

NF₂

1931

Ruff O., Staub L.NF₂Z. anorg. allgem. Chem., 1931, 198, 32.

III - 1134

1956

HF_3^+ , HF_2^+ , NF^+ , H^+ , F^+ , F_2^+ , F^- (A.P.)

HF_2 , HF (I)

Reese R.M., Dibeler V.H.,
J.Chem.Phys., 1956, 24, N 6, 1175-1177
(англ.)

Ионизация и диссоциация электронным
ударом.

РЖХ, 1957, № 4, 10840

Весь ср. к.

ВМ

1959

Electron spin resonance spectrum of the NF_2 radical isolated in a neon matrix at 4°K. Paul H. Kasai and Earl B. Whipple (Union Carbide Res. Inst., Tarrytown, N.Y.). *Mol. Phys.* 9(5), 497-9(1959)(Eng). This spectrum was obtained at a frequency of 9.43 kMc. The overall pattern of the spectrum has the characteristic asymmetry expected for a system with a severe hyperfine anisotropy. The components of the hyperfine interaction and the g values are given. The results are consistent with the unpaired electron of this mol. being in an anti-bonding π orbital.

BGJN

чекер
НП

в максиме

C.A. 1966. 64.4

4483 ab

М - 1027

H_2F_4 (I, А.Р.МОИОВ : HF_2^+ , HF^+) 1960

D / (PI-P); (F_2H-HF_2) /
P (A)

Loughran E.D., Mader C.

J.Chem.Phys., 1960, 32, n 5, 1578-
1579 (англ.)

Исследование тетраэторгидразина путем
измерения потенциалов появления.

РХ., 1961, 3Б123



Σγ2 φεζακ.

10 M

NF_2
 ч.к.

7Б62. Инфракрасный спектр и структура радикала NF_2 . Harmony Marlin D., Myers Rollie J., Schön L. J., Lide David R., Jr, Mann D. E. Infrared spectrum and structure of the NF_2 radical. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 3, 1129—1130 (англ.).—Получен ИК-спектр радикала NF_2 , находящегося в равновесии с N_2F_4 при t -рах 25—175°. Кювета (9 см) из пирекса была снабжена окнами из NaCl или AgCl ; начальное давление N_2F_4 составляло 1—10 мм рт. ст. Одна из двух наблюдаемых полос (центр при 1074 см^{-1}) имеет отчетливую вращательную структуру и может быть приписана симм. вал. кол. NF_2 $\nu_1(a_1)$. Вторая полоса (930—940 см^{-1}) сильно маскируется поглощением N_2F_4 ; она трактуется как $\nu_3(b_1)$. На основании определенных из вращательной структуры мол. констант и в предположении, что расстояние $\text{N}—\text{F}$ равно 1,37 Å, рассчитан угол $\angle \text{FNF}$ 104,2°. При снятии спектров радикала, находящегося в матрице (N_2 , 20° K), значения ν_1 и ν_3 оказались равными соответственно 1069,6 и 930,7 см^{-1} , в согласии с тем, что для подобных молекул в матрице N_2 вал. кол. оказываются примерно на 5 см^{-1} ниже, чем в газовой фазе.

к.1962.4

В. Дианов-Клоков

1196

373

-802
 III

NF₂

u.k.

Spiegel

III - 802

1961

373

Infrared spectrum and structure of the NF₂ radical. Marlin D. Harmony, Rollie J. Myers (Univ. of California, Berkeley), L. J. Schoen, David R. Lide, Jr., and D. E. Mann. *J. Chem. Phys.* 35, 1129-30(1961).—N₂F₄ was heated to 25-175° and the infrared spectrum was studied. New bands which appeared on heating disappeared when the sample was cooled. The equil., $N_2F_4 \rightleftharpoons 2NF_2$, was assumed. The new bands were used to est. an F—N—F angle of 104.2°.

Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1962:56:6
5545d

NF_2

III-802

1961
373

и.к.

структура

4 B144. Инфракрасный спектр и структура радикала NF_2 . Harmony Marlin D., Myers Rollie J., Schoen L. J., Lide David R., Jr, Mann D. E. Infrared spectrum and structure of the NF_2 radical. «J. Chem. Phys.», 1961, 35, № 3, 1129—1130 (англ.)

Краткое сообщение об исследовании вращательной структуры полосы поглощения 1074 см^{-1} радикала NF_2 (I) (образующегося при нагревании N_2F_4), соответствующей сим. вал. кол. $\nu_1(a_1)$. Из анализа получены значения: $\nu_0 = 1074,3 \pm 0,1 \text{ см}^{-1}$ и $A'' - 1/2 (B'' + C'') = A' - 1/2 (B' + C') = 1,98 \pm 0,01 \text{ см}^{-1}$. Угол FNF равен $104,2^\circ$ при длине связи N—F $1,37 \text{ \AA}$. В спектре наблюдалась также полоса I $\nu_3(b_1)$ в области $930\text{—}940 \text{ см}^{-1}$, которая частично перекрывается поглощением N_2F_4 . Измерения ИК-спектров I в твердой азотной матрице при 20°K дали значения $\nu_1 = 1069,6$ и $\nu_2 = 930,7 \text{ см}^{-1}$. Подробное сообщение будет опубликовано позднее. В. Н.

РЖО 1962

4B144

БФ-803-III

1961

[NF₂]NF₃N₂F₂N₂F₄

(12Б28.) Масс-спектрометрическое исследование NF₂, NF₃, N₂F₂ и N₂F₄. Herron John T., Dibeler Vernon H. Mass spectrometric study of NF₂, NF₃, N₂F₂, and N₂F₄. «J. Res. Nat. Bur. Standards», 1961, A65, № 5, 405—409 (англ.).—На масс-спектрометре исследована диссоциация и ионизация электронным ударом молекул NF₂, NF₃, N₂F₂ и N₂F₄. Ионный источник был снабжен спец. печью, в которой происходила диссоциация N₂F₄ ⇌ 2NF₂. Исследование последней р-ции позволило непосредственно определить энергию диссоциации $D(F_2N-NF_2) = 21,5 \pm 1,6$ ккал/моль. Измерение потенциалов ионизации и потенциалов появления и идентификация процессов, приводящих к образованию осколочных ионов, позволили определить следующие энергетич. характеристики исследованных молекул. Потенциалы ионизации (в эв): NF ≤ 12,4 ± 0,3, NF₂ 12,0 ± 0,1, NF₃ 13,2 ± 0,2, транс-N₂F₂ 13,1 ± 0,1, N₂F₄ 12,0 ± 0,1; энергии связи N—F (в ккал/моль): в NF₂ 70,5 ± 1,6; F₂N—F 58,4 ± 4,4; цис-FN=NF 106 ± 10, транс-FN=NF 103 ± 10. Е. Ф.

х.1962.12.

1961

 NF_2 ΔH_f

Herron J.T., Dibeler V.K.,

J. Chem. Phys., 1961, 35, 747 (N2)Масс-спектрометрическое измерение и термическая сущность ΔH_f NF_2 .

$$T = 300 \div 400^\circ \text{K}$$

 ΔH_f для распада $\text{NF}_2 = 2\text{NF}_2$ $21,5 \pm 1,6$ ккал/мольЗначит $\Delta H_f(\text{NF}_2) = 9,8 \pm 2,1$ ккали $D(\text{N-F})_{\text{в NF}_2} = 70,5 \pm 1,6$

ккал

1961

NF_2 Johnson F. A., Colburn Ch. B.,
 ΔH_f J. Am. Chem. Soc., 1961, 83, 3043.

Равновесие испарения и конденсации -

- гетерогенная реакция

на активном и неактивном газе

~~5-м из 10-ти~~ ~~использована таблица~~
 по работе Johnson F. A. и др. 200 стр., в
 которой приведены данные по реакции
 $N_2 + 2NF_2 \rightleftharpoons 2N_2F_4$ и дано $\Delta H_{298} = 21,7$ ккал/моль,
 энтропия $DS = 45,0$ э.е.

Коэффициент испарения α для смеси газов
 равен 5-6 раз больше, чем для чистого
 вещества в интервале 100-150°C дано $\Delta H = 19,85$ ккал
 и $DS = 39,90$ э.е. +

Notwithstanding, N_2F_4 was homogeneous fraction-
very high fractionation observed in N_2F_4 labels.
L. W. Cole, R. Ettinger found N_2F_4 and NF_3 separation
in presence of N_2F_4 and NF_3 separation in
absence (rare cases). Many other
homogeneous fractionation.

Notwithstanding, N_2F_4 was $\Delta H = 20.8 \pm 1$ kcal/mol

But $\Delta(NF_3-F)$ ~~homogeneous~~ ^{homogeneous} 55-57 kcal/mol, N_2F_4 and NF_3
separation with $N-F$ is 70, 4 kcal/mol. 2nd co-
mixture is N_2F_4 and NF_3 mixture with $N-F$ 6

N_2F_4 and NF_3 , and $\Delta(N-N) = 20.8$ kcal/mol

$\Delta H_f(NF_3) = 9.4$ kcal/mol. Notwithstanding, N_2F_4 and NF_3 -

the N_2F_4 and NF_3 mixture $\Delta(NF_3-F)$

to N_2F_4 and NF_3 mixture $\Delta(N-N) = 20.8$ kcal/mol
in N_2F_4 and NF_3 mixture. $\Delta(N-N) = 20.8$ kcal/mol

NF₂

1961
Kennedy H., Colburn C.B.

III
804-111

Измерение связей N-F в
NF₃ и N₂F₄.

J. Chem. Phys., 1961, 35 (5),
1892.

(Coll. NF, III)

NF₂

235191

Piette L. H., Johnson F. A.,
 Booman K. A., Colburn Charles

Исследование равновесия мет.
 рафтиоридрагит - дифторо-
 мин методом электрон-
 ного парамагнитного резо-
 нанса.

X.1962.23

"J. Chem. Phys." 1961, 35, №4, 1481-

1482 (ansl.)

14 B116. Инфракрасный спектр и термодинамические функции радикала NF_2 . Harmony Marlin D., Myers Rollie J. Infrared spectrum and thermodynamic functions of the NF_2 radical. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 3, 636—641 (англ.)

Получен ИК-спектр поглощения NF_2 в матрице N_2 при 20°K и найдены частоты основных колебаний (в см^{-1}) $\nu_1 = 1069,5 \pm 0,5$, $\nu_2 = 573,4 \pm 1,0$ и $\nu_3 = 930,7 \pm 5$. Для сравнения получены также полосы поглощения твердого N_2F_4 при 77°K в области $300\text{—}4000 \text{ см}^{-1}$. Вычислены силовые постоянные NF_2 (в 10^5 дн/см): $K_1 = 5,1 \pm 0,5$, $K_\alpha/r^2 = 1,15 \pm 0,15$, $K_{11} = 1,5 \pm 0,5$ и $K_{1\alpha}/r = 0,4 \pm 0,3$. Исследована кинетика диссоциации N_2F_4 . При комнатной т-ре и давлении ниже 1 мм рт. ст. разложение N_2F_4 происходит довольно медленно, а с увеличением т-ры до 400° период полураспада N_2F_4 уменьшается до ~ 1 сек. В предположении, что $\nu_1 = 1074 \text{ см}^{-1}$, по данным исследования ИК-спектра NF_2 в газообразном состоянии, $r_{\text{NF}} = 1,37 \text{ \AA}$ и $\angle \text{FNF} = 104,2^\circ$, вычислены термодинамич. функции C_p^0 , $-(F^0 - H_0^0)/T$, S^0 и $(H^0 - H_0^0)/T$ для NF_2 в идеальном газовом состоянии в приближении жесткий ротатор — гармонич. осциллятор при давл. 1 атм и в интервале т-р $273,15\text{—}3000^\circ \text{K}$.

В. Юнгман

1962

2526

III-66-91

NF_2

X. 1963.14

WF₂

9 Д201. ИК-спектр и термодинамические функции радикала NF_2 . Harmony Marlin D., Mayers Rollic J. Infrared spectrum and thermodynamic functions of the NF_2 radical. «J. Chem. Phys.», 1962, 37, № 3, 636—641 (англ.)

Измерены 3 основные колебательные частоты радикала NF_2 в азотной матрице при т-ре 20°K ($\nu_1 = 1069,6 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$; $\nu_2 = 573,4 \pm 1,0 \text{ см}^{-1}$; $\nu_3 = 930,7 \pm 0,5 \text{ см}^{-1}$). Исследован также ИК-спектр N_2F_2 и подтверждено, что диссоциация N_2F_4 с образованием NF_2 происходит при низком давлении. При комнатной т-ре и давлении ниже 1 мм рт. ст. диссоциация N_2F_4 происходит медленно и ускоряется с повышением т-ры. Длительность процесса диссоциации порядка 100 сек. при комнатной т-ре и около 1 сек. при т-ре 100°C . Затабулированы термодинамич. ф-ции, вычисленные для радикала NF_2 обычными методами. Указано, что хотя при расчетах использовались значения частот ν_2 и ν_3 , ошибка вследствие этого пренебрежимо мало сказывается на значениях термодинамич. ф-ций. Библи. 15 назв.

1963

93552-25525
III-159

ф. 1963. 9

NF₂

и.к. спектр

III - 3084

1962

13 Б137. Инфракрасный спектр NF₂. Johnson
Frederic A., Colburn Charles B. The infrared
spectrum of NF₂. «Inorgan. Chem.», 1962, 1, № 2, 431—
432 (англ.)

Получен ИК-спектр поглощения радикала NF₂ в
области 8—16 μ , возникающего при диссоциации N₂F₄.
Для устранения наложения спектров NF₂ и NF₄ в луч
сравнения спектрометра помещалась кювета с N₂F₄
под высоким давлением, что обеспечивало малое отно-
сительное содержание в ней NF₂. В спектре наблю-
даются сильные полосы у 920, 980 и 730 см⁻¹ и слабая
широкая полоса у 1100 см⁻¹. Ю. Мазуренко

2.1964.13

WF₂

III - 3084

1962

1 Д141. ИК-спектр NF₂. Johnson Frederic A., Colburn Charles B. The infrared spectrum of NF₂. «Inorgan. Chem.», 1962, 1, № 2, 431—432 (англ.)

Получен ИК-спектр поглощения радикала NF₂ в области 8—16 м, возникающего при диссоциации N₂F₄. Для устранения наложения спектров NF₂ и NF₄ в луч сравнения спектрометра помещалась кювета с N₂F₄ под высоким давлением, что обеспечивало малое относит. содержание в ней NF₂. В спектре наблюдаются сильные полосы у 920, 980 и 730 см⁻¹ и слабая широкая полоса у 1100 см⁻¹.
Ю. Мазуренко

ф. 1963. 18.

NF₂

encl.

OCN. 225561

III - 3084

1962

The infrared spectrum of NF₂. Frederic A. Johnson and Charles B. Colburn (Redstone Arsenal Res. Div., Huntsville, Ala.). *Inorg. Chem.* 1, 431-2(1962). By differential spectrophotometric technique, the infrared spectrum of NF₂ was detd. in the presence of N₂F₄. The difluoroamino radical, NF₂, shows strong bands at 920, 980, and 730 cm.⁻¹, with a weak broad peak at 1100 cm.⁻¹ Ernest J. Breda

C.A. 1962.57.3

2994e

1962

NF₂, NF₃

mefun chyn

Some theoretical aspects of bonding in N-F compounds. Joyce J. Kaufman (RIAS, Baltimore, Md.). *J. Chem. Phys.* 37, 759-64(1962). A sepn. of the effects of substituent groups into distinct σ and π contributions and the influence of the σ and π contributions on Hamiltonians and wave functions of various cores has proved useful for describing several diverse phenomena in N-F compounds: (A) The "anomalous" difference in bond strengths in NF₂ and NF₃, where the N-F bond in NF₃ is weaker than that in NF₂; (B) the nonconstancy of the δ_K value for F in ionization potentials of NF₃ and CF₃, whereas other substituent group effects are const.; (C) the similarity between the effect of F on ionization potentials of NF₂ and of CF₃.

CA

C.A. 1962.57.13

15817B

NF₂

1963

Электроотрицательность

✓ 14 Б227. Электроотрицательность NF₂. Ettinger R a y m o n d. Electronegativity of the difluoramino group. «J. Phys. Chem.», 1963, 67, № 7, 1558—1559 (англ.)

Электроотрицательность дифторазотного радикала может быть определена тремя эмпирич. или полуэмпирич. методами. По ф-ле Горди $\chi = 0,31 (n^* + 1)/r + 0,50$, и значениям ковалентных радиусов по Шомакеру—Стивенсону, было найдено, что $\chi_{NF_2} = 3,26$. По ур-нию Уилмхерста, связывающему частоты валентных колебаний и электроотрицательность, найдено, что $\chi_{NF_2} = 3,25$. Наконец, по ур-нию Дэйли—Шулери для хим. сдвига и по измерениям протонного резонанса в дифтораминазоэта-не найдено, $\chi_{NF_2} = 3,27$. Среднее значение $\chi_{NF_2} = 3,3$.
С. Бацанов

Ж. 1964. 14

3989

1963

NE₂

(D₂)

Henderson U.V., Goodfriend P.L.,
Rhodes H.A., Woods H.P.

NASA Accession N N64-24916,
Rept. N AD 418278, Avail. ODS, 10pp.
1963

J

1963

7-10-63 (21)

Johnson Frederick A., Colburn Charles B.

The infrared spectrum of HP_2 .

"Inorgan. Chem.", 1962, 1, p 2,
431-432 (anal.)

PP. 1963, 1 2101

10

1963

Bcp-5104-111

NF_2 и NF_3
 чис. ное.
 пары

Calculation of force constants for NF_2 and NF_3 . Yu. I. Kotov and V. M. Tatevskii (State Univ., Moscow). *Vestn. Mosk. Univ., Ser. II, Khim.* 18, No. 2, 3-5(1963). By assuming that the force consts. for NF_2 do not differ appreciably from those for NF_3 , the force consts. for both mols. are calcd. Assuming $K_{q\alpha}' = 0$, the following force consts. are obtained: $K_q = 7.79$; $K_\alpha = 2.35$; $K_{qq} = 2.11$; $K_{q\alpha} = 0.89$; $K_{\alpha\alpha} = 0.14$ (all in units of 10^6 cm.^{-2}). Frequencies calcd. from these force consts. differ from exptl. observations by 1-32/cm. R. W. Buddemeier

-2687

111

C.A. 1963.59.2

1108a

ВФ - 5104 - III

1963

20 Б75. Расчет силовых постоянных для молекул NF_2 и NF_3 . Котов Ю. И., Татевский В. М. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1963, № 2, 3—5

В предположении одинаковости силовых постоянных, соответствующих изменениям длин связей $\text{N}-\text{F}$ и валентных углов в молекулах NF_2 и NF_3 , на основе новых (более полных) эксперим. данных однозначно рассчитаны силовые постоянные указанных молекул. Полученные в результате расчета силовые постоянные воспроизводят частоты колебаний с максим. ошибкой в 32 см^{-1} , что является удовлетворительным (с учетом сделанного предположения об одинаковости силовых постоянных двух молекул).

Т. Ребане

111-2684

х. 1963. 20

2454-III

N_2F_4 (ω_e , силовые постоянные ...) 1963

N_2H_4 , NF_2) (силовые постоянные)

NF_3 , C_2F_6)

Котов Ю.И., Татевский В.М.

Вестн. Моск. ун-та "Химия", 1963,
№ I, 10-12

Расчет колебательного спектра
молекулы тетрафторгидразина N_2F_4 .

Рр., 1963, 8D50

Есть оригинал.

NF_2

Bohn R. K.

1/1964

Dissert. Astron., 1964, 25, № 6, 3289

III) - 4/1/00

Исследование строения мо-
лекул металоид электроном
ной дифракции: SiF_4 - и
трансе - дифтордизамин,
 NF_2 , N_2F_4 , GeF_4 и GeF_6 .

(см. N_2F_2)

NF₂

Bohn R. K.

1964

Thesis, Ithaca, N.Y., Cornell
Univ., 118p.

Исследование строения моле-
кул методом электронной
дифракции: cis- и транс-

дифторорганизов, NF_2 ,
 N_2F_4 , XeF_4 и XeF_6

(см. N_2F_2 III)

NF₂

Спектр

1969

№ 3 Б170. Изоляция и накопление свободных радикалов на молекулярных ситах. II. Спектр электронного парамагнитного резонанса дифторида азота (NF₂). Colburn Charles B., Ettinger Raymond Johnson Frederic A. Isolation and storage of free radicals on molecular sieves. II. The electron paramagnetic resonance spectrum of nitrogen difluoride (NF₂). «Inorgan. Chem.», 1964, 3, № 3, 455—457 (англ.)

При адсорбции N₂F₄ на мол. ситах при 600—700 м.м в ряде случаев обнаружены сигналы ЭПР от радикалов NF₂. Исследованы сита типа 13X, 10X, 5A, 4A, 3A и силикагель. Сняты спектры ЯМР адсорбированного N₂F₄ на ситах. Сообщение I см. РЖХим, 1964, 18Б131.

С. Солодовников

ж. 1965. 3

NF₂

(u.n.)

BP-4293 - III | 1964

Farmer F.B.,
Gerry M.C.L., ...
"Molec. Phys.," 1964,
8(3), 253-64

NF_2 -спектр / 5 Д241. Спектр поглощения NF_2 . Goodf-
riend P. L., Woods H. P. The absorption spectrum
(Л.П.) of NF_2 . «J. Molec. Spectrosc.», 1964, 13, № 1, 63—66
(англ.)

В области 2600 Å получен спектр радикала NF_2 с раз-
решением 10 Å/мм, находящегося в равновесии с N_2F_4
(давл. 400—760 мм рт. ст., комнатная т-ра). На основа-
нии анализа корреляционных диаграмм Уолша для мо-
лекул AB_2 произведено частичное отнесение полос к тем
или другим электронным состояниям.

1964

ВФ-5256-III

ф. 1965. 58

B90-5256-111

1964

1 Absorption spectrum of NF₂. P. L. Goodfriend and H. P. Woods (Texaco Expt. Inc., Richmond, Va.). *J. Mol. Spectry.* 13(1), 63-6(1964). In the course of flash-photolysis kinetic-spectroscopy expts. on N-F-contg. compds., it was found necessary to examine the absorption of the NF₂ radical at 2600 Å. reported by Johnson and Colburn (CA 57, 2994e). They demonstrated that NF₂ is responsible for this absorption, but limited their description of the spectrum to the statement that it was a poorly structured band with a max. at 260 mμ with a 20-mμ half-width. Their primary use of this absorption was to demonstrate the existence of the equil. $N_2F_4 \rightleftharpoons 2NF_2$ and to measure the equil. const. as a function of temp. This absorption was at a higher dispersion. RCKP

NF₂(Cuenip
kp)

Luis

C.A. 1964 - 60 N13 15310 E



NF₂

Синдр

ВФ-5253-III

1964

10 Д132. Об электронном спектре поглощения радикала NF₂. Кузнецова Л. А., Кузяков Ю. Я., Татевский В. М. «Оптика и спектроскопия», 1964, 16, № 3, 542—543

Измерен спектр поглощения в области 2600 Å радикала NF₂, полученного при нагревании тетрафторгидразина при давл. 5—200 мм рт. ст. в алундовой трубке с кварцевыми окошками. Показано, что интенсивность поглощения при 2600 Å достигает максимума при т-ре 300—400° С и затем уменьшается, исчезая при 750° С; поглощение состоит из ряда диффузных полос. Принято, что интервал между полосами прогрессии, равный в среднем 390 см⁻¹, является частотой деф. кол. радикала NF₂ в возбужденном состоянии. Д. Глебовский

3525
III-169

ф. 1964. 108

139-5253-III

1964

NF₂

Cueing

/ Electronic absorption spectrum of the NF₂ radical. L. A. Kuznetsova, Yu. Ya. Kuzyakov, and V. M. Tatevskii. *Optika i Spektroskopiya* 16(3), 542-43(1964). The absorption spectrum of N₂F₄ was studied in the 2600-A. range. Bands occurring here are due to the NF₂ radical and consist of a series of diffuse bands. Spectra taken at various temps. show the marked temp.-dependence of these bands. The spectra and a table contg. the wavelengths of the diffuse bands are also presented.

Andrea Pall

139-5253-III-2525

C.A. 1964 RJ N1 184e

В99-5253-III

1964

✓ 22 Б88. Об электронном спектре поглощения радикала NF_2 . Кузнецова Л. А., Кузяков Ю. Я., Татевский В. М. «Оптика и спектроскопия», 1964, 16, № 3, 542—543

Измерен спектр поглощения в области 2600 Å радикала NF_2 , полученного при нагревании тетрафторгидразина при давл. 5—200 мм рт. ст. в алуноводной трубке с квар-

цевыми окошками. Показано, что интенсивность поглощения при 2600° достигает максимума при т-ре 300—400° и затем уменьшается, исчезая при 750°; поглощение состоит из ряда диффузных полос. Принято, что интервал между полосами прогрессии, равный в среднем 390 см^{-1} , является частотой деф. кол. радикала NF_2 в возбужденном состоянии.

Д. Г.

NF₂
Спектр

5253-III-669

г. 1964 над

NF₂

Nagarajan G.

1964

Indian J. Pure and Appl. Phys.,
2, N 11, 341.-3

Средние амплитуды колеба-
ний двукратных В, С, N, Al,
Р и Zr.

(см. BF₂)
III

X. 1965. 18

$\text{BH}_2, \text{CH}_2, \text{SiH}_2, \text{NH}_2, \text{PH}_2, \text{H}_2\text{O}$ (AS16, 43+1)
 $\text{H}_2\text{S}, \text{CO}_2, \text{CS}_2, \text{NO}_2, \text{SO}_2, \text{ClO}_2, \text{NF}_2, \text{XeF}_2$
 $\text{HCO}, \text{NHO}, \text{HSiCl}, \text{HSiBr}, \text{NH}_3, \text{PF}_3$
 $\text{PCl}_3, \text{HCOH}, \text{CO}_2\text{Cl}, \text{COSCl}, \text{C}_2\text{N}_2, \text{C}_2\text{H}_2$
(структура и мех. уст.)

Walsh A.D.,
Ann. Rept. Progr. Chem. (Chem. Soc.
London), 1964, 61, 8-26 656cc
в ар. ест.

W

CA66

NF₂ IV-4318 Simons J. P.

1965

J. Chem. Soc., 1965, Oct., 5406.

Флюорированное строение
дифторкарбена и ди-
фтораминного радика-
ла.

(см. CF₂^{III})

6. 1966. 6D100

1965

XIII - 1640

The feasibility of predicting properties of N, F oxidizers by quantum chemical calculations. Joyce J. Kaufman, Louis A. Burnelle, and Jon R. Hamann (Res. Inst. for Advanced Studies, Martin Co., Baltimore, Md.). *Advan. Chem. Ser.* 54, 8-22 (1965)(Eng). The following properties are examd.: relative stabilities, possible existence of new species, ionization potentials, electron affinities, π -bonding, and charge distributions through extended Hückel L.C.A.O.-M.O. calens. and through analysis of the calcd. wave functions and energy levels. It has been possible to: (1) predict the order of the N-F bond lengths in NF_2 , NF_3 , *trans*- N_2F_2 , and *cis*- N_2F_2 and of the N-N bond lengths in *cis*- and *trans*- N_2F_2 (before knowing exptl. results); (2) predict the greater stability of *cis*- N_2F_2 relative to *trans*- N_2F_2 ; (3) reproduce the exptl. ionization potential of NF_2 ; (4) predict the order of the sym. N-F stretch frequencies in NF_2 , NF_3 , *trans*- N_2F_2 , N_2F_4 , and *cis*- N_2F_2 ; (5) verify the supposition of π -bonding in NF_2 and NF_3 , leading to a greater N-F bond dissocn. energy in these species than in NF_3 . 23 references.

RCBI

C.A. 1966. 65. 4
4671 4g



4330 - III

1965

re (NF_2 , NF_3 , $\text{trans-N}_2\text{F}_2$, $\text{cis-N}_2\text{F}_2$)

J (NF_2)

Kaufman J.J., Burnelle L.A., Hamann J.K.

AIAA Bull., 1965, 2, N 3, 109

The feasibility of predicting properties of oxidizers by quantum chemical calculations

PX., 1966, 13659

J

ECTI 6. N. F

NF₂

1966

Comment on NF₂ decomposition behind shock waves. A. P. Modica and D. F. Hornig (Princeton Univ., Princeton, N.J.). *J. Chem. Phys.* 45(2), 760(1966)(Eng). In the uv absorption study of the NF decompn. (CA 63, 15611d), the reaction was not investigated beyond 2000°K., because chemiluminescence interfered with the absorption analysis above 1900°K. Oscillograms show the result of the NF radical absorption at 2600 Å. behind a shock wave into a 1:103 N₂F₄-Ar mixt. at an initial pressure of 5 cm. Hg, the shock temp. being 1924°K. There was gas emission in the 2350-3000-Å. wavelength region. A mechanism is offered that predicts a shorter induction period for N₂ and the initial rate ratio N₂/NF₃/NF₂ = 1/2/4, while explaining the N₂F mass peak and the uv chemiluminescence. C. E. Beland

C.A. 1966.65.9
129604

NF₂

(el. n)

кв. мех.
расчет

1966

Pople J.A., Segal G.A.

J. Chem. Phys., 1966, 44,

N 9, 3288-3296.

ан BH₃, III

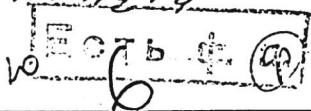
N_2F_4 / NF_2 (compound, 2c) 1967
XIII 1604

Bohn R.K., Bauer S.H.

Inorgan. Chem, 1964, 6, 12, 304-309 (encl.)

An electron diffraction study of the
structures of NF_2 and N_2F_4

Ru Xian, 1964, 186-103



NF₂

спектр в
матрице

Yakov M.E.,
Milligan D.E.

1967

177

J. Chem. Phys.
46, N1, 184

Образование и р-ции атомар-
ного фтора в твердом
теле. Колебательной и
электронной спектры
свободного радикала
NF₂. (См. NF₂) III

NF₂, CF₃

обзор

XIII - 386

1967

NO₂

Магнети

(+2ms)

C.A. 1968. 68. 18

82541t Electron spin resonance studies of free radicals at liquid helium temperature. C. A. McDowell (Univ. British Columbia, Vancouver, Can.). *Proc. Int. Conf. Spectrosc., 1st, Bombay 2*, 383-6(1967)(Eng). A brief review is given on E.S.R. studies of free radicals at liq. He temps. by the matrix isolation technique. E.S.R. spectra of the NO₂ radical in N, CO₂, H, Ar, and Ne lattices, NF₂ and CF₃ radicals in inert gas matrixes, and the photolysis products of NH₃ in a Kr matrix are discussed. In many cases, partial orientation of the radicals in inert gas matrixes is possible at these temps. Christopher Deverell



18F₂

Зиневис Н. Г.

1988

Алгебр. и.д. практ. Сеш.
19, n 1-2, 1-4.

Некоторые успехи в
области формирования
неорганических
радиоизотопов.

(Сеш. 18F) III

NF₂

Gordon M.S.

1968

J. Chem. Phys.

1968, 49, N10, 4643-50.

расчет
равнов.
звешств.

● (с см CH₂; III)

NF₂

1969

суб.
нач

Bruns, Roy E.

// Diss. Abstr. Int. B."

1969, 30, N3, 1063-64.

(see. OF₂ ; III)

un. noes (OF_2 , NF_2 , CF_2) 11 14 15 1969

Bruns R., Raff L., Derlin F. P.

Theoret. chim. acta, 1969, 14, n 3,
232-241 (aust.)

A theoretical study of the bond-
bond interaction force constant
in XF_2 molecules.

XI 878

B.M. 100 39164

Wol

J (NF_3 , NF_2^+ , NF_3^+) 13 XII 177 1969
O NF_2 (OHF, A. P. Wouda); D₀($\text{NF}_2\text{-F}$);
D₀(NF-F); D₀(NF)

Dibeler V. H., Walker J. A.

Inorgan. Chem, 1969, 8, n 8, 1728-1733 (and)
Mass spectrometric study of photoionization
XIV. Nitrogen trifluoride and trifluoroamine
oxide.

Puckner, 1970, 75101

10 8 (5)

NF₂

NF₃; PH₃

kb. sex

pacem

Olmstead H. H.

Unit. Wisconsin, Madison,
Wis., 1969, 120 (Sup.)
Avail. Unit. Microfilms,
Ann Arbor, Mich.,
Order No 70-3651. From
Diss. Abstr. Int. B, 1970;
31, 2, 572 SADC



NF_2^+
2

1970

11 Б99. Криогенная масс-спектрометрия фторсодержащих частиц II. Применения для синтеза с помощью пиролиза, фотолиза и микроволнового разряда. Cristy S. S., Mamantov G. Cryogenic mass spectrometry of reactive fluorine-containing species. II. Applications to synthesis via pyrolysis, photolysis and microwave discharge. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1970, 5, № 3—4, 319—328 (англ.)

A.P.

Три типа систем напуска масс-спектрометра использованы в кач-ве низкот-рных реакторов для изучения р-ций пиролиза, фотолиза и р-ций в высокочастотном разряде. В результате пиролиза тетрафторгидразина в присутствии избытка NO, получен нитрозодифторамин NF_2NO (I), изучен его масс-спектр и измерены потенциалы появления NF_2^+ из NF_2 , N_2F_4 и I, равные $11,79 \pm 0,12$;

(+2)

X. 1971. 11



$12,63 \pm 0,1$ и $12,12 \pm 0,12$ соотв. Полученные данные использованы для вычисления энергии связи $D_0(\text{N—N})$ в I ($D_0 = 19,4 \pm 3,9$ ккал/моль). В составе продуктов фотоллиза CF_2N_2 идентифицированы C_2F_4 и CF_2NNCF_2 . Предлагается возможное строение продукта с массой 178. При высокочастотном разряде смеси NF_3 и Cl_2 (1:1) синтезированы ClF и N_2 . Сообщ. см. пред. реферат.

М. Туркина

1970

NF₂

(114766s) Microwave rotational spectrum of the NF₂ free radical. Hrubesh, Lawrence W.; Rinehart, Edgar A.; Anderson, Roger Edward (Lawrence Radiat. Lab., Univ. of California, Livermore, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1970, 36(2), 354-6 (Eng).
- Microwave rotational absorption lines of the NF₂ free radical have been obsd. with a highly sensitive K-band cavity spectrometer. The obsd. hyperfine splitting of these lines is consistent with a J-type coupling scheme for the 4 different angular momenta involved in the NF₂ radical. RCKP

M. B.

C. A. 1970

73.22

NF₂

1970

6 Д439. Микроволновый вращательный спектр свободного радикала NF₂. Hrubesh Lawrence W., Rinehart Edgar A., Anderson Roger E. Microwave rotational spectrum of the NF₂ free radical. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 36, № 2, 354—356 (англ.)

Исследован вращательный спектр газообразного радикала NF₂ (I) в области 18—26,5 ГГц. Использован резонансный спектрометр с диодом Ганна. Образцы I получены при диссоциации стабильной молекулы ¹⁴N₂¹⁹F₄ при повышении т-ры (от 50 до 100°С) и понижении давления (от 100 до 200 мм рт. ст.). Наблюдаемый спектр включает хорошо разрешенные переходы (идентифицированные как 12₃₉→13₂₁₂) и слабо разрешенные переходы (идентифицированные как 7₂₆→8₁₇). Сверхтонкая структура спектра связана с взаимодействием спина электрона с двумя различными ядерными спинами I_N и I_F молекулы I.

Г. П.

Ф. 1971. 68

1970

NF₂

11 Б267. Микроволновый вращательный спектр свободного радикала NF₂. Hrubesh Lawrence W., Rinehart Edgar A., Anderson Roger E. Microwave rotational spectrum of the NF₂ free radical. «J. Mol. Spectrosc.», 1970, 36, № 2, 354—356 (англ.)

м.ч.

Исследован в области 18 000—26 500 МГц МВ-вращательный спектр радикала NF₂ (I), полученного при диссоциации N₂ F₄ (*t* 50—100°): Идентифицированы вращательные переходы I с частично или полностью разрешенной тонкой структурой: 12₃₉ ← 13₂₁₂ (25 495—26 055 МГц), 7₂₆ → 8₁₇ (25 506—25 819 МГц) и, вероятно, 16₄₁₃ ← 17₃₁₄ (~25 606 МГц). Тонкое расщепление в МВ-

X. 1971. 11

вращательном спектре I обусловлено спин-вращательным взаимодействием (дублетное расщепление); каждая линия дублета расщеплена на триплеты в результате взаимодействия свободного электронного спина с результирующим спином двух ядер F (спин $1/2$), а каждая линия этого триплета вновь расщеплена на триплеты в результате взаимодействия со спином ядра N^{14} (спин 1).

А. П. Александров

NO_2 , N_2F_2 (matrix) 13 XII 387 1970

McDowell C. A., Nakajima H., Raghunathan P.,

Can. J. Chem., 1970, 48, No 5, 805-17 (cont.)

Electron ~~spin~~ resonance studies
of oriented ~~nitrogen~~ ^{nitrogen} dioxide and
nitrogen difluoride in inert
matrices at low temperatures.

10 (C) (D)

CA 1970, 72, No 22, 116528u

1971

NF

2

NF₂⁺

(Y)

9 Д260. Потенциалы ионизации радикала NF₂ по данным фотоэлектронной спектроскопии и расчеты по методу INDO. Cornford A. B., Frost D. C., Hering F. G., McDowell C. A. Ionization potentials of the difluoroamino radical by photoelectron spectroscopy and INDO calculations. «J. Chem. Phys.», 1971, 54, № 5, 1872—1873 (англ.)

По фотоэлектронным спектрам измерены потенциалы ионизации (ПИ) радикала NF₂. Произведено вычисление энергий возбуждения иона NF₂⁺. Результаты расчетов сравнены с эксперим. данными. Теория дает для основного состояния радикала NF₂ электронную конфигурацию

(+1)

X

Ф. 1971-90

$3a_1^2 2b_2^2 4a_1^2 1b_2^2 5a_1^2 1a_2^2 4b_2^2 6a_1^2 2b_1$. Показано, что первый ПИ, соответствующий удалению разрыхляющего электрона $2b_1$, приводит к образованию иона NF_2^+ в основном состоянии 1A_1 , отвечающем изогнутой форме молекулы с углом между связями 103° . Второй и третий ПИ приводят к образованию NF_2^+ в состояниях 3B_1 и 1B_1 . Отмечено хорошее совпадение результатов расчетов с экспериментом для двух первых ПИ и неудовлетворительное совпадение для более высоких. Библи. 11.

И. Дворников

NF₂

1941

y 104856c Ionization potentials of the difluoroamino radical by photoelectron spectroscopy and INDO [intermediate neglect of differential overlap] calculations. Cornford, A. B.; Frost, D. C.; Herring, F. G.; McDowell, C. A. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *J. Chem. Phys.* 1971, 54(5), 1872-3 (Eng). The photoelectron spectrum of the NF₂ radical has been measured. The spectrum shows evidence for 3 vertical ionization potentials at 12.10, 14.60, and 16.38 eV. The adiabatic 1st ionization potential is 11.62 eV. LCAO-INDO calcs. were employed to deduce the excitation energies of the NF₂⁺ ion, and these are compared with the exptl. values. The calcs. indicate that the ¹A₁ state of the bent NF₂⁺ is lower in energy than the linear ³Σ⁻ state. Vibrational structure is clearly seen on the 1st band (1250 cm⁻¹) and on the 2nd (520 cm⁻¹), and there is evidence that both progressions belong to the symmetric stretching mode ν₁(a₁). RCJQ

C.A. 1941. #4.20

(+1)



XIII - 764

1974

rearr. comp. (NH_2 , NO_2 , NF_2)

Del Bene J. E.,

J. Chem. Phys., 1971, 54, 28,

3487-3490

NF₂

XIII - 1587

1971

2 Д516. Спектр комбинационного рассеяния радикала NF₂. Selig H., Holloway J. H. Raman spectrum of the NF₂ radical. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1971, 33, № 9, 3169—3171 (англ.)

Изучен спектр комб. рас. тетрафторгидразина, нагретого до 250° С. Кроме полос его транс- и гош-изомеров, в спектрах наблюдаются узкие поляризованные линии 1074 и 572 см⁻¹, отнесенные к симметричным вал. и деф. колебаниям радикала NF₂. Антисимметричного колебания не наблюдалось, ибо оно практически запрещено. При более высоких т-рах спектры получить не удалось из-за

реакции образца с кремнием, стекла с образованием N₂O. Библ. 9. М. В. Тонков

Д. 1972.22

NF₂

Vi

Раман - спектр

XIII - 1581

1971

45852n Raman spectrum of the NF₂ radical. Selig, H.; Holloway, J. H. (Dep. Chem., Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Inorg. Nucl. Chem.* 1971, 33(9), 3169-71 (Eng). At 250°, 2 intense, sharp, and strongly polarized bands were obsd. at 1074 and 572 cm⁻¹ corresponding to the totally sym. and bending fundamental vibrations of the NF₂ radical, resp. The anti-sym. stretching mode was not obsd.

C.A. 1971.

45.24

MF₂

Carsky P., Zahradnik R., 1972

24.
сип.

"Theor. chim. acta", 1972,
26, 171-78.

● (ср BH₂, III)

NF_2

XI - 3464

1972

ClO_2

$(\text{CF}_3)_2\text{NO}$

42669g. Photoelectron spectra of free radicals. Cornford, A. B.; Frost, D. C.; Herring, F. G.; McDowell, C. A. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, B.C.). *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 1972, No. 51, 55-63 (Eng). The photoelectron spectra of the free radicals NF_2 , ClO_2 , $(\text{CF}_3)_2\text{NO}$, and SO_2F were obtained, and semi-empirical SCF MO calcs. were performed to aid in assigning the ionization potentials.

(7)

(42) ☒

C.A. 1974. 80. N8

NF₂

Kilcast J.
at el

1872

paaret
och. coct

J. Chem. Soc. Faraday
Trans. 1872, Part 2,
68, v3, 435-43

X 1872 15

III, CH P 12

NF₂

1/8/72

11540s Calculation of hyperfine coupling constants for organic radicals. McCain, Douglas C.; Palke, William (Dep. Chem., Univ. California, Santa Barbara, Calif.). *Chem. Phys.* 1972, 56(10), 4957-65 (Eng). Hyperfine coupling constants have been calculated for the well-known radicals HCO, NO₂, NF₂, ClO₂, and CF₃ as well as a large number of related species. An SCF Hartree-Fock-type approach was used with a minimum basis set of Slater-type orbitals to obtain molecular orbital coefficients of the singly occupied orbital. Some of the coupling constants were obtained directly from the ab initio calculations; others were estimated by use of semiempirical relations. Comparison with experimental data shows fair agreement. In addition, the structures of NF₂, O₃⁺, O₃⁻, and CF₃ were computed.

сггггг.
pacer

C.A. 1972. 44. 2

(+3)



H_2O , H_2S , H_2Se , CO_2 , SO_2 , SeO_2 , BO_2 ,
 NO_2 , ClO_2 , CF_2 , SiF_2 , GeF_2 , NF_2 , OF_2
 MgF_2 , CaF_2 , SrF_2 , BaF_2 , Cs_2 , CSe_2 1942
 (cum. uoci. parvi) 1* 3978

Simons G,
J. Chem. Phys.,
43 10 - 13

1972, 56, N9.

40 10

WF₂. Thomson C. Brothie D.A. 1972
Chem. Phys. Lett. 1972, 16, W3, 573.

$\angle 103^\circ$
 $z = 2.61$ а. е. X^{2B}_1

$\angle 101,6^\circ$
 $z = 2.646$ а. е.

Кб. мер. расч.

Витчик 3699

есть отиск у
Рамбиди.

BH_2 ; NH_2 ; HCO ; NO_2 ; NF_2 ; HNCN ; BOF_2 ; H_2NO ; H_2CN (расчет, 1, 1972)
(теор. експерим.) 141
и.и. 1315
XIII 2061 Zahradník R, Čásky P,

Theor. chim. acta, 1972, 27, №2, 121-
- 134 (англ.)
Open shell CNDO treatments on
small and aliphatic radicals.
Electronic spectra and some
ground state properties.

Рис. 2, 1973, 7527

HO



15

NF₂

XIII - 2075

1973

7 Д142. Электронная структура радикала NF₂. Brown R. D., Burden F. R., Hart. B. T., Williams G. R. The electronic structure of the NF₂ radical. «Theor. chim. acta», 1973, 28, № 4, 339—353. (англ.; рез. нем.)

геом.
структ

В рамках неограниченного метода Хартри—Фока (НХФ) произведены неэмпирич. расчеты радикала NF₂ (основное состояние ²B₁). Использовались минимальный слэтеровский, два минимальных гауссовых и один расширенный гауссов (РГ) базисы. Значения физич. величин, связанных со спином, вычислялись как с волн. ф-цией НХФ, так и после исключения вклада кватртного состояния. Пространственные части соответству-

ф. 1973 № 7

ющих орбиталей для различных спинов заметно отличаются друг от друга. Представлена простая картина распределения электронной плотности в NF_2 по локализованным орбиталям, в которой три несвязывающих электрона находятся на пространственно разделенных орбиталях атома азота. Сравнение расчетных и эксперим. данных показало, что использование базиса РГ с аннигилирующей ближайшей спиновой компоненты позволяет достаточно хорошо определять физич. свойства молекул, зависящие от распределения зарядовой и спиновой плотности.

В. И. Барановский

NF₂

XIII - 2075

1973.

129983n Electronic structure of the nitrogen difluoride radical. Brown, Ronald Drayton; Burden, F. R.; Hart, B. T.; Williams, G. R. (Dep. Chem., Monash Univ., Clayton, Aust.). *Theor. Chim. Acta* 1973, 28(4), 339-53 (Eng). Ab initio unrestricted Hartree-Fock (UHF) calcs. were performed on the radical NF₂ by using a minimal basis Slater set, 2 minimal basis Gaussian sets, and a Gaussian set of approx. double-zeta accuracy. The comparison of these basis sets in the calcn. of 1-electron charge-dependent properties showed that near double-zeta accuracy 2p functions are necessary to give reliable values. Single annihilation of the UHF wave functions calcd. with basis sets contg. near double-zeta 2p functions gave an accurate representation of the anisotropic coupling consts. at the N and F atoms. Less satisfactory agreement with the exptl. isotropic coupling consts. was found with all calcs.

C.A. 1973. 78 N20

① Springer.

NF; NF₂; N₂F₄(I); N₂F₄(Do); NF₂(D) 1973

Foner S.N., Hudson R. Z., xiii 2181

J. Chem. Phys., 1973, 58, N2, 581-7
(ann.)

Mass spectrometer studies of
tetrafluoroethylene and the
difluoroamino radical.

10



CA, 1973, 28, N12, 77 175d

30711.8704
TE, Ch

NF_2^+

40771

21. стр

*

1973

2-982

Harrison James F., Eakers Charles W.

Electronic structure of reactive intermediates. The nitrenium ions NH_2^+ , NHF^+ , and NF_2^+ .

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, N 11,
3467-3472

(англ.) 0913 МИК

894 897

0906

ред. тап mee

NH_2^+

ВИНИТИ

NF_2

Nakatsugi Hiroshi

1973

ввод.
структ.

"J. Amer. Chem. Soc."

1973, 95, № 2, 354-61.

"форма молекулы в основном
и возб. состояниях"

(см. BeH_2 ; III)

NF₂

1973

Owens F.J., Adams G.F.

"J.Chem.Phys.", 1973, 59, N2, 981-982.

симметричная
заселенность

E;
1

(см. HCO; III)

BeF₂, BF₂, CF₂; NF₂, OF₂ (recd 1973
cup-pa
papers)

IX 4188

om. 4-359

Rotenberg S., Schaefer H.F.,
J. Amer. Chem. Soc., 1973,

95, N 7, 20 95-2100

(4)

10

pp 73

30426.8762

TE, SIS, Ch, Ph,
Et-C

NF₃

40771

гип. моленин

1973

У-359

Rothenberg Stephen, Schaefer Henry F.,
III.

Molecular properties of the triatomic
difluorides BeF₂, BF₂, CF₂, NF₂, and OF₂.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1973, 95, N 7,
2095-2100

(англ.)

0863 БИК

850 852

856

ВИНИТИ

NF₂

сентябрь 2937 1974.

N. F. Baird, R. P. Barr,

теорет.
хим. акт.
расчет

Theor. chim. Acta, 1974,
36, 125-34

NF₂

*-4-7121

1974

2 Д443. Микроволновый спектр NF₂. Brown R. D., Burden F. R., Godfrey P. D., Gillard I. R. Microwave spectrum of NF₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 52, № 2, 301—321 (англ.)

В диапазоне 13—65,2 Гц с использованием спектрометра с зеемановской модуляцией исследован микроволн. спектр свободного радикала NF₂ в основном электронном состоянии ²B₁, полученного из N₂F₄ путем нагрева до 60—70°С. Идентифицировано ~350 линий сверхтонкой квадрупольной структуры вращательных переходов NF₂ в основном колебательном состоянии. Определены значения постоянных вращательных и центробежные искажения (A=70496, B=11872,24, C=10136,46 Мгц, $\tau_{aaaa}=-7,75$, $\tau_{bbbb}=-0,081$, $\tau_{aabb}=0,297$, $\tau_{abab}=-0,126$ Мгц), постоянных квадруполь-

и.п;
гешетр

XIII-2828

ф.1975. №2

ной связи ядра азота ($\chi_{aa}=5,59$, $\chi_{bb}=-0,73$, $\chi_{cc}=-4,86$ Мгц) и постоянных взаимодействия электронного и ядерных спинов с вращением радикала в целом. Вычислены структурные параметры ($NF=1,349\text{Å}$, $FNF=103^\circ 20'$), силовые и кориолисовые постоянные. Полученные по центробежным постоянным значения частот колебаний согласуются с ИК-данными.

М. Р. Алиев

NF₂

м. в. спектр

X 5-7121

1974

4 Б284. Микроволновый спектр NF₂. Brown R. D., Burden F. R., Godfrey P. D., Gillard I. R. Microwave spectrum of NF₂. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 52, № 2, 301—321 (англ.)

С помощью МВ-спектрометра с зеемановской модуляцией и зеемановского спектрометра со штарковской модуляцией измерены частоты и интенсивности ~350 линий, являющихся компонентами мультиплетов 21 вращательного перехода молекулы NF₂ и расположенных в частотном интервале от 13,0 до 65,2 ГГц. Измеренные линии идентифицированы с помощью расчетной программы с учетом взаимодействия молек. вращения с электронным спином и с ядерными спинами F и N, что потребовало ввода 18 независимых постоянных. Определены вращательные постоянные в

XIII-2828

X. 1975. NY

Мгц: $A=70\,496\pm 2$, $B=11872,24\pm 0,2$, $C=10136,46\pm 0,2$ и
 постоянные центробежного искажения в Мгц: $\tau_{aaaa}=-7,75\pm 0,2$,
 $\tau_{bbbb}=-0,081\pm 0,02$, $\tau_{aabb}=0,297\pm 0,03$,
 $\tau_{abab}=-0,126\pm 0,06$. Определено 14 постоянных различ-
 ных взаимодействий и полученные значения сопоставле-
 ны с расчетными данными. Из вращательных постоян-
 ных вычислена r_0 структура: $r_{NF}=1,3494$ А, $\angle FNF=$
 $=103^\circ 20'$. Из постоянных центробежного искажения вы-
 числены силовые постоянные, колебательные частоты
 и постоянные кориолисова взаимодействия. По эффекту
 Штарка для двух переходов определен дипольный мо-
 мент: $\mu=0,136\pm 0,01$ D. Основное электронное состоя-
 ние идентифицировано как 2B_1 . С. Н. Мурзин

*3-7121

1974

NF₂

(u.n)

2828

XIII -

A
y
d
e
y

70529a Microwave spectrum of nitrogen difluoride radical. Brown, R. D.; Burden, F. R.; Godfrey, P. D.; Gillard, I. R. (Dep. Chem., Monash Univ., Clayton, Aust.). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 52(2), 301-21 (Eng). About 350 lines in the microwave spectrum of NF₂ were measured in various ranges of frequency between 13.0 and 65.2 GHz by using 2 types of Zeeman effect spectrometers. Complete assignment of all lines was achieved and, via the general microwave computer program SPINRO, the rotational consts., centrifugal distortion consts., dipole moment, electronic spin-rotation coupling consts., the consts. for the coupling of the several nuclear spins with the electron spin and the N quadrupole coupling consts. were all obtained. By drawing upon the obsd. vibrational frequencies the av. geometry of NF₂ was evaluated. Force consts. and Coriolis coupling consts. were also derived. The values of the spin coupling consts. for N and for F indicate that NF₂ is a π -radical with the spin d. mainly located on N. The multiplet patterns indicate that the ground electronic state wavefunction is antisym. to rotation about the mol. symmetry axis and so, for a π -radical, identifies the ground state as 2B_1 as has previously been assumed for this mol.

C.A. 1974, 81 N/12.

40418.3698

Ch, Ph, TE

NF₂

X-4054

96200

02

1974

5-4647

Brown R.D., Williams G.R. Ab initio cal-
culations on some small radicals by the
unrestricted Hartree-Fock method. "Chem.
Phys.", 1974, 3, № 1, 19-34

(англ.)

0008 экз.

074 074 080

ВИНИТИ

NF₂

1974

Ридберг.

Состояние

и. протониз

139438u Transient species in the photolysis of difluoro-
amino radical. Collins, R. J.; Husain, D. (Dep. Phys. Chem.,
Univ. Cambridge, Cambridge, Engl.). *J. Photochem.* 1974,
2(6), 459-64 (Eng). Photolysis of NF₂ was studied by kinetic
absorption spectroscopy in the vacuum uv region. A series of
diffuse bands in the region of 126-140 nm are attributed to
Rydberg transitions of NF₂. A no. of transient bands are
attributed to NF in >1 electronic state, and some collisional rate
data for these bands are reported.

C.A. 1974. 80. N24

J ($H_2O; F_2O; X_2Y_2$ u X_2CO , $29 \leq X, Y = H, F, O, N$) 1974
($(CH_2CH_2)O; NO_2; NF_2; CF_2; HOF; NOF$) 13959

Chong D.P., Herring F.G., McWilliams D.,

J. Chem. Soc. Faraday Trans., 1974,
Part 2, 70, N2, 193-202 (anal.)

Computational study of vertical
ionization potentials using the
 $\Delta I NDO + FOC$ method.

Ref. 13, 1974, 9D165

to reject. E. B. Gun.
(P) 10

№ 2

Дудин А. В.
Санин А. М.

1974

(А. р.)

«Вторая Всесоюз. конф.
по масс-спектрометрии, 1974,
Тезисы докл. и „Наука“ 1974,
159-160

(см № 3, III)

NF₂

ammun 3995

1974.

Harland P. W.
Franklin J. L.

(Ae)

J. Chem. Phys.
1974, 61, N5, 1621-35

44-4905

1974

NF_2

N_2F_4

расчет
электрон-
энергии

(ΔH_f^0)
 (ΔH_f^0)

17 Б23. Неэмпирическое исследование молекулярных орбиталей молекул NF_2 и N_2F_4 и константы сверхтонкого взаимодействия ЭПР в NF_2 . Hinchliffe A., Cobb J. C. An ab initio molecular orbital study of the NF_2 and N_2F_4 molecules, and ESR hyperfine coupling constants in NF_2 . «Chem. Phys.», 1974, 3, № 2, 271—276 (англ.)

В рамках неэмпирич. метода ССП МО ЛКАО рассчитаны свободный π -электронный радикал NF_2 и молекула N_2F_4 . Использован базис сгруппированных гауссовских функций, аппроксимирующих расширенный набор АО слейтеровского типа от 1s до 3p. При расчетах

6592-111X

X. 1974 N 17



(+1)

(+2)

(ΔH_f)

[X]

констант изотропного сверхтонкого взаимодействия (ИСТВ) с ядрами N^{14} и F^{19} в радикале NF_2 использован формализм неограниченного метода Хартри—Фока с последующим удалением примесной квартетной компоненты волновой функции. Вычисленные константы ИСТВ удовлетворительно согласуются с эксперим. данными. На основе рассчитанных для NF_2 и N_2F_4 значений электронных энергии оценено изменение энтальпии ΔH°_{298} , характеризующее р-цию диссоциации $N_2F_4(g) \rightarrow 2NF_2(g)$ при стандартных условиях. Теор. значение $\Delta H^\circ_{298} = 52,2$ кдж/моль довольно близко к опычному (85).

Н. Д. Чувылкин

NF₂

~~*5-7121~~

1974

*3-7106

№ 2 Д887. Изучение вакуумного УФ-фотолиза молекул NF₃, изолированных в матрице. Электронный спектр свободного радикала NF₂. Jacox Marilyn E., Milligan Dolphus E., Guillory William A., Smith Jerry J. Matrix-isolation study of the vacuumultraviolet photolysis of NF₃. The electronic spectrum of the NF₂ free radical. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 52, № 2, 322—327 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения в области 2000—400 см⁻¹ и электронные спектры в области 3300—1250 Å продуктов фотолиза молекул NF₃, изолированных в матрицах из Ne, Ar и CO при t-ре 14° K. Фотолиз производился излучением разрядной водородной

Ф. 1975. №2

лампы с длиной волны до 1200 Å. В ИК-спектре зарегистрированы полосы поглощения 929,932 и 1071 см⁻¹ (в матрице из Ag), относящиеся к колебаниям свободного радикала NF₂. В УФ-спектре обнаружена широкая полоса поглощения с максимумом в области 2700 Å. Полоса обладает слабо выраженной структурой с интервалом около 400 см⁻¹, соответствующим частоте деф. кол. NF₂ в возбужденном электронном состоянии. Эти результаты согласуются с литературными данными по спектрам NF₂ в газовой фазе. Последующее облучение образца ртутной линией 2537 Å приводит к уменьшению интенсивности полос поглощения, т. е. к фотодиссоциации NF₂. Библ. 19.

Ю. М.

NF₂

Xu-7106

1974

(u.n)

71009t Matrix-isolation study of the vacuum-ultraviolet photolysis of nitrogen trifluoride. Electronic spectrum of the nitrogen difluoride free radical. Jacox, Marilyn E.; Milligan, Dolphus E.; Guillory, William A.; Smith, Jerry J. (Inst. Mater. Res., Natl. Bur. Stand., Washington, D.C.). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 52(2), 322-7 (Eng). The vacuum uv photolysis of NF₃ in an Ar or a CO matrix at 14°K leads to the prodn. of NF₂, identified by its ir absorption. F-atom photodetachment also leads to the appearance of FCO in the CO matrix studies. The photodissocn. of NF₂ by 2537 Å radiation was confirmed. The appearance of a band system near 2600 Å with position and band spacings close to those previously reported for NF₂ in the gas phase demonstrates that the lower state of the gas-phase transition is the ground state of the mol. and confirms the assignment of the obsd. structure to a progression in the upper-state bending vibration.

XIII-2839

C.A. 1974. 81. N 12.

40919.6340

X, TC

NF₂афазов.
при ион.
дроблении

1974

2395

Исследование реакции тетрафторгидразина
с азотистоводородной кислотой методом
импульсного фотолиза. Москвитина Е.Н.,
Заманский В.М., Кузяков Ю.Я.

"Вестн. Моск. ун-та. Химия", 1974, 15,
№ 4, 486-487 (рез. англ.)

0193

см. NH₂ / III

I77 I80 185

ВИНИТИ

1974

№ 2

Отчет по научно-исслед.
работе ИВТАН, отдела № 8
Периодиками и св-ва
"азота, водорода и их соедине-
ний."

м. п.

NF₂

Summer 2017 - 1974

Simons Gary;
Choe Charles E.

Chem. Phys. Lett.

"Chem. Phys. Lett."
1974, 25 N3, 413-16

$BH_2; BF_2; NF_2; CO_2^-; CeNO_2^-;$
 $ClO_2; HCO; FCO; FBH; FNH;$
 XAB_2

(вещ. структура)
 расчёт
 XI 41 E

1974

Takahata Y., Ori T., I' Haya Y. J.,

Chem. Phys. Lett., 1974, 26, N4, 557-
 - 560 (англ.)

Why not use point charge models
 for the determination of bond
 angles?

Рис. 1000, 1975, 1523

10

Ⓞ

17

40919.6332

X, TC

NF₂ (24 см. при детект.)

1974

офиз. при детект.

2396

Исследование [] реакции тетрафторгидра-
зина с водородом методом импульсного
фотолиза. Заманский В.М., Москвитина
Е.Н., Кузяков Ю.Я.

"Вестн. Моск. ун-та. Химия", 1974, 15,
4, 458-460 (рез. англ.)

0193

I77 I80 18 5

ВИНИТИ

см. NF₂, 11

XIII-3547

1975

problem m. n., $D(BH, BH_2, BH_3, CH, CH_2, CH_3, NH, NH_2, NH_3, NO, NO_2, NO_3, NF, NF_2, NF_3)$

Accioly C.S.R., Vyanna J.D.M.,
J Phys B: Atom. and Mol. Phys, 1975,
2, 118, 2987-2994

10

8

50715.252

TC, Ch

29547 GR

 NF_2

1975

* 4-9472

Glidewell C. Bond angles in halides and hydrides of nitrogen and oxygen. "Inorg. and Nucl. Chem. Lett.", 1975, 11, N 5, 353-357

(англ.)

0409 пик

379 381

ВИНИТИ

NF₂

[Dmmuck 15904]

1975

Craddock S., Minchcliffe A.J.

crmp
to
manuse
Matrix isolation.
A. technique for the
study of reactive inorganic
species.

Cambridge University Press, 1975

50730.9091

Ph, Ch, TC

96201

NF₂

1975

#4-9510

Kendrick J., Hillier I.H., Guest M.F.
The calculation of hyperfine coupling
constants of NF₂ and PF₂ by UHF and
CI methods. "Chem. Phys. Lett.", 1975,
33, N 1, 173-175

(англ.)

0422 пик

383 383

ВИНИТИ

NF_2

Макив Т. Н.

1975

„Докл. АН СССР“

1975, 222, № 1, 151-154

спектры
поглощ
f m n

(см KrF_2 ; III)

NF_2

1975

Torgerson D. F., et al

(J.A.P.)

Can. J. Chem.,
1975, 53, N6, 933-938

● (all NF_3 ; III)

3 Б772. Изучение димеризации дифторамин-радикала методом CNDO/2. Slanina Z., Schlanger J., Zahradnik R. CNDO/2 study of the dihaloamino radical dimerization. «Collect. Czech. Chem. Commun», 1976, 41, № 7, 1864—1874 (англ.)

Методом МО ЛКАО ССП в приближении CNDO/2 определена геометрия молекул N_2 , F_2 , NF , NF_2 (I), NF_3 , транс- N_2F_2 , цис- N_2F_2 , транс- и гош-изомеров N_2F_4 (II), рассчитаны также vibraц. частоты и энергетич. затруднения вращения в II. На основе полученных данных рассчитаны термодинамич. параметры газофазной р-ции $2NF_2 \rightleftharpoons N_2F_4$ при 298,15, 273,15, 423,15 и 523,1° K, для образования транс- и гош-II. Энтальпия процесса рассчитана суммированием двухцентровых энергий взаимодействия, энтропия определена в приближении жесткий ротатор—гармонич. осциллятор. Значения величин $-\Delta H^\circ$ кдж/моль и $-\Delta S^\circ$ дж/град·моль составили при 298,15° K 94,190 и 177,107, при 523,1° K 93,527 и 175,625 для димеризации с образованием смеси изомеров. Полученные значения соответствуют эксперим. лит. данным. На основе сравнения термодинамич. функций димеризации I и NH_2 обсуждена зависимость р-ционной способности радикалов от локализации нечетного электрона. Пред. сообщ. см. РЖХим, 1976, 5Б1022. Ж. Василенко

1976

202941-54
*45-14806

(+4)

геометр
молеку

[X]

NF_2

N_2F_4

геометрия
молекулы

ΔH , ΔS
т.д. гр.

(+1)

х. 1977 №3

NF₂

omnuch 5757

1977

Lowe J.P.

J. Amer. Chem. Soc., 1977, 99,
(17), 5557-70.

(Ae)

b

NF₂

1977

Soudagar M.K.

case.
num.

J. Shivaji Univ. Sci.,
1977, 17, 27-38.



(see Cl₂O) III

NF₂

omnua 7445

1978.

Biskupič S. Valko L.
et al.

(γ)

Mol. Phys., 1978, 36 (6)
1709 - 1719.

●
(eu. N₂; III }

F₂ N

Loras F. J. :

1978

M. 11 -

J. Phys. and Chem. Ref.

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

Madanlal M. B. Deshpande

II Mexanostitve mony. co,

NF₂

1978

Mohan S., Manickavasagam R.

Indian J. Pure and Appl. Phys.,
1978, 16, n 1, 55-57.

смер. пост.

исепикоб.

исеписен.

(смер. CF₂

) III

NF₂

1979

Chen C.

no. mex.
pair.

Int. J. Quantum Chem.,
1980, 18, N1, 199-204

coll. NF-11

NF_2

М.И.; Л.И. 5535
XIII-5535

Виттиса 8956

1979

9 B225. Инфракрасная спектроскопия радикала NF_2 с использованием диодного лазера. Davies P. B., Mandy B. J., Russell D. K. Infrared diode laser spectroscopy of the NF_2 radical. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, №. 2—3, 395—398 (англ.)

На ИК-спектрометре с перестраиваемым диодным лазером в области частот от 1100 до 930 см^{-1} измерены спектры полос ν_1 и ν_2 радикала NF_2 X^2B_1 . Эксперим. ширины линий составляли приблизительно 100 МГц, что несколько больше расчетного доплеровского уширения и связано с неразрешенной сверхтонкой структурой линий. В полосе ν_1 разрешены отдельные компоненты P, Q и R ветвей, а также расщепление из-за спин-вращательного взаимодействия. Из анализа полученных данных определено эффективное изменение вращательных постоянных $B+C$ от $K=10$ в основном колебательном состоянии к $K=11$ в возбужденном колебательном ν_1 состоянии $-2,97(15) \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$. Полученное значение

XIII-5558

2.1980.109

Р близко к аналогичной величине для CF_2 . С использованием известных МВ-данных определена величина наибольшей компоненты тензора спин-вращательного взаимодействия для $K=11$ $\epsilon_{aa'} = -900$ МГц. Полученное значение согласуется с результатами для NF_2 , основанными на методе лазерного магнитного резонанса.

С. Н. Мурзин



OTUck 8956

1079

NH₂ |
-5553
(2i) (III)

92: 101700h Infrared diode laser spectroscopy of the difluorogamidogen radical. Davies, P. B.; Handy, B. J.; Russell, D. K. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl. CB2 1EP). *Chem. Phys. Lett.* 1979, 68(2-3), 395-8 (Eng). The ν_1 and ν_2 bands of NH₂(X²B₁) were measured around 1100 and 930 cm⁻¹ with tunable IR diode lasers. Many RQ and RR components were identified in the ν_1 band and a doublet splitting due to spin-rotation interaction is resolved in most of the transitions studied. Anal. of the ν_1 spectra yields preliminary values for the change in 1/2(B + C) on vibrational excitation and for the largest component of the spin-rotation tensor, c_{aa} , for the upper vibrational level.

XIII-5558



C.A. 1980. 92N/12

оттиски 8956
XIII- 5558

1979

NF₂
5555

М. П.; 1980
XIII

• 5 Д360. ИК-спектроскопия радикала NF₂ с помощью диодного лазера. Infrared diode laser spectroscopy of the NF₂ radical. Davies P. B., Handy B. J., Russell D. K. «Chem. Phys. Lett.», 1979, 68, № 2-3, 395-398 (англ.)

С помощью диодного ИК-лазера с перестраиваемой частотой получен спектр поглощения NF₂ (X^2B_1) в области 1100 и 930 см⁻¹ (полосы ν_1 и ν_3). В полосе ν_1 идентифицировано большое число компонент RQ и RR . В большинстве случаев удалось разрешить дублетную структуру, связанную со спин-вращательным взаимодействием. Анализ полосы ν_1 с привлечением результатов микроволн. спектроскопии позволил получить предварительные данные об изменении полусуммы вращательных постоянных B и C в зависимости от колебательного возбуждения и значение максим. компоненты $\epsilon_{aa} = -900$ Мгц ($K=11$) для верхнего колебательного уровня. Библ. 9.

Ф. 1980 № 5

NF₂

1979

Drake M.C., Rosenblatt G.M.,

Raman spectroscopy in high
temperature chemistry.

CKP

10th Materials Research Symposi-
um on characterization of High
temperature, Vapors and Gases.

NBS Special Publication 561
Volume I, 1979, 609-646.

(y Typbura) ●

FN-F

N-F

D_0 ; $A\epsilon$

(из molec.
NF₃)

(1) 12

27080.12

27080. Масс-спектрометрическое исследование три-
фторида азота методом электронного удара. Ду-
дин А. В., Балусев А. В., Горохов Л. Н. «Изв.
АН СССР. Сер. хим.», 1979, № 10, 2172—2177

Методом электронного удара исследованы процессы
ионизации молекулы NF₃. Для всех обнаруженных по-
ложит. и отриц. ионов измерены потенциал появления
и кинетич. энергия. Полученные эксперим. данные ис-
пользованы при расчете энергий связей $D_0(\text{FN}-\text{F}) =$
 $= 79 \pm 4$ и $D_0(\text{N}-\text{F}) = 60 \pm 4$ ккал/моль и нижнего преде-
ла сродства к электрону радикала NF₂: $EA(\text{NF}_2) \geq$
 $\geq 0,7 \pm 0,2$ эВ. Автореферат

NF₂

[commun 8364]

1979

Hinchliffe A, et al.

"J. Mol. Struct.", 1979, 54,
July, 231-38.

интер.
емфас.

all. NF₂ - III

NF₂ - summer n2 в name 1979
Margitlaß

кв. мех.
расчет,
померил
Schmiedeknecht A.
etal.
J. Amer. Chem. Soc.
1979, 101, p. 2002-10.

ammonia 8287 | 1979

NF_2^-

Schmiedeknecht A., et al.

J. Amer. Chem. Soc.,
1979, 101 (8), 2002-2010.

D_i , recombination



(all. NF_3 ; III)

NF_2

1981

Бауцев А. В. и др.

12^ч Менделеев. съезд по
общ. и прикл. химии.

Рез. докл. и сообщ. №3.
М., 1981, 198.

$\text{H}\bar{\text{e}}$

(см. ClO_2F ; III).

NF₂

Communication 10374 | 1980

Chen Ch.

молекуляр.
спектр.

Int. J. Quant Chem.

1980, 18 (1), 199-204.

Y. M.

omnibus 9263

1980

NF₂

CF₂

HO₂

J.

92:188695c Infrared spectroscopy of free radicals and transient molecules using a tunable diode laser. Davies, P. B.; Russell, D. K. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, Engl. CB2 1EP). *J. Mol. Struct.* 1980, 60, 201-4 (Eng). High resolu. IR spectra of transient species were measured in the gas phase using tunable semiconductor diode lasers in the 9 and 11 μ m regions. The spectra were recorded after a single pass of the beam either along a discharge-flow tube or through a conventional IR sample cell. The laser spectrum of the Cl atom at 11.3 was assigned to the $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ fine structure transition and shows several resolved hyperfine features. The spectra of NF₂ arise from absorptions in the ν_1 and ν_3 fundamental bands, and many components in the 8Q_K branches of the ν_1 band were assigned. Two other transient species were also detected and tentatively identified as CF₂(ν_3) and HO₂(ν_3).

(+2) ☒

CA 1980 92 v22

NF₂

Отмиск 12262

1981

12 Д1422. Спектры лазерного магнитного резонанса NF₂(ν_1) в сильном поле вследствие нарушения пересечений зеемановских уровней. High-field laser magnetic resonance spectra of NF₂(ν_1) tuned by the avoidance of Zeeman-level crossings. Nakuta Kohzo, Uehara Noromichi. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 11, 5995—5999 (англ.)

С применением CO₂-лазера методом внутрирезонаторной спектроскопии при t-ре 60—70° C исследованы спектры лазерного магн. резонанса молекулярных паров NF₂, возникающие вследствие нарушения пересечений зеемановских уровней в сильных магн. полях (до 20 кЭ). На основании анализа полученных спектроскопич. данных с высокой точностью определено положение вращательно-колебательной полосы ν_1 и получены значения вращательных и спин-вращательных констант возбужденного колебательного состояния. Библ. 15. В. С. З.

ф. 1981, 18, N 12.

NF₂

Ommuck 12262

1981

(di)
спектр
лазерн.
магнитн.
резонанса

| 95: 52208e High-field laser magnetic resonance spectra of nitrogen fluoride (NF₂) (ν_1) tuned by the avoidance of Zeeman-level crossings. Hakuta, Kohzo; Uehara, Hiromichi (Sagami Chem. Res. Cent., Kanagawa, Japan 229). *J. Chem. Phys.* 1981, 74(11), 5995-9 (Eng). The high-field laser magnetic resonance spectra of NF₂(ν_1) tuned by the avoidance of Zeeman-level crossings were obsd. by using a CO₂ laser. The anal. yielded the band origin of the ν_1 vibration-rotation band and the rotational and spin-rotation consts. of the excited vibrational state.

C.A. 1981, 95, N 6.

NF₂

1980

Jung R, et al.

кб.м.м.
рас. 1;
м. св.м.

Theor. Chim. acta, 1980, 57,
№, 131-44

с.м. 711-12

1980

NF_2

расчет
поверхностного
распределения.

Ohta K., et al.,

J. Chem. Phys. 1980,
73(4), 1770-6.



NF₂

1983
Davies P. B., Hamilton P. A.

Bull. Soc. chim. belg., 1983,

издано-
матр. 92, N 6-7; 16th Int. Symp.

енкмп. Free Radicals, Lausanne-Ot-
tignies, Sept. 12-16, 1983, 579.

(see. Ar⁺; III)

NF₂

Dom. 19632 15901/1983

Dixit A. N.,

Равнобесн.
геоцентр.
интерм.
расчет.

Indian J. Pure and
Appl. Phys., 1983, 21,
542-543.

NF_2

1984

Berkowitz J., Greene J.P.,
et al.

Do, J;

J. Chem. Phys., 1984, 81,
N12, Pt2, 6166-6175.

(comp. ● NF_3^+ ; III)

NF₂

1984

1 Б1105. Инфракрасная лазерная спектроскопия свободных радикалов и ионов. III. Полоса ν_3 NF₂(X²B₁). Infrared laser spectroscopy of free radicals and ions. III. The ν_3 band of NF₂(X²B₁). Davies P. B., Hamilton P. A. «Proc. Roy. Soc. London», 1984, A393, № 1805, 397—408 (англ.)

Измерена вращательная структура полосы ν_3 NF₂(X²B₁) в области 900—980 см⁻¹. Спектры высокого разрешения ($\sim 0,04$ см⁻¹) получались на фурье-спектрометре ($P \sim 1$ мм, $l = 15$ см), а спектры очень высокого разрешения, ограниченного доплеровским уширением, — с помощью перестраиваемого диодного лазерного спектрометра ($P \sim 0,1$ мм, $l = 50$ см). Молекулы NF₂ получались при нагревании ($T = 100^\circ$) N₂F₄. Приведено положение и отнесение около 250 линий. Значения вращательных постоянных, постоянных центробежного искажения и спин-вращательных постоянных для

Di, M. A.

(4) 12

X. 1985, 19, N1.

состояния $v_3=1$: $A=2,3257539$, $B=0,3940597$, $C=$
 $=0,3343841$, $\Delta_{NN}=4,662 \cdot 10^{-7}$, $\Delta_{NK}=-2,015 \cdot 10^{-6}$,
 $\Delta_{KK}=6,169 \cdot 10^{-5}$, $\delta_N=1,080 \cdot 10^{-7}$, $\delta_K=9,69 \cdot 10^{-7}$
 (в см^{-1}); $\varepsilon_{aa}=-918,11$, $\varepsilon_{bb}=-90,33$, $\varepsilon_{cc}=8,57$
 (в МГц); $\nu_0=942,48153 \text{ см}^{-1}$; $\xi_{13}=0,698$. При обработ-
 ке спектра использовались мол. постоянные основного
 состояния, полученные авторами ранее из анализа вра-
 щательной структуры полосы ν_1 . Сопоставлены значения
 вращательных постоянных и дефектов инерции для
 основного и возбужденных ($v_1=1$, $v_3=1$) колебатель-
 ных состояний $\text{NF}_2(X)$; дефекты инерции для состоя-
 ний $v_1=1$ и $v_3=1$ молекул NF_2 и CF_2 . В. М. Ковба

NF₂

Дм. 19 000

1984

9 Л155. ИК-лазерная спектроскопия свободных радикалов и ионов. Ч. II. Анализ полосы ν_1 NF₂($\tilde{X}^2B_1$).
Infrared laser spectroscopy of free radicals and ions. II. Analysis of the ν_1 band of NF₂($\tilde{X}^2B_1$). Davies P. B., Hamilton P. A., Lewis-Bevan W., Russell D. K. «Proc. Roy. Soc. London», 1984, A392, № 1801, 445—455 (англ.)

ν_1 , м.п.

С использованием перестраиваемых по частоте диодных ИК-лазеров получены ИК-спектры радикалов NF₂ (I), образованных при термич. диссоциации молекул

ф. 1984, 18, № 9

N_2F_4 в газовой фазе. Идентифицированы ~ 300 компонент вращательной структуры ИК-полосы колебания ν_1 I со спектральным разрешением $5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Рассчитаны параметры вращательных переходов Q-ветви полосы ν_1 с большими значениями числа K_a . Частота перехода 0—0 полосы ν_1 I составляет $1074,9897(8) \text{ см}^{-1}$. Обсуждены условия кориолисова взаимодействия между колебательными движениями ν_1 и ν_3 I. Определены вращательные постоянные основного состояния для колебания ν_1 I, которые удовлетворительно согласуются с аналогичными величинами по данным расчета микроволн. спектров I. Ч. I см. Davies P. B. et al. «Proc. Roy. Soc. London», 1983, A389, 205. И. В. А.

NF₂ от. 19626, от. 19 000 1984

17 Б1245. Инфракрасная лазерная спектроскопия свободных радикалов и ионов. II. Анализ полосы ν_1 NF₂ (X^2B_1). Infrared laser spectroscopy of free radicals and ions. II. Analysis of the ν_1 band of NF₂ (X^2B_1). Davies P. B., Hamilton P. A., Lewis-Bevan W., Russell D. K. «Proc. Roy. Soc. London», 1984, A392, № 1801, 445—455 (англ.)

Спектр поглощения в области полосы ν_1 долгоживущего радикала NF₂, образуемого при термич. диссоциации тетрафторгидразина N₂F₂, $N_2F_2 \rightleftharpoons 2NF_2$, исследован на диодном лазерном спектрометре (I) между 1020 и 1145 см⁻¹ с разрешением, ограниченным доплеровским уширением. Спектр калиброван по спектрам OCS, NH₃, N₂O, CO₂, измеренным в этой области. Абс. точность измерения центров линий NF₂ составляла $5 \cdot 10^{-4}$ см⁻¹. Проведено отнесение почти 300 линий поглощения полосы ν_1 NF₂ (X^2B_1). Показано, что в области, где группируются линии переходов с большими значениями вращательных квантовых чисел (K, N), спектр близок

све

М.П.
X. 1984, 19, N 17

по структуре к спектру Q-ветви перпендикулярной полосы молекулы типа вытянутого симм. волчка, в области переходов с низкими вращат. квантовыми числами Q-структура нерезкая и отнесение м. б. проведено только при колич. анализе спектра. С использованием уотсоновского приведенного вращат. гамильтониана в A-редукции проведена совместная обработка измеренных центров линий 100 ИК-переходов и 17 МВ-переходов в основном колебат. состоянии и определены спектроскопич. постоянные (вращат. A, B, C , центробежные $\Delta_{NN}, \Delta_{NK}, \Delta_{KK}, \delta_N, \delta_K$; ТС $\epsilon_{aa}, \epsilon_{bb}, \epsilon_{cc}$) возбужденного колебат. состояния $v_1=1$ (в ед. см^{-1}): $A=2,354099(59)$, $B=0,393822(18)$, $C=0,337949(21)$; $10^7\Delta_{NN}=4,14(30)$, $10^6\Delta_{NK}=-1,269(132)$, $10^5\Delta_{KK}=6,337(25)$, $10^7\delta_N=-1,042(201)$, $10^6\delta_K=-7,35(313)$, $\epsilon_{aa}/(\text{МГц})=939,5(23,7)$, $\epsilon_{bb}/(\text{МГц})=-94,1(11,1)$, $\epsilon_{cc}/(\text{МГц})=9,9(12,3)$. Для центра полосы v_1 найдено значение $1074,9897(8) \text{ см}^{-1}$. Влияние кориолисового взаимодействия между колебаниями v_1 и v_3 учтено только при анализе дефекта инерции, для к-рого получены величины: $\Delta_{000}=0,1221 \text{ а.е.м. } \text{А}^2$ и $\Delta_{100}=-0,0840 \text{ а.е.м. } \text{А}^2$ соотв. для основного и возбужденного $v_1=1$ колебат. состояний. Пред. сообщ. см. «Proc. Roy. Soc». Lond., 1983, A389, 205.

В. М. Михайлов

NF₂

[Om. 19000]

1984

(ν_1)

100: 200087d Infrared laser spectroscopy of free radicals and ions. II. Analysis of the ν_1 band of nitrogen difluoride (X^2B_1). Davies, P. B.; Hamilton, P. A.; Lewis-Bevan, W.; Russell, D. K. (Dep. Phys. Chem., Univ. Cambridge, Cambridge, UK CB2 1EP). *Proc. R. Soc. London, [Ser.] A* 1984, 392(1803), 445-55 (Eng). Almost 300 absorption lines of the ν_1 fundamental band of NF₂(X^2B_1) were assigned by using high resolu. IR spectroscopy with tunable diode lasers. The spectrum resembles a perpendicular band of a prolate sym. top with Q-branches which have high K_a quantum nos. presenting the most distinguishable features. A combined fit of nearly 100 IR lines and 18 microwave transitions yields a new set of rotational, distortion and spin-rotation parameters for the $\nu_1 = 1$ level. The band center is 1074.9897(8) cm⁻¹. A preliminary anal. of the ν_1 - ν_3 Coriolis interaction through the inertial defect is presented.

C.A. 1984, 100, N 24

NF₂

1986

21 Б1275. Изучение полосы ν_3 радикала NF₂ методом лазерно-микроволнового двойного резонанса с использованием спектров лазерно-магнитного резонанса в сильных полях. Laser microwave double resonance using high-field LMR spectra for the ν_3 band of NF₂. Uehara H., Horiai K. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 10, 5568—5574 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом двойного ИК—МВ-резонанса в спектре лазерно-магнитного резонанса в сильном (до 20 кГц) поле исследована вращат. структура и эффект Зеемана на вращат. структуре ИК-полосы ν_3 радикала NF₂ в основном дублетном электронном состоянии (использовались лазерные линии в области 900—943 см⁻¹). Анализ спектра выполнен с учетом квартичного центробежного искажения, электронного спин-вращат. и электрон-ядерных спин-спиновых взаимодействий, квадрупольной связи ядра азота и эффекта Зеемана. С привлечением данных по ИК-спектру определены значения констант этих взаимодействий, в т. ч. значения спиновых и вращат. g-факторов.

Е. В. Алиева

(М.П.)

X. 1986, 19, N 21

NF₂

1986

УДК 537.874. Лазерный микроволновый двойной резонанс с использованием спектров лазерного магнитного резонанса в сильном поле для полосы ν_3 NF₂. Laser microwave double resonance using high-field LMR spectra for the ν_3 band of NF₂. Uehara Hiromichi, Horiai Kouji. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 10, 5568—5574 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Получены спектры лазерного магн. резонанса радикалов NF₂ в сильном поле с использованием лазера CO₂ и аналогичные спектры двойного микроволнового лазерного магн. резонанса. Анализ спектров проведен с использованием гамильтониана Уотсона с учетом спин-вращательного взаимодействия. Приведены значения резонансных полей и соответствующие им частоты микроволн. резонансов. С использованием микроволн. данных и результатов измерений с диодным лазером для нулевых частот определены g -факторы. М. В. Т.

(М.В.Т.)

Ф. 1986, 18, № 12.

№2

[от. 28370]

1987

Алтыман А.Б., Венгелева Т.И. и др.

Струк- Таблицы рекомендуемых
тура скривочных дамбов.

Кодоват. Депонирован. в ВНИИКИ

Усестоты. Госстандарта СССР 17.02.87.

№ 295.

NF_2^+

(DM. 31458)

1988

Fisher J. J., Mc Mahon T. B.,

стабильн.,
ab initio
расчет.

J. Amer. Chem. Soc., 1988,
110, N 23, 7599-7604.

F_2N^+
(NF_2^+)

[om. 30490] 1988

Jacox M.E.,

Ti, J. Phys. and Chem. Ref.
Di; Data, 1988, 17, N2, 340.



NF₂

1989

Baird N. Colin, Kuhn
Markus, et al.

u.n. Can. J. Chem. 1989. 67,
N41. C. 1952-1958.

(cer. ● BH₂; III)

NF₂

1989
Frank U.E., Hüttner W.,

mm Wave Magic - Double-
let Rotational Zeeman
Spectroscopy of the NF₂
Radical

Eleventh Colloquium On
High Resolution Mo-Y 28

ocular spectroscopy, Giessen,
September 18-22, 1989, A1, J28.

FNF³⁺

1989

Pyykkö Pekka

M.H.

Chem. Phys. Lett. - 1989 -
156, ~4. - p. 337-40

(en. CCC⁴, II)

NF₂

1990

114: 49913m The potential energy and dipole moment surfaces of nitrogen difluoride and ozonide by complete active space self-consistent field. Peterson, Kirk A.; Mayrhofer, Rudolph C.; Woods, R. Claude (Dep. Chem., Univ. Wisconsin, Madison, WI 53706 USA). *J. Chem. Phys.* 1990, 93(7), 5020-8 (Eng). Three-dimensional potential energy and dipole moment surfaces were calcd. for the 25-electron radicals NF₂ and O₃⁻ in their ²B₁ ground electronic states by the complete active space SCF (CASSCF) method. Spectroscopic consts. have been calcd. from the anal. potential energy functions for each species. Predictions of the rotational and rotational-vibrational spectra of O₃⁻ were made by comparison to the NF₂ results. Vibrational band origins have been calcd. by perturbation theory and also variationally in a basis of distributed Gaussian functions. Rotationless dipole moment matrix elements and vibrational band intensities have been detd. from the CASSCF dipole moment functions. The fundamental vibrational band origins and intensities of O₃⁻ are predicted to be 979 cm⁻¹/0.87 cm⁻² atm⁻¹ (ν₁), 565 cm⁻¹/17.8 cm⁻² atm⁻¹ (ν₃₂), and 739 cm⁻¹/2620 cm⁻² atm⁻¹ (ν₃). Smaller basis-set calcns. of the first three excited electronic states of O₃⁻ have also been carried out.

2B₁, u.n.,
param

(4) X

C.A. 1991, 114, N 6

O₃⁻

119 125

1990

NF₂

Peterson K.A., Mayr-
hofer R.C., Woods R.C.,

J. Chem. Phys. 1990, 93,

U.N. NF, C. 5020 - 5028

P.R.P. N 11, 1991

NF₂

ОМ. 33557

1991

8 Д150. Неэмпирическое исследование низколежащих электронных состояний радикала NF₂. Ab initio study of low-lying electronic states of the NF₂ radical / Cai Z.-L., Sha G.-H., Zhang C.-H., Huang M.-B. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 178, № 2—3.— С. 273—278.— Англ.

Неэмпирическими методами в базисе 6-31 ГФ* исследованы низколежащие электронные состояния радикала NF₂: X^2B_1 , 2A_1 , 2B_2 , 2A_1 и 2A_2 . Расчеты первых трех из указанных состояний проведены с использованием теории возмущений в варианте Меллера — Плессета 2-го порядка (МП2). Расчеты двух последних состояний проведены неограниченным методом Хартри — Фока. Получены равновесные геометрии, энергии возбуждения, колебательные частоты и др. спектроскопич. постоянные. Результаты расчета методом МП2 для состояний X^2B_1 и 2A_1 согласуются с эксперим. данными, полученными при фотолизе методом УФ-спектроскопии. Проведенные исследования показали важность включения в базис поляризац. ф-ций и учета корреляционной энергии при проведении неэмпирич. расчетов радикала NF₂.

Т. Д.

М.П.

ср. 1991, № 8

NF₂

OM. 35557

1991

114: 214816z Ab initio study of low-lying electronic states of the difluoroamidogen (NF₂) radical. Cai, Z. L.; Sha, G. H.; Zhang, C. H.; Huang, M. B. (Dalian Inst. Chem. Phys., Chin. Acad. Sci., Dalian, Peop. Rep. China 116012). *Chem. Phys. Lett.* 1991, 178(2-3), 273-3 (Eng). The equil. geometries, excitation energies, vibrational frequencies for the low-lying states X²B₁, ²A₁, ²B₂, ²2A₁, and ²4₂ of the NF₂ radical have been calcd. at the HF/6-31 G* and MP2/6-31 G* levels. Our MP2/6-31 G* results for the X²B₁ and ²A₁ states are in good agreement with available exptl. data obtained recently via UV spectroscopy and photolysis. Our calens. indicate that inclusion of polarization functions in the basis set and incorporation of correlation energy are both important in ab initio calens. on the NF₂ radical.

геометрии,
D_e, энергии
состояние,
расшир

С.А. 1991, 114, N 22

NF₂

СМ. 35557

1991

2) 17 Б1042. Неэмпирическое изучение низколежащих состояний радикала NF₂. Ab initio study of low-lying electronic states of the NF₂ radical / Cai Z.-L., Sha G.-H., Zhang C.-H., Huang M.-B. // Chem. Phys. Lett.— 1991.— 178, № 2—3.— С. 273—278.— Англ.

Неограниченным методом ССП в базисе 6-31ГФ* оптимизированы геометрии состояний X^2B_1 , 1^2A_1 , 2^2B_2 , 2^2A_1 и 2^2A_2 молекулы NF₂. Для состояний X^2B_1 , 1^2A_1 и 2^2B_2 оптимизация проведена также методом теории возмущений Мёллера — Плессета 2-го порядка, рассчитаны силовые постоянные, колебат. частоты и вращат. постоянные. Найдено, что для получения точных результатов необходимы как включение в базис поляризац. ф-ций, так и учёт корреляции. В. Я. Беспалов

М.П.

Х. 1991, № 17

NF₂

Dixie A. N.

1991

M

Indian J. Pure and Appl.

Phys. 1991. 29, n1. c.

41-42.

(cur. ● BeH₂; III)

• NF_2

[Om. 35 481]

1991

Frank U. E., Küttner W.,

Chem. Phys. 1991, 152,

N 3, 261-279

The diamagnetic properties
of the NF_2 radical

by magic doublet rotational
Zeeman spectroscopy.

NF_2^+

(DM-35863)

1991

поверх.
поверх.,
M,
теор.

Peterson R. A., Mayrhofer R. C.
et al.

J. Chem. Phys. 1991, 94,
N1, 414-430.

Complete active space self-
consistent  field potential

energy surfaces, dipole moment
functions, and spectroscopic
properties of O_3 , CF_2 , NO_2^- , and
 NF_2^+ .

NF₂

1992

119 13329d MRSDCI studies of four doublet states and dissociation of the X^2B_1 and 2A_1 state of the difluoroamldogen radical. Cai, Zhengli; Sha, Guohe; Zhang, Cunhao (Dalian Inst. Chem. Phys., Acad. Sin., Dalian, Peop. Rep. China 116012). *Prog. Nat. Sci.* 1992, 2(1), 18-24 (Eng). The equil. geometries and excitation energies for the low lying electronic states X^2B_1 and 2A_1 , 2B_1 and 2A_2 of the NF₂ radical have been calcd. at the MRSDCI level with a double zeta basis augmented by polarization functions (d functions) on all the atoms. The results for the X^2B_1 and 2A_1 states are in good agreement with expt., and the excitation energy for $X^2B_1 \rightarrow ^2A_2$ is in agreement with the exptl. data of Ref. [12]. The stability and dissoci. paths for X^2B_1 state is stable, but that of the 2A_1 state is unstable and can easily dissoci. into NF($a^1\Delta$)+F(2P) since the calcd. energy barrier for this dissoci. is only 0.473 eV.

$X^2B_1, ^2A_1,$
 $(^2B_2, ^2A_2)$

смыслу и
гипотезе
мод. намен

C. A. 1993, 119, N2

NF₂⁺

1993

119: 15562] Theoretical studies of several electronic states of the difluoroaminyllum (NF₂⁺) ion. Cai, Z. L. (Dep. Chem., East China Inst. Technol., Nanjing, Peop. Rep. China 210014). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 202(1-2), 70-4 (Eng). The equil. geometries, excitation energies, force consta. and vibrational frequencies for several low-lying electronic states X¹A₁, ¹B₁, ³B₁, ¹A₂, ³A₂, ¹B₂ and ³B₂ of the NF₂⁺ ion were at the MRSDCI level with a double zeta plus polarization basis set. The calcd. excitation energies for X¹A₁ → ¹B₁ and X¹A₁ → ³B₁ and vibrational frequency values for the X¹A₁ and ³B₁ states are in agreement with available exptl. data obtained via photoelectron spectroscopy of the NF₂ radical. Some electronic transition properties for the ¹B₁ → X¹A₁ and ¹B₂ → X¹A₁ transitions are calcd. based on the MRSDCI wave functions.

анализирана,
теоретички
изучавана,
молекуларна

C.A. 1993, 119, №2

NF_2^+

1993

Falaev A.G., Kovna V.I.,

теорет.
расчет
уравн.
состояния

Zh. Fiz. Khim. 1993, 67(5),
987-9.

(Lit. BF_3^+ ; III)

NX_2^+ NF_2^+

1993

120: S6903c Theoretical studies of inorganic compounds. Part III. The lowest lying singlet and triplet states of the halonitrenium ions NX_2^+ and NHX^+ and a comparison with the carbon analogs CX_2 and CHX ($X=F, Cl, Br, I$). A theoretical study. Gobbi, Alberto; Frenking, Gernot (Fachber. Chem., Philipps-Univ., D-35037 Marburg, Germany). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1993, 66(11), 3153-65 (Eng). The equilibrium, energy differences, and vibrational frequencies for the energetically lowest lying 1A_1 and 3B_1 states of NH_2^+ , NHX^+ , and NX_2^+ ($X=F, Cl, Br, I$) are theor. predicted using ab initio quantum mech. methods at the MP4/6-311G(2d)/MP2/6-31G(d) level of theory. Effective core potentials are employed for bromine and iodine. The isoelectronic carbenes CH_2 , CHX , and CX_2 are also calcd. The electronic structure of the mole. is investigated using the topol. anal. of the electronic wave function.

мол. ион
состояние. и
мол. ион
состояние, моле-
кула

(15) 

C.A. 1994, 120, N8



NF₂

1993

120: 87144t Electronic and geometrical structure of the NF₂ radical. Papakondylis, Aristotle; Mavridis, Aristides (Laboratory of Physical Chemistry, Department of Chemistry, National and Kapodistrian University of Athens, Panepistemiopolis, Athens, Greece 15771). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 216(1-2), 167-72 (Eng). Ab initio calcns. of equil. geometries, excitation energies, dipole moments and charges for the low-lying X²B₁, 1²A₁, 2²A₁, ²B₂ and ²A₂ electronic states of the NF₂ radical were carried out at the RHF/SDCI level, using large basis sets. The results are in good agreement with exptl. data. A rationalization scheme for the exptl. results obtained through UV spectroscopy and photolysis of NF₂ is proposed from the theor. results.

ab initio calcns.
момент. и заряды.
баз. еосм.

C.A. 1994, 120, N8

NF₂

1994

Austen Maggie A.,

Fríksson Leif A. et al.

моpеeи.

paчeии

ceпpыкeи.

Can. J. Chem. 1994,

72 (3), 695-704.

(сер.  NH₂ ; III)

NF₂

1994

120: 307847s Absolute cross sections for the electron impact ionization of the NF₂ and NF free radicals. Tarnovsky, V.; Levin, A.; Becker, K. (City Coll., City Univ. New York, New York, NY 10031 USA). *J. Chem. Phys.* 1994, 100(8), 5626-30 (Eng). The authors report measurements of the abs. cross sections for the electron-impact ionization of the NF₂ and NF free radicals from threshold to 200 eV. At 70 eV, the abs. parent NF₂ and NF ionization cross sections were $1.25 \pm 0.23 \text{ \AA}^2$ and $1.05 \pm 0.19 \text{ \AA}^2$, resp. The authors found little evidence of the presence of vibrationally excited radicals in the incident target beam for both NF₂ and NF. The authors also studied the dissociative ionization of NF₂ and NF. The abs. cross section for the formation of the NF⁺ fragment ions from NF₂ was found to be $0.75 \pm 0.15 \text{ \AA}^2$ at 70 eV. The NF⁺ fragment ions were formed with little excess kinetic energy. The only significant pathway leading to the obsd. NF⁺ fragment ions was the single pos. ion formation. The authors' data showed no indication of the presence of double pos. ion formation channels or pos.-neg. ion pair formation processes. Cross sections for the formation of the at. fragment ions F⁺ and N⁺ from both NF₂ as well as NF were found to be small, with max. values of less than $0.1 \text{ \AA}^2$ at 70 eV in all cases.

УОНИУ ФАКТ
УГОЛ, ПЕРИ
НЕ СЕРИ
УОНИУАУ

□

(H) NF

C.A. 1984, 120, N 24

NF_2^+

[Dm. 38022]

1995

NF_2^-

Jacob M.E., Thompson W.E.,

UK

J. Chem. Phys., 1995, 102,

спектр
в

(1), 6-12.

инфракрасной

NF_2^+

[DM. 40062]

1999

Dominic P. Seecombe,
Fary K. Jarvis et al.,

Do

Chem. Phys., 1999,
250, 335-346