

N3 F

FN₃

1966

V 12 Б98. Спектр поглощения азид фтора. Gipstein
Edward, Haller John F. Absorption spectrum of
fluorine azide. «Appl. Spectrosc.», 1966, 20, № 6, 417—418
(англ.)

Исследовано разложение азид фтора, минуя фазу,
конденсации при 100°. Азид фтора — газ ярко-зеленого
цвета, имеющий полосу поглощения, при 410 мμ.

Р. Хайкин

X. 1967.12

FN₃

1966

✓1

80620c Absorption spectrum of fluorine azide. Edward Gipstein and John F. Maller (Olin Mathieson Chem. Corp., New Haven, Conn.). *Appl. Spectrosc.* 20(6), 417-18(1966)(Eng). Improved yields of FN₃ were obtained by reaction of 2 moles dry HN₃ with 1 mole F gas at room temp. The HN₃ was carried into the reaction chamber in a stream of dry N at 45 cc./min. Details are given of the app. and procedure for safe reaction. The product, a green gas, was characterized by its visible spectrum in N. In addn. to a strong band at 410 mμ, weaker bands were observed at 378, 390, 397, 428, 439, and 444 mμ. M. F. Barash

C. A. 1967. 66. 18

FN₃

1986

19 Б4373. Фотолиз FN₃ при 193 нм. Photolysis of FN₃ at 193 nm. Patel D., Pritt A. T., Benard D. J. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 9, 1931—1934 (англ.)

Изучены эмиссионные спектры в видимой области, возбуждаемые при импульсном ФТ NF₃ светом 193 нм эксимерного лазера на AgF (интегральный поток энергии в импульсе 5—130 мДж/см²). Р-цию проводили при давл. 10—200 Торр в потоке, получаемом смешиванием двух газовых потоков — HN₃+N₂ и F₂+N₂, так что FN₃ получался в р-ции HN₃+F₂ непосредственно в потоке. Наблюдали спектр. полосы NF(*b*→X) при 528 нм и N₂(*B*→A) при 600—800 нм, причем в первые 500 нс после фотолизующего импульса колебат. распределение NF(*b*) является больцмановским и соответствует т-ре 1200 К в отличие от изученного ранее ФТ ClF₃, где образуется NCl(*b*) с неравновесно высоким заселением колебат. состояний $v' \leq 10$. Сечение фотодиссоциации FN₃ при 193 нм равно $2,8 \cdot 10^{-17}$ см². Выходы образования NF(*b*) и N₂(A) равны соотв. 5% и 25%. Константы скорости тушения NF(*b*) и N₂(A) в соударениях с FN₃ и NO найдены равными $(8,7 \pm 3,0)$.

спектр, ΔH_f

(4)

Δ

X. 1986, 19, N 19

FN₃ (ΔH_f)

$\cdot 10^5$ и $(1,1 \pm 0,2) \cdot 10^6$ Торр $^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ соотв., а теплота образования FN_3 лежит в диапазоне 120—135 ккал/моль.
В. Е. Скурат

(10 $\pm$
+H $_2$)

N₃F

[Om. 27602]

1987

Gholivand K., Schatte G.,
et al.,

uk

снелмр.

сачмтх

уимет ах.

Inorg. Chem., 1987,

26, N 13, 2137-2140.

FN₃

1987

Д 2 Б1044. Электронная структура и энергетика азид-да фтора (FN₃). Electronic structure and energetics of fluogrine azide (FN₃) / Michels H. A., Montgomery J. A. // Abstr. Pap., 194th ACS Nat. Meet. (Amer. Chem. Soc.), New Orleans, La, Aug. 30-Sept. 4, 1987.— Washington, D. C., (1987).— С. 953.— Англ.

Проведен расчет основного электронного состояния. ¹A' молекулы FN₃ с помощью теории возмущений Меллера — Плессета 2-го порядка и методом конфигурац. взаимодействия с учетом одно- и двукратных возбуждений по отношению к хартри-фоковскому детерминанту. Равновесная конфигурация FN₃ имеет симметрию C_s и угол F—N—N 104,3°. Полученная теплота образования FN₃ (515 кДж/моль) согласуется с эксперим. данными, основанными на исследовании лазерного ФТ FN₃. Энергия диссоциации на N₂+NF и F+N₃ состави-да 33 и 85 кДж/моль соответственно. А. А. Сафонов

М.П.

х. / 1989, №2

FN₃

от 29449 1988

7 Л175. Изучение структуры триазодиенилфторида FN₃ методами микроволновой и ИК-спектроскопии и с помощью расчетов неэмпирическими методами. Structure of triazadienyl fluoride, FN₃, by microwave, infrared, and ab initio methods. Christen D., Mack H. G., Schatte G., Willner H. «J. Amer. Chem. Soc.», 1988, 110, № 3, 707—712 (англ.)

В области частот 18—26,5 ГГц измерен микроволн. спектр и в области частот 200—2500 см⁻¹. ИК-спектр поглощения молекулы FN₃ в газовой фазе и ее различных изотопомеров, обогащенных ядрами ¹⁵N. Проведен колебательно-вращательный анализ, определены гармонич. силовые постоянные, молекулярная структура, вращательные постоянные, постоянные центробежного искажения и ядерного квадрупольного взаимодействия. По штарковскому сдвигу частот определены также компоненты дипольного момента по главным осям инерции и общий дипольный момент FN₃. Проведены также расчеты этих параметров FN₃ с помощью неэмпирич. квантовохимич. методов.

В. А. Морозов

М.П.

Ф. 1988, 18, № 7

FN₃

DM-29449

1988

[108: 64885y Structure of triazadienyl fluoride, FN₃, by microwave, infrared, and ab initio methods. Christen, Dines; Mäck, H. G.; Schatte, G.; Willner, H. (Inst. Phys. Theor. Chem., Univ. Tuebingen, D-7400 Tuebingen, Fed. Rep. Ger.). *J. Am. Chem. Soc.* 1988, 110(3), 707-12 (Eng). Microwave and IR spectra of unstable FN₃ and its various ¹⁵N-enriched isotopomers were recorded and analyzed, yielding data on mol. structure, dipole moment, and harmonic force consts. The rotational consts. for the parent isotopic species are (in MHz) A = 48 131.448, B = 5713.288, C = 5095.276. The dipole moments are $\mu_a = 1.1$, $\mu_b = 0.7$, $\mu_{total} = 1.3$. The fundamental frequencies (cm⁻¹) are 2037, 1090, 873.5, 658, 241, 504. The diagonal force consts. (100 N/m) are $f_{N_3N_3} = 17.414$, $f_{N_aN_3} = 6.686$, $f_{N_aF} = 3.753$, $f_{FN_aN_3} = 1.245$, $f_{N_aN_3N_3} = 0.477$, $f_{\omega p} = 0.014$. The structural parameters are $r_{NF} = 144.4$, $r_{N_aN_3} = 125.3$, $r_{N_3N_3} = 113.2$ pm; $\angle FN_aN_3 = 103.8^\circ$, $\angle N_aN_3N_3 = 170.9^\circ$. Ab initio calcs. using 6-31G* and MP2/6-31G* basis sets were carried out to calc. structure, force field, dipole moment, and elec. field gradients at the ¹⁴N quadrupole nuclei.

48, 110 meop.
 na chem emp yri
 all. no cm.

C.A. 1988, 108, 28

FN₃

OM. 29449

1988

15 Б1071. Изучение строения молекулы триазадие-
нилфторида, FN₃, с использованием микроволновой и
ИК-спектроскопии и неэмпирических расчетов. Structure
of triazadienyl fluoride, FN₃, by microwave, infrared, and
ab initio methods. Christen D., Mack H. G., Schat-
te G., Willner H. «J. Amer. Chem. Soc.», 1988, 110, № 3,
707—712 (англ.)

Экспериментальные данные по строению и физ. св-вам
молекулы FN₃, полученные на различных образцах с
обогащением изотопом ¹⁵N, сопоставлены с результа-
тами неэмпирич. расчетов в базисе 6-31 ГФ* с учетом
(МП2) и без учета электронной корреляции. Результа-
ты расчетов молек. структуры, дипольных моментов и
гармонич. силового поля для FN₃, а также изученной
ранее молекулы HN₃ находятся в хорошем полуколич.
соответствии друг с другом. Учет корреляции, как пра-
вило, заметно улучшает совпадение опытных и расчет-
ных данных.

С. П. Долин

М.А.

Х. 1988, 19, N 15

FN₃

OM 29096

1988

16 Б1026. Фторазад и фторнитрат: структура и связь. Fluorine azide and fluorine nitrate: structure and bonding. Peters N. J. S., Allen L. C., Firestone R. A. «Inorg. Chem.», 1988, 27, № 4, 755—758 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП в базисах 4-31 ГФ и 6-31 ГФ* с учетом электронной корреляции по теории возмущений Меллера—Плессета 2-го порядка в базисе 6-31 ГФ* определена равновесная геометрия фторазида FN₃ и фторнитрата FNO₃. Построены карты распределения электронной плотности валентных МО. Установлено, что FN₃ имеет плоскую конформацию с близкой к линейной конформацией фрагмента N₃. Согласно анализу заселенностей по Малликену связь F—N в FN₃ полярна с отриц. зарядами на обоих атомах и переносом электронной плотности с F на N. Установлено, что молекула FNO₃ плоская. Геометрия близка к экспериментальной.

Н. В. Харчевникова

М.П.

(41) 

X. 1988, 19, N 16

FN₃

(DM-29096)

1988

108: 82337a Fluorine azide and fluorine nitrate: structure and bonding. Peters, Nancy J. S.; Allen, Leland C.; Firestone, Raymond A. (Nat. Sci. Div., Long Island Univ., Southampton, NY 11968 USA). *Inorg. Chem.* 1988, 27(4), 755-8 (Eng). The electronic and mol. structures were calcd. of FN₃ and FONO₂ mols. by using split-valence and d-orbital polarized basis sets and the GAUSSIAN 82 program. Single function and correlated wave functions were detd. by 2nd-order perturbation theory.

М. Леонкин.
структура,
теор. расчет.

Ⓐ ⊠

FONO₂

(B M)
Per

C.A. 1988, 108, N 10.

N_3F

1988

16 Б1145. Фотоэлектронный спектр и электронная структура триазиенилфторида, N_3F . Photoelectron spectrum and electronic structure of triazadienyl fluoride, N_3F . Rademacher P., Bittner A. J., Schatte G., Willner H. «Chem. Ber.», 1988, 121, № 3, 555—557 (англ.)

Исследован фотоэлектронный спектр (ФЭС) молекулы триазиенилфторида, N_3F , возбуждаемый He-I. Для интерпретации спектра выполнен неэмпирич. расчет Пт ионизации (ПИ) верхних валентных МО. Положение (в эВ) и отнесение основных пиков в ФЭС N_3F : 11,01 (МО $3a''$, π), 13,72 (МО $8a'$, n_N , n_F) 15,6 (МО $7a'$, n_F), 15,9 (МО $2a''$, π_F), 16,67 (МО $6a'$, n_N , σ), 18,2 (МО $1a''$, π), 19,7 (МО $5a'$, σ). У двух первых полос наблюдались компоненты колебат. структуры с $\Delta\nu = 800$ и 1800 см^{-1} , отнесенные к колебаниям ν_2 (сим. вал. кол. фрагмента N_3) и ν_1 (асим. вал. кол. N_3) катиона N_3F^+ (в молекуле N_3F $\nu_2 = 1090 \text{ см}^{-1}$, $\nu_1 = 2037 \text{ см}^{-1}$). Результаты сопоставляются с данными по ФЭС и значениями ПИ МО родственных молекул XN_3 ($X = Cl, Br, H, CH_3$).

В. М. Ковба

Х. 1988, 19, N 16

FN₃

Дм. 36685

1992

4 Д65. Квантовомеханические неэмпирические исследования структуры и стабильности азидов галогенов, XN_3 ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$). Quantum mechanical ab initio studies of the structures and stabilities of halogen azides XN_3 ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) / О'Хо М., Д. Лотц С., Френкинг Г. // Inorg. Chem. — 1992. — 31, № 17. — С. 3647—3655. — Англ.

Методом Хартри—Фока и с использованием теории возмущений в варианте Меллера—Плессета проведены расчеты геометрии, теплоты образования, энергий связи $\text{X}-\text{N}_3$ и колебательных частот молекул XN_3 ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) и HN_3 .

Li-1

(4)


ClN₃,BrN₃, IN₃, HN₃

ф. 1993, N 4

FN₃

OM 36685

1992

117: 97790c Quantum mechanical ab initio studies of the structures and stabilities of halogen azides XN₃ (X = F, Cl, Br, I). Otto, M.; Lotz, S. D.; Frenking, G. (Fachbereich Chem., Philipps-Univ., D-3550 Marburg, Germany). *Inorg. Chem.* 1992, 31(17), 3647-55 (Eng). The authors report theor. predicted geometries, heats of formation, X-N₃ bond energies, and vibrational spectra of the halogen azides XN₃ (X = F, Cl, Br, I), and HN₃ calcd. by quantum chem. methods at the Hartree-Fock and correlated levels using all-electron wave functions and effective-core potentials. The theor. data are used to predict the geometries of BrN₃ and IN₃, which have exptl. not been measured yet. A trans-bent (C_s) geometry is calcd. for the halogen azides with a nearly const. bond angle of ~172° for the N₃ unit. The XNN angle increases from +103° for FN₃ to ~111° for IN₃. A partial reassignment of the exptl. vibrational spectra of BrN₃ and IN₃ is suggested. The calcd. X-N₃ bond strengths indicate the order H >> F > Cl > Br > I; i.e., FN₃ is predicted to have the strongest X-N bond among the halogen azides. The opposite stability order F < Cl < Br < I is calcd. for the XN-N₂ bond of XN₃; i.e., the dissocn. of XN₃ into XN (Σ⁻) + N₂ is most exothermic for FN₃ but endothermic for IN₃. The theor. results for the heat of formation and the H-N₃ and HN-N₂ dissocn. energies

структур.
параметр.

Δ_fH,

моп. расч.

74

C. A. 1992, 117, N10

ClN₃, BrN₃, IN₃, HN₃

are in excellent agreement with exptl. results. The electronic structure of the halogen azides is analyzed with the help of the topol. anal. of the wave function. The X-N bond is essentially a single bond with a polarity $X^{\delta-}-N^{\delta+}$ for FN_3 and $X^{\delta+}-N^{\delta-}$ for CiN_3 , BrN_3 , and IN_3 . The covalent bond order index P_{AB} indicates that the N_1-N_2 bond in XN_3 is intermediate between a single and a double bond and that the N_2-N_3 bond has nearly a triple bond. The partial charge is always slightly neg. at N_2 and slightly pos. at N_3 .

FN₃

Dm 36685

1992

14 Б1024. Квантово-механические неэмпирические исследования структуры и стабильности галогеназидов, XN_3 ($X=F, Cl, Br, I$). Quantum mechanical ab initio studies of the structures and stabilities of galogen azides XN_3 ($X=F, Cl, Br, I$) /Otto M., Lotz S. D., Frenking G. //Inorg. Chem. — 1992. — 31, № 17. — С. 3647—3655. — Англ.

Методами Хартри—Фока и многочастичной теории возмущений Мёллера—Плессе как с учетом всех электронов, так и с эффективным потенциалом остова рассчитаны св-ва молекул XN_3 ($X=F, Cl, Br, I$). Базисы построены на основе валентно-расщепленных наборов. Определены равновесные геометрич. конфигурации молекул, частоты и интенсивности колебаний, относит. энергии. Особенности электронной структуры проанализированы с помощью лапласианов плотности. Найдено, что для молекул XN_3 характерны изогнутые геометрич. конфигурации транс-формы с почти постоянным углом $N-N-N$ 172° . Отмечены регулярности в энергиях связи $X-N$.

М.П.

A

(+3)

X. 1993, N 14

 ClN_3, BrN_3, IN_3

при изменении галогена. Связь $X-N$ м. б. охарактеризована как однократная, а $N(1) - N(2)$ занимает промежуточное положение между одно- и двукратной.

А. В. Немухин



1995

F: N3F

P: 3

1B139. О структуре и стабильности геометрических изомеров $N[3]F$. On the structure and stability of geometrical isomers of $N[3]F$ / Chaban Galina,

Yarkony David R., Gordon Mark S. // J. Chem. Phys. - 1995. - 103, N 18. - С. 7983-7989. - Англ.

Неэмпирическим методом ССП с учетом электронной корреляции в рамках МП2, МК ССП и обобщенного метода валентных связей в базисе 6-31ГФ(d) исследовано электронное строение $N[3]F$. Для синглетного и триплетного состояний найдено по одному новому изомеру симметрии $C[s]$ с трехчленным циклом из атомов азота, кинетически стабильных по отношению к ациклич. изомерам.

Рыж 1994

N_3F

1995

123: 322479d On the structure and stability of geometrical isomers of N_3F . Chaban, Galina; Yarkony, David R.; Gordon, Mark S. (Department Chemistry, Iowa State University, Ames, IA 50011 USA). *J. Chem. Phys.* 1995, 103(18), 7983-9 (Eng). The potential energy surfaces for the N_3F mol. have been studied using multiconfigurational wave functions. Two new isomers were found, one on the singlet ($^1A'$) and one on the triplet ($^3A''$) surface. Both isomers have a three-numbered cyclic structure and C_s symmetry. The singlet cyclic isomer is endoergic relative to the open fluorine azide by 15-17 kcal/mol. Its kinetic stability is close to the stability of the open isomer: the barrier sepg. the cyclic isomer from the dissocn. products $N_2(X\ ^1\Sigma_g^+) + NF(a^1\Delta)$ is about 13-17 kcal/mol and is lower than the barrier to isomerization. The triplet cyclic isomer is much higher in energy (about 70 kcal/mol), with a barrier to dissocn. to $N_2(X\ ^1\Sigma_g^+) + NF(X\ ^3\Sigma^-)$ on the order of 15 kcal/mol. Crossings of the $^1A'$ and the $^3A''$ surfaces may allow the cyclic singlet isomer to predissociate to the ground state products, $N_2(X\ ^1\Sigma_g^+) + NF(X\ ^3\Sigma^-)$. It is shown, however, that the singlet-triplet surface of intersection lies 'behind' the barrier to singlet decompn., so that spin-forbidden predissocn. will not preclude detection of cyclic N_3F .

структура,
стабильн.,
мюрет-рае
ум.

C.A. 1995, 123, N 24

FN3

1995

UK, CKP,
ab initio
practm.
M.A.

123(74)

C.A. 1995, 123, 148

123: 96320m Experimental and Theoretical Vibrational Studies of Covalent X-N₃ Azides (X = H, F, Cl, Br, I). Application of the Density Functional Theory and Comparison with ab Initio Results. Schulz, Axel; Tornieporth-Oetting, Inis C.; Klapoetke, Thomas M. (Institut fuer Anorganische und Analytische Chemie, Technischen Universitaet Berlin, D-10623 Berlin, Germany). *Inorg. Chem.* 1995, 34(17), 4343-6 (Eng). The IR spectra of gaseous Cl azide, Br azide and I azide as well as the Raman spectrum of liq. Cl azide were recorded. The geometries and vibrational spectra of all halogen azides XN₃ (X = F, Cl, Br, I) and HN₃ were computed employing d. functional theory calcns. (DFT) at the self-consistent level with the nonlocal exchange functional of Becke (B) and the nonlocal correlation functional of Lee-Yang-Parr (B-LYP). The results were compared with those previously reported by Frenking et al. (*Inorg. Chem.* 1992, 31, 3647-3655) using quantum chem. ab initio methods at the Hartree-Fock and correlated levels. The results of DFT calcns. and exptl. obtained vibrational spectra indicate that the $\nu(X-N_3)$ stretching modes (X = Cl, Br, I) had previously been assigned incorrectly. The general agreement between the computed geometries at correlated levels (ab initio, MP2; DFT, B-LYP) and the obsd. structures is very good. Whereas the ab initio calcns. predict too high frequencies due to the neglect of electron correlation and of anharmonicity and require scaling, the DFT computations at the correlated level (B-LYP) predict for all covalent azides considered the vibrational modes remarkably well and no scaling was required.

1995

F: FN3

P: 3

5B1215. Экспериментальное и теоретическое исследование колебательных спектров ковалентных азидов X-N[3] (X=H, F, Cl, Br, I). Расчеты методом функционала плотности в сопоставлении с другими неэмпирическими приближениями. Experimental and theoretical vibrational studies of covalent X-N[3] azides (X=H, F, Cl, Br, I). Application of the density functional theory and comparison with ab initio results / Schulz Axel, Tornieporth-Oetting Inis C., Klapotke Thomas M. // Inorg. Chem. - 1995. - 34, N 17. - С. 4343-4346. .

Англ.

Получены ИК- и КР-спектры XN[3] (X=F, Cl, Br, I) в газ. фазе. Интерпретация спектров этих соединений и HN[3] уточнена с помощью расчетов частот и форм колебаний методами функционала плотности и других неэмпирич. приближений. Отмечено, что на коррелированном уровне теории функционала плотности с функционалом B-LYP частоты передаются вполне удовлетворительно без обычного масштабирования.

Р. 4. Х. N5, 1996

FN₃

[Om. 41762]

2003

Che Huijuan et al.,

2

Chemphyschem. 2003, 4, N3,
300 —