

N-Hal



NO_2F , NO_2Cl , COH_2

$\bar{\chi} - 768a$

1962

COD_2 , CSCl_2 (cur. no. S° , C_p°)

Venkateswarlu K., Rajalakshmi K.V.

Urey-bradley force field and
thermodynamic properties: planar
 XVZ_2 type molecules.

Acta phys. polon., 1962, 22, N5,

417-421.

1966

Okuzaroremu

Ozofa

Vibrational spectra of some nitrogen oxyhalides. Robert
Hassler Miller (Pennsylvania State Univ., University Park).
Univ. Microfilms (Ann Arbor, Mich.), Order No. 66-4832, 120 pp.;
Dissertation Abstr. 26(11), 6393-4(1966)(Eng). SNDC

C.A. 1966. 65.6

8909a

1987

9 Д228. ИК-спектры изотопных галогенидов нитрила.
Bernitt D. L., Miller R. H., Hisatsune I. C.
Infrared spectra of isotopic nitril halides. «Spectrochim.
acta», 1967, A 23, № 2, 237—248 (англ.)

Исследованы ИК-спектры N¹⁴ и 15 изотопных соединений нитрилхлорида и нитрилфторида в газообразном и твердом состояниях. Внесены изменения в отнесение, сделанное ранее. Оказалось, что полоса при 460 см⁻¹, ранее приписанная колебанию фторида, обусловлена загрязнениями. На основе силового поля Юри — Брэдли, а также валентного силового поля рассчитаны термодинамич. и силовые постоянные. Библи. 23.

09.1987. 92

¹⁴N₂ Hal
¹⁵N₂ Hal

un-conv
un. rec.

1987

70471r Infrared spectra of isotopic halogen nitrates. Robert H. Miller, Daniel L. Bernitt, and Isamu C. Hisatsune (Pennsylvania State Univ.; University Park). *Spectrochim. Acta* 23A(2), 223-36(1967)(Eng). The ir spectra of halogen nitrates contg. ¹⁴N and ¹⁵N have been investigated in the gas and solid phases. All 9 fundamentals, including 2 previously unobserved ones, have been identified in the spectrum of F nitrate. In Cl nitrate one of the 2 previously unobserved fundamentals has been assigned, but the 2nd fundamental could not be observed. This frequency was therefore estd. from combination bands. Thermodynamic properties, barriers to internal rotation, and valence force consts. for the halogen nitrates have been computed. 33 references.

RCSQ

C. A. 1987. 66. 16

N-Hal Чаркев О.П., 1968

N-O-Hal Дяткина М.Б.

И. структур. химии,
1968, 9, № 675.

Рассмотрены стро-
ние молекулярных ионов
типа $MX'X^+$, $MX'X''X^+$, $MX'X^+$,
 $MX'X''X'''X^+$ ● $MX'X'X^+$, $MX'Y^+$, ix
 $X = F, Cl, Br, I, CH_3$; $Y = O, S, Se, \dots$
(сер. B-Hal) IV

N-O-Hal

см. на об.

среднекв.

активн.

колеб.

Варан Эн. 4

Z. Naturforsch A, 1940,

25, (8/9), 1292.

(см. P-O-Hal) III

ZXY_2	$T^\circ K$	$u(XY)$	$u(XZ)$	$u(Y...Y)$	$u(Y...Z)$
FNO_2	298,2	a 0,0380	0,0481	0,055	0,059
		b 0,0376	—	0,058	—
		c 0,0381	0,0498	—	0,053
		a 0,0389	0,0472	0,052	0,055
		b 0,0376	—	0,053	—
		c 0,0381	0,0489	—	0,051
$ClNO_2$	298,2	a 0,0388	0,0434	0,056	0,063
		b 0,0384	—	0,062	—
		c 0,0390	0,0452	—	0,062
		a 0,0387	0,0425	0,053	0,055
		b 0,0384	—	0,056	—
		c 0,0389	0,0443	—	0,054

N-Hal

Potts A.W. et al. 1970

Phil. Trans. Roy. Soc.

London, A 268, N 1184,
59-76.

(see B-Hal) III



копиров.
чек

N-Hal

Radom Z., et al. 1971

не эквивалент
фосфор.
экстр. стр.

J. Amer. Chem. Soc.,
1971, 93, ~ 2, 289.

кв-мех
результ



(C₆H₅-N)^{III}

Защита от азота
улучшения азота

1975

48522n Bond angles in halides and hydrides of nitrogen and oxygen. Glidewell, C. (Chem. Dep., Univ. St. Andrews, St. Andrews/Fife, Scot.). *Inorg. Nucl. Chem. Lett.* 1975, 11(5), 353-7 (Eng). A no. of mol. geometries are rationalized using a hard-atom model, somewhat similar to that used with such conspicuous success in describing the structures of simple ionic compds. in the solid state. The examples are sufficient to indicate that factors other than electron-pair repulsions may be important in detg. the structures of simple inorg. derivs. of 1st-row elements, and that a reappraisal, in light of the steric model, of the present dominating position of the valence-shell electron-pair repulsion method as a guide to mol. geometry may be appropriate.

См. 48522.

(+3)

☒

Окислы азота
улучшения окислов азота

C. A. 1975, 83 n 6

H-2a000000. 7. 11/11/1977 N.

1977

88: 43357f Hydrogen halide, molecular nitrogen double doping experiments in monatomic matrixes: Near infrared spectra and symmetry properties of the intermolecular potential. Maillard, D.; Schriver, A.; Perchard, J. P.; Girardet, C.; Robert, D. (Lab. Spectrochim. Mol., Univ. Pierre et Marie Curie, Paris, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1977, 67(9), 3917-35 (Eng). The IR spectra of monomeric and dimeric hydrogen halides trapped in mixed N-rare gas matrices were recorded for various N-rare gas ratios. The anal. of the displacement of the monomer and dimer band frequencies strongly suggests the formation of $HX-N_2$ aggregates inside the monat. crystal when varying this ratio from pure rare gas to pure N. A convenient anal. form is proposed in order to describe the interaction potential energy between the foreign mols. and the matrix. Numerical procedures based on realistic but traceable models for the representation of the doped crystal structure were used in order to calc. the conformation of some aggregates inside the crystal and to prove the strong tendency for foreign mols. to agglomerate each other. The behavior can be explained of the HX monomer and dimer bands frequencies that decrease when doping with N_2 mols. down to a min. for a N_2 -rare gas ratio 60%-70% and then increase up to the HX -pure N frequencies, in terms of a symmetrization process in the conformation of the aggregates around the HX [or $(HX)_2$] mol.

U. R. C. C. C.
B. M. A. T. J. P.

C. H. 1978, 88,
86

70419.3759

Ch, TC, MGU

96559



1977

X 4-18284

Refaey Kamel M. A., Franklin J. L.

Endoergic ion-molecule collision processes of negative ions. VI. Collisions of I^- on $(CN)_2$ and $NOCl$. "Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.", 1977, 23, N 1, 13-20 (англ.)

0855 ББК

820 827

2 46

ВИНИТИ

NH_3OHF

[ommica 1162]

1981.

NH_3OHCl

Jayassoriya U. A.
et al.

NH_3OHBr

NH_3OH^+

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. II, 1981, 77,
287-98.

и.к. раман
спектр ν_i
расчет барьера
вращения - NH_3^+
~~Librational and torsional~~

Librational and Torsional
modes in ...

1984

NH_3
 $X = hal.$

5 B1115. Электронное строение соединений элементов V группы ER_3 ($E = N \rightarrow Sb$; $R = H, Hal$). Сопоставление фотоэлектронных спектров и расчетов методом $SCC-X_\alpha$. The electronic structures of the group V series ER_3 ($E = N \rightarrow Sb$; $R = H, Hal$). An intercomparison of photoelectron spectra and $SCC-X_\alpha$ calculations. Grodzicki Michael, Walther Horst, Elbel Susanne. «Z. Naturforsch.», 1984, B39, № 10, 1319—1330 (англ.)

фотоэлектрон. спектры

С использованием источника возбуждающего излучения He-I измерены фотоэлектронные спектры (ФЭС) тригидридов и тригалогенидов элементов V группы ER_3 ($E = N \rightarrow Sb$; $R = H, Hal$). ФЭС интерпретированы на основе качеств. C_{3v}/D_{3h} -модели, позволяющей исследовать изменения спектра МО и распределения заряда МО при переходе от плоского фрагмента R_3 к системам ER_3 , симметрии к-рых соответствуют точечным группам D_{3h} и C_{3v} соотв. Исследованы тенденции изменения ФЭС вдоль изучаемых рядов, обусловленные

1X
 (+6)

X. 1985, 19, N5

$NH_3, AsH_3, SbH_3,$

замещением центрального атома или атомов R. Методом самосогласования по заряду в приближении обменного X_α -потенциала (ССЗ- X_α), а также расширенным методом Хюккеля рассчитано электронное строение и проведен анализ заселенностей МО в соединениях ER_3 ($E=N \rightarrow Sb$, $R=H, Cl$) и AsR_3' ($R'=H, F, Cl, Br, J$). Параметры метода ССЗ- X_α оптимизировались на основании известных атомных х-к, а также молек. потенциалов ионизации и дипольных моментов. Показано, что валентные электронные плотности обоих исследованных рядов ER_3 имеют характеристич. тенденцию к делокализации при переходе к более тяжелым гомологам. Установлена корреляция между пр-ной волновой ф-ции $\partial\psi/\partial r$ верхней занятой МО и жесткостью оснований (жесткость уменьшается при переходе от NCl_3 к $SbCl_3$).

И. А. Тополь

PR_3 ($X = \text{галоген}$)
 AsR_3 ($X = \text{галоген}$)
 SbR_3 ($X = \text{галоген}$)



NHXY

1985

Yabushita Satoshi,

Gordon Mark S.

ab initio
pairing

Chem. Phys. Lett.

1985, 117(4), 321-5.

(cell. NH_2X ; III)

NH_2X

1985

103: 59643k Inversion barriers in NH_2X , PH_2X , $NHXY$, and $PHXY$ species. Yabushita, Satoshi; Gordon, Mark S. (Dep. Chem., North Dakota State Univ., Fargo, ND 58102 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1985, 117(4), 321-5 (Eng). Ab initio calcns. are presented on the inversion barriers in mono-substituted amines and phosphines (NH_2X and PH_2X) and their radical analogs. As expected, using MP3/6-31G* energies, PH_2X barriers are rather larger than those for the corresponding NH_2X and electroneg. substituents increase the barriers. CN substitution causes a dramatic decrease in the NH_3 barrier. All of the radical N species studied are predicted to have small or zero barriers, and the radical NH_2O is predicted to be planar. PH_2O also has a very small barrier.

Vurberc.

PH_2X (Vurberc.)

(43) 



$NHXY$, $PHXY$ (ab initio
racem)

C. A. 1985, 103, N8.

$X-(N_2O)_2$

1993

$X = F, Cl, Br, I$

118: 261807g Comparative study of the gas-phase bond strengths of carbon dioxide and nitrous oxide with the halide ions. Hiraoka, Kenzo; Aruga, Kazuo; Fujimaki, Susumu; Yamabe, Shinichi (Fac. Eng., Yamanashi Univ., Kofu, Japan 400). *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 1993, 4(1), 58-64 (Eng). Thermodyn. data, $\Delta H_{n-1,n}^\circ$ and $\Delta S_{n-1,n}^\circ$, for clustering reactions of halide ions X^- ($X = F, Cl, Br, \text{ and } I$) with N_2O were measured with a pulsed electron beam high-pressure mass spectrometer. In contrast to the fact that CO_2 forms a covalent bond with the fluoride ion to yield the fluoroformate ion, FCO_2^- , the interaction between F^- and N_2O is mainly electrostatic. The cluster ions $F^-(N_2O)_n$ complete the first shell at $n = 6$, thus forming an octahedral structure. The difference between $F-CO_2^-$ and $F^-(N_2O)_6$ is discussed in terms of Coulombic, exchange, and charge-transfer interactions. The $X^-(N_2O)_2$ clusters ($X = Cl, Br \text{ and } I$) are found to be of C_{2v} symmetry, while $F^-(N_2O)_2$ is of a twisted form and is slightly asym. due to a slight participation of covalency (charge transfer) in the core ion $F^-(N_2O)$.

смысл,
группе
chem

C.A. 1993, 118, N 26