda P.,
Winnewisser Manfred. Vibration-rotation
interaction in HCNO caused by accidental
resonances and enhanced by the quasisline-
arity of the molecule. "J. Mol. Spectrosc."
1975, 56, N 3, 449-470 (англ.)

449 450

1975

ВИНИТИ

61115.115

Ch, TC, Ph

41125

CD₃NO₂

(unapp. spectra)

1976

15288

McKean D.C., Watt R.A. Vibrational spectra of nitromethanes and the effects of internal rotation. "J.Mol. Spectrosc.", 1976, 61, N 2, 184-202 (англ.)

(см. CH₃NO₂; III)

07.7.77

704 708

7.8.8

ВИНИТИ

60317-2229

06.1.76

60317-2229
 DND (M. V. Cherny) 1976
 5-14196

60317-2229

Huggins, J., Hocking W.H., Gerry
 M.C.L. Microwave spectra of molecules of
 astrophysical interest. X. Isocyanic acid.
 "J. Phys. and Chem. Ref. Data", 1976, 5,
 21, 79-99 (anhyd.)

0685 mm

660 663 677

BIBLITVA

CD₃NO

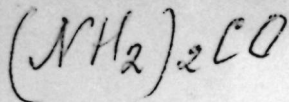
спектр
поглощ.

9-1980.N1

1979

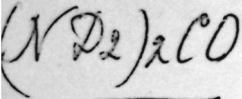
1 Д342. Конформационные изменения, сопровождающие процесс электронного возбуждения CD₃NO. Conformational changes accompanying electronic excitation of CD₃NO. Gordon Robert D., Luck Paula. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 65, № 3, 480—483 (англ.)

Получен и проанализирован спектр поглощения дейтерированного нитрозометана CD₃NO вблизи $\lambda=675$ нм. На основании проведенного анализа сделан вывод, что рассматриваемый электронный переход сопровождается конформационными изменениями от эклиптической формы в основном состоянии до заторможенной в возбужденном состоянии $\tilde{A}'A''(\pi\pi^*)$. Найдено, что величина барьера для внутреннего вращения увеличивается при этом от 383 до 475 ± 50 см⁻¹. Полученные результаты сопоставлены с соответствующими данными для CH₃NO. Библ. 12. Е. Н. Викторова



Ommuck 12055

1981



95:70104x Normal coordinate analysis, mean amplitudes and centrifugal distortion constants of urea- D_0 and - D_4 . Diaz, G.; Campos, M. (Dep. Quim., Univ. Chile, Valparaiso, Chile). *Spectrosc. Lett.* 1981, 14(5), 365-77 (Eng). A normal coordinate anal. for urea was performed. The final force field was carried out through an iterative self-consistent method and was used to calc. the potential energy distribution of Urea- d_0 and - d_4 . The mean amplitudes confirm the characteristic values reported in the literature, and the calcd. centrifugal distortion consts. are in agreement with the exptl. ones.

спектр. анализ.
конст.

центриробеж.
расшир.

CA 1981, 95, N8

Оттиск 13167

1981

N-O-отаника

(структура)

Kydd R.A., Rauck A.,

J. Mol. Struct.,
1981, 77, N3-4, 227-

● 238.

DNCO

1981

Sengodan V., Sriniva.
Sachaya K. G.

u. n.;

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1981, 19, N10,
1024 - 1026.

(cu. HCOF; III)

2 NCO

Ом. 129 86

1981

4 Д534. ИК-спектр дейтероизоциановой кислоты в области полосы фундаментального колебания ν_1 . Infrared spectrum of the fundamental ν_1 of deuterio-isocyanic acid. Steiner D. A., Polo S. R., McCubbin T. K., Jr., Wishah K. A. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 10, 1313—1326 (англ.; рез. фр.)

ν_1 , м.п.

Исследован ИК-спектр ($2780-2420 \text{ см}^{-1}$) газообразной дейтеро-изоциановой кислоты (I) в области полосы вал. к-л. ν_1 связи $\text{N}-\text{D}$. Проведен теоретич. анализ компонент вращательной структуры ИК-полосы ν_1 I. Частота максимума полосы ν_1 составляет $2637,198 \text{ см}^{-1}$.

Идентифицированы ИК-полосы 18 компонент вращательной структуры полосы ν_1 I. Определены значения эффективных вращательных постоянных B_v и констант центробежного искажения D_v и H_v . Отмечено эффективное взаимодействие колебания ν_1 и обертона колебания ν_3 ($\nu_{2\nu_3}$, $\sim 2640 \text{ см}^{-1}$). Библ. 18. И. В. А.

ф. 1982, 18, № 4.

DNCO

Commuck 12986

1981

ν_1

' 95: 228619f Infrared spectrum of the fundamental ν_1 of deuterioisocyanic acid. Steiner, D. A.; Polo, S. R.; McCubbin, T. K., Jr.; Wishah, K. A. (Dep. Phys., Pennsylvania State Univ., University Park, PA 16802 USA). *Can. J. Phys.* 1981, 59(10), 1313-26 (Eng). The ν_1 fundamental band of DNCO was obsd. for the 1st time under high resolu. The band origin for this D-N stretching vibration is 2637.198 cm^{-1} , rather distant from the previously reported value of 2634.9 cm^{-1} . Eighteen subbands were analyzed and term values for both ground and ν_1 states with K up to 6 were obtained. Effective rotational consts. B_v and centrifugal distortion consts. D_v and H_v were detd. An interaction was obsd. with the $2\nu_3$ vibration which has a band origin around 2640 cm^{-1} . Interesting perturbations are obsd. for the $K = 0$ and $K = 4$ levels of ν_1 .

C. A. 1981, 95, N26.

DNCO

Ом. 12986

1981

9 Б257. Инфракрасный спектр основной полосы ν_1 дейтероизоциановой кислоты. Steiner D. A., Polo S. R., McCubbin T. K., Wishah K. A. Infrared spectrum of the fundamental ν_1 of deuterio-isocyanic acid. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 10, 1313—1326 (англ.)

На дифракционном спектрометре изучена с высоким разрешением основная ИК-полоса ν_1 молекулы DNCO. Наблюдены 18 подполос параллельного типа, 15 из к-рых отнесено к полосе ν_1 и 3 к полосе 2 ν_3 , и несколько перпендикулярных подполос, отнесенных к ν_1 .
В. М. Михайлов

ν_1 , м.п.

Х. 1982, 19, № 9.

DCNO

1982

Vi, спектры
в
матрице

Bondybeu V. E.,
English J. H., et al.
J. Mol. Spectrosc.
1982, 92, 112, 431-
442.

●
(сер. HNCO; III)

$C_2 D_3 N_3 O_2$

1982

Харитонов Ю. Я.,
и др.

V_i , смч.
посл.

ЖС. Морган. Исследования,
1982, 27, N2, 305-310.

●
(см. $C_2 H_3 N_3 O_2$; III)

$D_2NCONNCOND_2$

1982

Каритонов Ю. Я.,
Балоян Б. М. и др.

колебаний.

спектры.

Ж. Неорг. хим. Желт.,
1982, 27, N 6, 1381 -
-1386.

(соед. $H_2NCONNCONH_2$; III)

Ommuck 13213

1982

CD_3ONO

CN_2O_2

P, LK enemp

Rook F.L.,

J. Chem. and Encl Data,
1982, 27, N1, 72-73

III

CD₃ONO

[Om muck 14007]

1982

Rook F.L., Jacox M.E.

ul creep,
Di

J. Mol. Spectrosc., 1982,

93, N1, 101-116.

ANCO

1984

Mohan S., Gunasekaran S.

J. Chim. Phys. et Phys.-
Chim. Biol., 1984, 81, n4,
255-260.

● (ser. MN₃; III)

сер.
носеу.,
сер. п.

CD_3NO_3

1986

Bock Ch. W., Krasno-
chchiokov S. V., et al.

et. n. Chem. Phys., 1986,
106, N 1, 69-73.

(ср. CH_3NO_3 ; III)

CD_3ONO_2

1986

Veken B. J. van der,
Guirgis G. A., et al.

u. n.

J. Mol. Struct., 1986,
142, 105-110.

(cen. $\bullet$ CH_3ONO_2 ; iii)

CD₃ ND₂

(om. 26091)

1987

Bock Ch.W., Krasnosheki-
orov S.V., et al.,

смыслна,
ab initio
pacem

J. Mol. Struct. (Theochem),
1987, 149, 201-211.

ANCO

1989

Krishnan S. Sampath,
Sankar B. N. et al.

Asian J. Chem. 1989,
1 (4), 401-5.

cell,
no cell.

(cell.  HNCO; III)

NNO-DCN

1990

вращающ.
спектр
и.п.

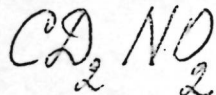
Pearley D. J.,

Kukulich S. B.

J. Chem. Phys. 1990,

93(6), 3881-6.

(see.  NNO-HCN; III).



1991

CD_2NO_2^- Metz R. B., Cyr D. R.,
et al.

u. n. J. Phys. Chem. 1991.
95, N 7. C. 2900-2907.

(cell.  CH_2NO_2^- ; III)

1995

F: NO₂CHD₂

P: 3

1B1255. Вклады внутренней динамики в спектры CH валентного обертона газообразного моногидрированного нитрометана NO₂CHD₂. Internal dynamics contributions to the CH stretching overtone spectra of gaseous monohydrogenated nitromethane NO₂CHD₂ / Cavagnat D., Lespade L., Lapouge C. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 24. - С. 10502-10512. - Англ.

На ИК-фурье-спектрометре в области частот 2800-12 000 см⁻¹ с разрешением 1-2 см⁻¹ измерены спектры CH валентного обертона газообразного моногидрированного нитрометана NO₂CHD₂ для 'ДЕЛЬТА'ню'[CH]=1, 2, 3, 4, 5 и 6. Модельные параметры и их вариация вследствие внутреннего вращения определены с учетом расчетов из первых принципов. Библ. 65.

РМХ 1997

DCNO
HCNO

Am. 40335 "a"

2000

Schulze G, Kojima O, et al.,

J. Mol. Struct. 2000,
577-578, 307-325

High resolution FTIR spectra
of DCNO and HCNO.