

NF₂H

NHF₂, NDF₂³ (v: ^{мол.} ^{инерция}, Cp, G°, S°, 1963
H_T⁰-H₅⁰)

Arumugam K., Radhakrishnan M.,

Z. Physik. Chem. (Frankfurt), 1963,
39 (3/4), 262-4.

Thermodynamic properties of difluoro
amine.

to +3 (φ) CA, 1964, 60, 56, 6273h

NF₂H

B92-5091-III

1963

2340

III

B92-III

Infrared spectrum of difluoroamine. J. J. Comeford, D. E. Mann, L. J. Schoen, and David R. Lide, Jr. (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 38, 461-3(1963). The infrared spectrum of gaseous NF₂H was investigated, 250-4000 cm.⁻¹ Four bands of NF₂D were also observed. The fundamental frequencies (in cm.⁻¹) and their species are: NF₂H: $\nu_1(a')$:3193; $\nu_2(a')$:1307; $\nu_3(a')$:972; $\nu_4(a')$:500; $\nu_5(a'')$:1424; $\nu_6(a'')$:888. NF₂D: $\nu_1(a')$: [2333]; $\nu_2(a')$:1008; $\nu_3(a')$:972; $\nu_4(a')$: [500]; $\nu_5(a'')$:1042; $\nu_6(a'')$:888. The bracketed values were not observed directly. The fine structure resolved in several of the bands led to a value for $A - [(B + C)/2]$ in agreement with the microwave result. No inversion splitting was detected.

CA

C.A. 1963.58.8

7521d

NF_2H

И. К. Смирнов

ВВ-III-2340

16 Б144. Инфракрасный спектр дифторамина. Comeford J. J., Mann D. E., Schoen L. J., Lide David R., Jr. Infrared spectrum of difluoramine. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 2, 461—463 (англ.)

Исследовался ИК-спектр поглощения газообразного NF_2H (I) в области $250\text{--}4000\text{ см}^{-1}$. Кроме того, наблюдалось 4 ИК-полосы поглощения NF_2D (II). Для I: $\nu_1(a')$ 3193, $\nu_2(a')$ 1307, $\nu_3(a')$ 972, $\nu_4(a')$ 500, $\nu_5(a'')$ 1424, $\nu_6(a'')$ 888 см^{-1} . Для II: $\nu_1(a')$ 2333, $\nu_2(a')$ 1008, $\nu_3(a')$ 972, $\nu_4(a')$ [500], $\nu_5(a'')$ 1042 и $\nu_6(a'')$ 888 см^{-1} . (Квадратные скобки относятся к непосредственно не наблюдавшимся частотам II). Контуры интенсивных полос принадлежат типу А или В. Для спектра I характерна аномально низкая интенсивность и сдвиг в область меньших частот полосы 3193 см^{-1} , соответствующей вал. кол. NH. Из анализа тонкой вращательной структуры, наблюдавшейся для ряда полос, определена величина $A-1/2 (B+C) \approx 1,439\text{ см}^{-1}$, хорошо согласующаяся с величиной, определенной из микроволновых данных.

Резюме авторов

1963
III-1605-III
B92-5091-III

X. 1964. 16

NF₂H

ВФ - 5091-III

1963

ИК спектр

ВФ-III-2340

10 Д174. ИК-спектр дифторамина. Cornford J. J., Mann D. E., Schoen L. J., Lide David R., Jr. Infrared spectrum of difluoramine. «J. Chem. Phys.» 1963, 38, № 2, 461—463 (англ.)

Получены ИК-спектры газообразного NF₂H в области 250—4000 см⁻¹ и спектры четырех полос NF₂D. Приведены фундаментальные частоты и их отождествление. Из анализа тонкой структуры некоторых полос определено значение $A - \frac{1}{2}(B+C)$, согласующееся с результатами измерений в микроволн. области. Инверсионное расщепление не обнаружено.

ф. 1963. 108

HNF_2

Herzh Ora 4.

1965

структура

Dissert. Abstrs, 24, v6, 2286.

|||

Дифракция электронов в га-
зах и структура молекул
 PF_3 , PF_5 , HNF_2 и N_2F_4 .

(см. PF_3)

III

ф. 1965.10

1983

374

24 Б219. Микроволновый спектр и структура дифторамина. Lide David R., Jr. Microwave spectrum and structure of difluoramine. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 2, 456—460 (англ.)

Исследован микроволновый спектр NF_2H и NF_2D . Величины вращательных констант равны 53017,12, 10895,43, 9307,22 Мгц для NF_2H и 44884,92, 10749,38, 9126,26 Мгц для NF_2D . По этим данным определена структура молекул: $r_{\text{NF}} = 1,400 \pm 0,002 \text{ \AA}$, $r_{\text{N}} = 1,026 \pm 0,002 \text{ \AA}$, $\angle \text{FNF} = 102,9^\circ \pm 0,2^\circ$ и $\angle \text{HNF} = 99,8^\circ \pm 0,2^\circ$. Дипольный момент имеет величину $1,93 \pm 0,02 \text{ D}$ и образует угол 49° с направлением связи NH. Верхний предел инверсного расщепления в основном состоянии равен 0,2 Мгц. Определен полный тензор градиента поля.

Резюме автора

Всп. - 5092 - 10

X.1963.24

2342

WF₂H
WF₂D
м.б.

NF₂H
NF₂D
мкр спектр

и.п.,
структура

10 Д221. Микроволновый спектр и структура дифторамина. Lide David R., Jr. Microwave spectrum and structure of difluoramine. «J. Chem. Phys.», 1963, 38, № 2, 456—460 (англ.)

Исследованы и проанализированы микроволн. спектры NF₂H и NF₂D в области 15 000—36 000 Мгц. Определены вращательные константы для обеих молекул. Вычислены межъядерные расстояния, равные: $r_{N-F} = 1,400 \pm 0,002$ Å, $r_{N-H} = 1,026 \pm 0,002$ Å и углы между валентными связями: $\angle FNF = 102,9^\circ \pm 0,2^\circ$, $\angle HNF = 99,8^\circ \pm 0,2^\circ$. Определены постоянные квадрупольной связи для обоих изотопич. образцов и получен полный тензор градиента поля. Вычислен дипольный момент молекулы, равный $1,93 \pm 0,02$ ед. Дебая, который составляет со связью NH угол 19° . Верхний предел инверсионного расщепления в основном состоянии оценивается в 0,2 Мгц. Библ. 19 назв. Г. Неуймин

1963
374
234
III

Бсф-5892-III

ф. 1963. 10А

NF₂H

11 2372

Ommuck 374 1963

Microwave spectrum and structure of difluoroamine. David R. Lide, Jr. (Natl. Bur. of Stds., Washington, D.C.). *J. Chem. Phys.* 38, 456-60(1963). The microwave spectra of NF₂H and NF₂D were analyzed. Rotational consts. are 53,017.12, 10,895.43, 9307.22 Mc. for NF₂H and 44,884.92, 10,749.38, 9126.26 Mc. for NF₂D. The structure obtained from these consts. is: $r_{NF} = 1.400 \pm 0.002$ A., $r_{NH} = 1.026 \pm 0.002$ A., $\angle FNF = 102.9 \pm 0.2^\circ$, and $\angle HNF = 99.8 \pm 0.2^\circ$. Quadrupole coupling consts. were measured for both isotopic species and the complete field-gradient tensor was detd. The dipole moment has a magnitude of 1.93 ± 0.02 D. and makes an angle of 19° with the NH bond. An upper limit of 0.2 Mc. is set on the inversion splitting in the ground state.

CA

Bcp - 5092 - III

C.A. 1963. 58.5

4061 de

NH_2

Силы
и т.д.

(г-г)

2 ч.г

У 17 Б103. Потенциальные постоянные. Термодинамические функции дифторамина. Nagarajan G. Potential constants & thermodynamic functions of difluoramine. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1963, 1, № 11, 403—404 (англ.)

Методом Вильсона (Wilson (Jr) D. R., «J. Chem. Phys.», 1939, 7, 1047; 1941, 9, 76) рассчитаны силовые постоянные дифторамина (I). На основе моделей жесткого ротатора и гармонич. осциллятора рассчитаны также мол. термодинамич. функции (теплосодержание, теплоемкость, свободная энергия и энтропия) I и дейтеродифторамина для интервала т-р 200—2000° К. Табулированы полученные результаты. Библ. 9 назв. М. Митцез

1963

У 17 Б103-III

⊗

а. 1964. 17

V_i, common $\sqrt{(\text{NH}_2\text{D}, \text{NF}_2\text{D}_2,$
not $\text{NF}_2\text{H}, \text{NF}_2\text{D})}$ XIII 1695

Current Sci. (India), 1965, 34, 15, 144-16
(1965)

Mean amplitudes of vibration...
pyramidal XYZ type molecules.

P. Kuo, 1967, 55222

10

8

NF₂H

III - 403ef

1965

Chem. 405.

Anharmonicity corrections and potential constants of difluoramine. M. G. K. Pillai and S. G. Gnanadesikan (Annamalai Univ., Annamalai Nagar, India). *Z. Physik. Chem.* (Leipzig) 228(3/4), 157-8(1965)(Eng). The anharmonicity consts. were calcd. and the observed frequencies corrected for anharmonicity as suggested by Dennison (CA 34, 6524⁸). The consts. for NF₂H and NF₂D are, resp.; ν_1 , 0.0188 and 0.0137; ν_5 , 0.0159 and 0.0116. Potential consts. for NF₂H and NF₂D (10⁵ dynes/cm.) are given. Victor R. Deitz

605-III-403ef

C.A. 1965-63-3

24018

III - 4034

1968

 NF_2H

12 Д147. Поправки на ангармоничность и силовые постоянные дифторамина. Pillai M. G. K., Gnana-desikan S. G. Anharmonicity corrections and potential constants of difluoramine. «Z. phys. Chem.» (DDR)», 1965, 228, № 3-4, 157—158 (англ.)

На основе ранее наблюдаемых частот и геометрич. параметров NF_2H и его дейтерированного аналога NF_2D найдены ангармонич. поправки по методу Денгисона. Наблюдаемые частоты поправлены на ангармоничность. Из этих частот с использованием метода Вильсона найдены силовые постоянные. Вычисленные из них частоты хорошо согласуются с гармоническими. Приведены таблицы наблюдаемых, исправленных (гармонических) и вычисленных частот вместе с поправками на ангармоничность. Е. И. Креденцер

09. 1968. 129

605 - 11K-681
1399-1111-500

M 1680

1965

FNF_2 , HNF_2 , CH_3NF_2 , CF_3NF_2 , ClNF_2 ,
 NF_2NF_2 (V. I. Zhuravskii)

Ward G.A., Craig A.D., Wright C.M.,
Chien J.C.W.

Am. Chem. Soc., Div. Fuel. Chem. Preprints,
1965, 9(1), 172-82

The chemistry of difluoramines

F

J, Be

CA., 1966, 65, N12,
18147f

NF₂ H

2 Д98. Расчет колебательного спектра дифторамина и хлордифторамина. Москвитина Е. Н., Кузьяков Ю. А. «Вестн. Моск. ун-та. Химия», 1966, № 3, 35—39

Методом Ельяшевича и Степанова на электронно-счетной машине «Стрела» проведен расчет силового поля дифторамина и хлордифторамина. Молекулы дифторамина и хлордифторамина имеют плоскость симметрии, проходящую по связям N—H и N—Cl, и относятся к точечной группе симметрии C_s. Результаты расчета показывают, что колебания NF₂H и NF₂Cl, соответствующие т. наз. симметричным и антисимметричным валентным колебаниям N—F, не являются вполне характеристичными по форме для связей N—F, т. к. в них принимают большое участие другие связи и углы, но колебания всей группы NF₂ весьма характеристичны для обоих исследованных соединений.

1966

661-6681-III

ф. 1967. 28



NHF_2

сшивки
поет.

Гос. науч.
Энергии

ВФ - 32а - V

1966

12 Д116. Силовое поле дифторамина. Sundag
am S., Sarma Y. Anantarama, Piotrow-
ski E. A. A force field for difluoramine. «Molec. Phys.»,
1966, 10, № 5, 465—468 (англ.)

Из данных ИК-спектров газообразного дифторамина (NHF_2) и его дейтерозамещенного (NDF_2) получен набор постоянных потенц. энергии. Результаты обсуждаются и сравниваются с соответствующими данными для молекул NH_3 и NF_3 . Постоянные связей N—H и N—F оказались соответственно равными 5,6474 и 4,0681 мдн $\text{\AA}^{-1}$. Эти значения несколько меньше, чем для NH_3 и NF_3 , и согласуются, по мнению авторов, с несколько большими длинами связей N—H и N—F в дифтораминах.
И. Яковлев

ХШ - 1834

ф. 1966. 128

NHF₂

NDF₂

unoboe
none

Bp-32a-V

1966

A force field for difluoramine. S. Sundaram, V. Anantarama
Sarma, and E. A. Piotrowski (Univ. of Illinois, Chicago). *Mol.*
Phys. 10(5), 465-8(1966)(Eng). From the ir spectral data for
gaseous NHF₂ and NDF₂, sets of quadratic valence potential
energy consts. were obtained. The consts. for the N-H and
N-F stretchings were, resp., 5.6474 and 4.0681 millidynes/A.
E. Grunhut

C.A. 1966.65.6

8196d

XIII-1834

HNF_2

ν_i

(спектр в
матрице)

Yasok M.E.,
Milligan D.E.

J. Chem. Phys.,
46, N1, 184

1967

177

Образование и р-ция ато-
много димера в твердом
теле. Колебательный и
флексионный спектры
свободного радикала HNF .

(см. HNF) III

NHF₂

XIII 1836-BP

1967

NDF₂

ii. 17.

85126b Centrifugal distortion constants for difluoramine. S. Sundaram (Univ. of Illinois, Chicago). *Proc. Phys. Soc.* 92(1), 261-3(1967)(Eng). The inertia tensor derivs. for a center-of-mass principal axes system was obtained for an XYZ₂ type mol. of symmetry C_s. From the force field for difluoramine, the centrifugal distortion consts. D_J , D_{JK} , D_K , R_5 , R_6 , and δ_J were calculated for NHF₂ and NDF₂ using a 1st-order perturbation theory. Except for R_6 , the other consts. have values comparable with D_{JK} , and thus a correction to the rigid-rotor energy levels should include all these terms. RCPN

C. A. 1967. 67. 18

NHF₂

XIII - 1836 - ВР

1967

/ 10 Б244. Постоянные центробежного растяжения дифторамина. Sundaram S. Centrifugal distortion constants for difluoramine. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 92, № 1, 261—263 (англ.)

Методом Кивельсона и Вильсона выведены явные выражения элементов матрицы первых производных компонентов тензора инерции по координатам симметрии молекул типа XYZ₂ (симметрия C_s) через массы атомов и геометрич. параметры молекулы. Вычислены постоянные центробежного растяжения D_J, D_{JK}, D_K, R₅, R₆ и S_J молекул NHF₂ и ~~NDF₂~~. При расчете использованы силовые коэф., найденные автором ранее. Вычисленные значения D_{JK} — 0,6595 (NHF₂) и — 0,4625 Мгц (NDF₂)

X-1968-10

159

сопоставлены со значениями $D_{JK} = -0,16$ и $-0,095$ Мгц, использованными при анализе вращательных спектров. Значения центробежных постоянных этих молекул, за исключением R_6 , имеют одинаковый порядок величины, поэтому при анализе спектров следует учесть все центробежные поправки в выражении вращательной энергии.

М. Р. Алиев

NMF
2

XIII - 1836 - B9

1967

4 Д118. Постоянные центробежного растяжения для дифторамина. Sundaram S. Centrifugal distortion constants for difluoramine. «Proc. Phys. Soc.», 1967, 92, № 1, 261—263 (англ.)

Получены производные тензора инерции в системе главных осей относительно центра масс для молекул типа XYZ_2 симметрии C_s . На основе силового поля дифторамина вычислены постоянные центробежного растяжения D_j , D_{jk} , D_k , R_5 , R_6 и δ_j для молекул NHF_2 и NDF_2 . При расчете использован первый порядок теории возмущения. Ранее была сделана попытка объяснить микроволн. спектр дифторамина на основе модели жесткого ротатора. К вращательной энергии был добавлен попра-

09.1968.4

IX

вочный член вида $D_{jh}K_{-1}^2J(J+1)$. Такая поправка оказалась удовлетворительной для $\Delta J=0$, а для переходов с $\Delta J=1$ и $J>5$ наблюдалось некоторое расхождение между наблюдаемыми и рассчитанными частотами. Настоящий расчет показал, что, за исключением R_6 , найденные постоянные центробежного растяжения сравнимы с величиной D_{jh} . Следовательно, поправка к уровням энергии жесткого ротатора в данном случае должна включать все шесть членов, в которые входят постоянные центробежного растяжения. И. П. Яковлев

NF_2H

Gordon M.S.
et al

1968

реферт
публик.
во втр.

J. Chem. Phys.
1968, 49, N 10, 4643-50.

(C₆H₆, III)

HNF₂

(44)

XIII - 1446

1968

52641z The ir spectroscopic study of fluorimide and some of its complexes. Yakutin, V. I.; Dubov, S. S.; Fokin, A. V. Kosyrev, Yu. M.; Novoselov, N. P. (USSR). *Zh. Obshch. Khim.* 1968, 38(10), 2174-7 (Russ). The valence and bending frequencies of the NH bond and the valence frequencies of the NF bond of HNF₂ were measured in liq. mixts. with (CD₃)₂SO, CD₃OH, (CD₃)₂CO, (CF₃)₂CO, Xe. The shifts of the frequencies with respect to the gaseous state show that HNF₂ forms H bonds with strengths in the order (CD₃)₂SO > (CD₃)₂CO ~ CD₃OH >> (CF₃)₂CO ~ HNF₂. There is no ionization of HNF₂ in these complexes and both N and F atoms take part in the formation of intermol. H bonds in solid HNF₂.

D. Papousek

C.A. 1969. 70. 12

cur. noct (NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3 ; ND_3 , 1969
 PD_3 , AsD_3 , SbD_3 , NHF_2 , NDF_2 , 13

NF_3 , PF_3 , AsF_3 , SbF_3 ; NCl_3 , PCl_3 , $AsCl_3$, $SbCl_3$,
 NBr_3 , PBr_3 , $AsBr_3$, $SbBr_3$, NI_3 ; PI_3 , AsI_3 , SbI_3)

King-Shin-Tung, Overend J. XIII 330

J. Phys. Chem., 1969, 73, 12, 406-412 (unpubl.)

The importance of lone-pair electrons
in the intramolecular potential func-
tion of group V hydrides and trihalides.

Pu Xun. 1969, 24555- W 10

HNF₂

Woodman C.M.

1970

un.
photons

J. Mol. Spectrosc., 1970,
33, ~ 2, 311.



(C₆H₆ HNF) II

2i (NF_3 , NF_2Cl , NF_2H , NF_2D , 856
 N_2F_4 , CH_3NF_2) 13 14 XIII ~~1567~~

Лосквичева В.Н., Кузяков Ю.И.,
Вад., Колбагушев. спектры в мюрган.
химии", М, Наука, 1971, 101-115
Спектроскопические данные гетеродов,
азота.

Вихли, 1971, 35197

4 Ю (Ф)

1974

ННТ₂

Всѣет по научно-исслед.
работе ИВТАИ отделе №8

М.п.

„Периодиками и числами св. в а
аорта, водорода и их соедине
ний“.

HNF₂

1974

Умныдв.
Срото.мз

148293u Decomposition of fluorimide studied by flash photolysis. Zamanskii, V. M.; Moskvitina, E. N.; Kuzyakov, Yu. Ya. (USSR). *Vestn. Mosk. Univ., Khim.* 1974, 15(5), 544-6 (Russ). Besides the fundamental photochemical reaction $\text{HNF}_2 + h\nu \rightarrow \text{HNF} + \text{F}$, the following are reported: a 2nd photochemical reaction $\text{HNF} + h\nu \rightarrow \text{NH} + \text{F}$ followed by $\text{F} + \text{HNF}_2 \rightarrow \text{HF} + \text{NF}_2$; 2 thermal processes $\text{HNF}_2 \rightarrow \text{NF} + \text{HF}$ and $\text{NF} + \text{NF} \rightarrow \text{N}_2 + 2\text{F}$. In the presence of H the following processes are possible: $\text{F} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HF} + \text{H}$ and $\text{H} + \text{HNF}_2 \rightarrow \text{HNF} + \text{HF}$.

A. Plonka

C.A.1475.82 N22

F_2NH

$(CH_3)_2NH$

кв. атома
расчет структ.

X 1976 N 21

У 8-13548

1976

21 Б65. Неэмпирические расчеты структуры и инверсии дифторамина и диметиламина. Skaarup Steen, Griffin Lawrence L., Boggs James E. Ab initio calculation of structure and inversion of difluoramine and dimethylamine. «J. Amer. Chem. Soc.», 1976, 98, № 11, 3140—3143 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в базисе безузловых гауссовских функций (ГФ) проведены неэмпирич. расчеты равновесной геометрии и барьеров инверсии F_2NH (I) и $(CH_3)_2NH$ (II): Для C, N и F использован (7, 3) базис, сгруппированный в (5, 3) как (3, 1, 1, 1, 1; 3). Для исследования влияния внешних d-АО в расчет I были включены d-АО атома N. 1s-АО атомов H аппроксимировались тремя несгруппированными ГФ s-типа.

ЧМС

(+1)

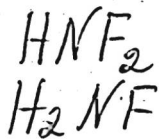
X

Канонич. МО были преобразованы по методу Бойса в локализованные МО (ЛМО), соотв-щие хим. связям, внутренним оболочкам и неподеленным парам. Для исследованных молекул получены следующие оптимизированные геометрич. параметры: I — *sp* (*spd*) базис — $r_{NH} = 1,011$ (1,007) Å, $r_{NF} = 1,428$ (1,389) Å, $\angle FNF = 102,8(103,0)^\circ$, $\angle HNF = 101,4(100,6)^\circ$; II (*sp*-базис) — $r_{NH_1} = 0,999$ Å, $r_{NC} = 1,461$ Å, $r_{CH} = 1,083$ Å, $\angle H_1NC = 112,3^\circ$, $\angle CHC = 115,1^\circ$, главная структурная особенность II — асимметричность CH_3 -групп также достаточно удовлетворительно воспроизводится расчетом. В частности, из расчетов следует, что наиболее удлиненной связью CH_3 -группы должна быть CH связь, направленная в противоположную сторону относительно ЛМО неподеленной пары вследствие дефицита электронной плотности по этому направлению. Расчетные величины барьеров инверсии составляют в *sp*-базисе (*spd*-базисе) 34,4(41,7) ккал/моль для I и 2,6 ккал/моль (опыт. 4,4) для II.

И. Абронин

оттиск 5461

1977



12 Д146. Неэмпирический хартри-фоковский расчет силовых постоянных и геометрии молекул HNF_2 и H_2NF . Fogarasi Geza, Pulay Peter, Molt Karl, Sawodny Wolfgang. Ab initio Hartree-Fock calculation of the force constants and geometry of HNF_2 and H_2NF . «Mol. Phys.», 1977, 33, № 6, 1565—1570 (англ.)

кв. мех.
расчет

м. н. с. н. н.

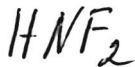
Δ_i Δ_i

(+1) $\boxtimes$

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе гауссовых ф-ций вычислены структурные параметры, дипольные моменты, гармонич. силовые постоянные и частоты колебаний молекул HNF_2 , H_2NF и их дейтерозамещенных. Значения силовых постоянных, полученные прямым расчетом описывают колебательный спектр HNF_2 недостаточно удовлетворительно, однако, небольшая вариация диагональных силовых постоянных исключает расхождение с экспериментом. Аналогичным образом изменены силовые постоянные и частоты молекулы H_2NF , которая еще не синтезирована.

М. Р. Алиев

Р. 1977, № 12



оттиски 5461

1974



ссыл. постр.
геометр.

(+1) ☒

21. 1974

N 24

24 Б43. Неэмпирический расчет в рамках метода Хартри-Фока силовых постоянных и геометрии HNF_2 и H_2NF . Fogarasi Geza, Pulay Peter, Mott Kart, Sawodny Wolfgang. Ab initio Hartree-Fock calculation of the force constants and geometry of HNF_2 and H_2NF . «Mol. Phys.», 1977, 33, № 6, 1565-1570 (англ.)

Неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО в базисе лепестковых (группированных гауссовских ф-ций с добавлением ф-ций на связях) проведены расчеты силовых постоянных H_2NF (I) и HNF_2 (II). Авторы полагают, что силовое поле II, полученное комбинацией теор. результатов с эксперим. частотами, можно считать наиболее надежным. Дан крит. анализ пред. расчетов. Полная оптимизация геометрии I приводит к след. результатам: NF 1,399, NH 1,018 Å, углы HNF 102,9, NHN 105,9°.

По резюме

NH_2

[* 48-18930]

1944

Schmiedeknecht A. et al.

(review.)
(u. n.) "J. Chem. Phys." 1944, 66,
N12, 5469-5476 (anal.)

● (coll. NH_3 ; III)

NF₂H

ORIGIN 5792

1974

Madaya
Dr

Shimanouchi T.

J. Phys. Chem. and Ref. Data,
1977, 6, 903-1102.

NF₂H

ommuu 6146

1978

88: 143846h Centrifugal distortion analysis of difluoramine. Kaushik, Vijay Kumar; Venkateswarlu, Putcha (Dep. Phys., Indian Inst. Technol., Kanpur, India). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 70(1), 1-8 (Eng). The microwave rotational spectrum of NF₂H was analyzed in the frequency region 15-36 GHz involving rotational levels up to $J = 19$. The anal. gives refined rotational consts. and all quartic centrifugal distortion consts. These consts. were used to predict addnl. Q-branch transitions of the mol. in the frequency region 5-95 GHz.

49220

M.N. 1

XIII

C.A., 1978, 88, N20

NF₂H

випуск 6146

1978

10 Д390. Анализ центробежного возмущения дифторамина. Kaushik Vijay Kumar, Venkateswarlu Putcha. Centrifugal distortion analysis of difluoramine. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 1, 1—8 (англ.)

Проведен анализ микроволн. вращательного спектра молекулы NF₂H в диапазоне частот 19—36 Гц, включающего переходы на вращательные уровни до $J=19$. Используя теорию центробежного возмущения для вращательных спектров молекул типа асимметричного волчка, получены уточненные вращательные постоянные и все постоянные центробежного возмущения четвертого порядка. Соответствие между наблюдаемыми и вычисленными величинами $\pm 0,06$ Мгц. Полученные вращательные постоянные и постоянные центробежного возмущения использовались для вычисления дополнительных переходов Q-ветви спектра молекулы NF₂H (всего 22 перехода) в диапазоне 5—95 Гц. Библ. 27.

В. В. Строгонов

XIII-4230

М. П.

Ф. 1978, № 10

17211

07. 6146

1072

19 B285. Анализ центробежного искажения дифторамина. Kaushik Vijay Kumar, Venkateswarlu Putcha. Centrifugal distortion analysis of difluoramine. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 70, № 1, 1—8 (англ.)

Данные Лайда (см. D. R. Lide, Jr., «J. Chem. Phys.», 1963, 38, 456) о МВ-спектре дифторамина, NF_2H (I), в области частот от 15 до 36 ГГц для вращательных переходов со значениями J вплоть до 19 проанализированы заново с учетом эффекта центробежного искажения. При анализе спектра I в приближении нежесткого почти вытянутого асимм. волчка использованы модельные представления Уотсона и Кирхгоффа. Вращательные постоянные и τ -постоянные в представлении Уотсона равны (в МГц) $A=53019,876$ (45), $B=10895,809$ (9), $C=9307,5468$ (79), $\tau_1=0,08409$ (401), $\tau_2=0,01749$ (66), $\tau_3=2,183$ (19), $\tau'_{aaaa}=-3,64289$ (885), $\tau'_{bbbb}=-0,078816$ (401), $\tau'_{cccc}=-0,03351$ (25). С полученными значениями молек. постоянных достигнуто согласие расчетных частот линий с эксперим. данными в пределах $\pm 0,06$ МГц. Построена корреляц. матрица вращательных и τ -постоянных. Рассмотрены альтернатив-

4230
XIII

4117

2.1948, N19

ные способы определения постоянных. Полученные данные использованы для предсказания частот 22-переходов I в области от 5 до 95 ГГц.

С. Н. Мурзин



HNF_2

От 36511

1980

19 Б135. Фотоэлектронный спектр дифторамина.
Colbourne D., Frost D. C., McDowell C. A.,
Westwood N. P. C. The vacuum ultraviolet photo-
electron spectrum of difluoramine. «Chem. Phys. Lett.»,
1980, 72, № 2, 247—251 (англ.)

фотоэлектронный
спектр.

С использованием источника возбуждения He-I изме-
рены фотоэлектронные спектры (ФЭС) дифторамина
(HNF_2) и дейтерированного дифторамина (DNF_2).
В области энергий связи от 10 до 21 эВ обнаружено
7 пиков ФЭС. Интерпретация ФЭС проведена на ос-
новании расчета спектра МО HNF_2 полуэмпирич. ме-
тодом BAW/3. В расчете в области энергий эксперим.
ФЭС также найдено 7 МО. Первый пик в ФЭС HNF_2
и DNF_2 имеет ярко выраженную колебательную струк-
туру, на основании анализа к-рой сделан вывод о
плоской геометрии иона HNF_2 . Методом ССП МО
ЛКАО с использованием базиса гауссовых орбиталей

X. 1980 N 19

ОСТ-3 ГО проведена оптимизация геометрич. параметров молекулы HNF_2 и иона HNF_2^+ . Для основного состояния HNF_2 вычисленный барьер инверсии составил 1,38 эВ. Расчеты методом ССП МО ЛКАО показали, что геометрия HNF_2^+ в основном состоянии иона является плоской с параметрами $R(\text{N}-\text{F})=1,31 \text{ \AA}$, $R(\text{N}-\text{H})=1,15 \text{ \AA}$, $\text{FNF } 116,7^\circ$. На основании известных ФЭС молекул CH_2F_2 , HNF_2 , и OF_2 и данных теор. расчетов электронного строения этих молекул построены корреляц. диаграмма потенциалов ионизации в CH_2F_2 , HNF_2 и OF_2 . И. А. Тополь

HNF_2

DM 36511

1980

12 Д329. УФ-фотоэлектронный спектр дифторамина.
The vacuum ultraviolet photoelectron spectrum of difluoramine. Colbourne D., Frost D. C., McDowell C. A., Westwood N. P. C. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 2, 247—251 (англ.)

Получен HeI-фотоэлектронный спектр дифторамина HNF_2 (I). Вертикальные потенциалы ионизации (ПИ) I равны (в эВ): 12,38; 15,4; 15,54; 15,98; 18,01; 19,0; 19,77. В первой фотоэлектронной полосе обнаружена колебательная структура с частотой $580 \pm 30 \text{ см}^{-1}$. Спектр I интерпретирован при помощи полуэмпирич. расчетов (в приближении НАМ-3), сравнения с фотоэлектронными спектрами изоэлектронных молекул. Установлено, что первый ПИ I соответствует удалению электронов из $\text{MO}8a'$, локализованной в основном на атоме N. Более высокие ПИ I отвечают более глубоким МО, локализованным на атомах фтора. На основе анализа полученных данных показано, что I в основном состоянии иона имеет плоскую форму. Библ. 34.
Ю. В. Чижов

фотоэлектронный
спектр

Ф. 1980. № 12

NHF₂

~~DNF₂~~

DNF₂

DM. 36511

1980

93: S4556s The vacuum ultraviolet photoelectron spectrum of difluoramine. Colbourne, D.; Frost, D. C.; McDowell, C. A.; Westwood, N. P. C. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 72(2), 247-51 (Eng). The He I photoelectron spectrum of HNF₂ is reported. The 7 ionization potentials within the He I region were assigned. Extensive vibrational structure on the 1st band of both NHF₂ and DNF₂, and ab initio calcs. of the ionic geometry, indicate that the ground ionic state is planar.

группа
ионизации,
связанная

CA 1980 93 n8

HNF_2

XIV - 98'98

1980

11 Д97. Расчеты вертикальных потенциалов ионизации дифторамина с помощью вычисления поправок теории возмущений к теореме Купманса. Calculation of vertical ionization potentials of difluoramine by perturbation corrections to Koopmans theorem. Minato Tsutomu, Chong Delano P. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 2, 252—255 (англ.)

Для равновесной геометрии основного электронного состояния молекулы дифторамина (HNF_2) методом ССП в базисе 4—31 ГФ проведен расчет электронной структуры. Полученные МО использованы для вычисления вертикальных потенциалов ионизации HNF_2 в первом (теорема Купманса), втором и третьем порядках теории возмущений Релея—Шредингера, а также в геометрич. приближении. Проведенные расчеты показывают присутствие трех перекрывающихся полос в области спектра 15—16 эв, что согласуется с данными по фотоэлектронным спектрам дифторамина. Отмечено, что в приближении теоремы Купманса предсказать наличие этих трех полос не удастся. Рассчитанный фотоэлектронный спектр HNF_2 сравнивается со спектрами изоэлектронных молекул OF_2 и CH_2F_2 . А. Дементьев

равновесн.
геометрия
фотоэл.
спектр.
(3)

ф. 1980 и 11

XIII - 5626

HNF_2

XIV - 9898

1980

93: S4557t Calculation of vertical ionization potentials of difluoramine by perturbation corrections to Koopmans' theorem. Minato, Tsutomu; Chong, Delano P. (Dep. Chem., Univ. British Columbia, Vancouver, BC Can. V6T 1Y6). *Chem. Phys. Lett.* 1980, 72(2), 252-5 (Eng). The vertical ionization potentials of HNF_2 were calcd. by perturbation corrections to Koopmans' theorem. The calcn. shows that HNF_2 has 3 overlapping bands between 15 and 16 eV. The calcd. results compare well with the exptl. values. The photoelectron spectrum of HNF_2 was compared with that of OF_2 and CH_2F_2 .

(7)
pamod.
cncwp

5626
XIII - 1117

CA 1980 93 18

HNF_2

XIV, 9898 XIII - 5626

1980

21 Б12. Расчет вертикальных потенциалов ионизации дифторамина с учетом пертурбационных поправок к теореме Купменса. Minato T., Chong D. P. Calculation of vertical ionization potentials of difluoramine by perturbation corrections to Koopmans' theorem. «Chem. Phys. Lett.», 1980, 72, № 2, 252—255 (англ.)

у,
1

С учетом поправок к теореме Купменса, полученных по теории возмущений Рэля—Шредингера, определены вертикальные потенциалы ионизации дифторамина, HNF_2 . Расчет методом МО ЛКАО ССП выполнен в ~~базисе~~ 4-3IGF с эксперим. геометрическими параметрами, найденными из микроволновых спектров HNF_2 и DNF_2 . Отмечено, что, по-видимому, из-за ограниченности базиса однозначное отнесение наблюдаемых пиков в фотоэлектронном спектре [ФЭС] в области 15—16 эВ произвести не удалось. Путем сопоставления теоретич. и эксперим. данных ФЭС в молекулах OF_2 , CH_2F_2 и HNF_2 с достоверностью удалось установить, что перекрывающаяся область ~16 эВ соответствует ионизации электрона с трех МО, состав к-рых определяется неподделенными парами атомов фтора. С. Долин

X. 1980 № 21

HNF_2

Lomnick 11174 | 1981.

Langhoff R., Chong D.

(7)

(reanalysis)

Chem. Phys., 1981, 55 (3)

355 - 360



(cm OF_2) III

HNF_2

[Ommuck 13684] 1982

Langhoff S.R., Chong D.P.,

g, paerem

Chem. Phys. Lett., 1982,
86, N5-6.



HNF_2

1982

Larghoff S. R., et al.

J Chem. Phys. Lett., 1982,
86, N 5-6, 487-490.

●
(ver. OF_2 ; III)

$NH F_2$

1983

De Alti Giancarlo,
Declera Piero, et al.

Pacrem
y;

Chem. Phys., 1983, 76,
N2, 185-193.

( cr. yuc - $N_2 H_2$; III)

$\text{HNF}_2(\text{K})$

1987

Christe Karl O.

UK,
CKP.

J. Fluorine Chem. 1987,
35(4), 621-6.

( C_{HF} . $\text{HOF}(\text{K})$; III)

F₂NH

1987

Christe K.O.,

cb-ba Report 1987, ARD-20953.20-CH;
Order N^o AD - A179863, 242pp.

From Gov. Rep. Announce.
Index(U.S.) 1987, 87(16), Abst 2. N^o
734, 666.

C.A. 1988, 108, N 8, 67815m

HNF_2
 DNF_2

DM 26120

1987

17 Б1213. Конденсированные фазы дифторамина и его аддуктов с фторидами щелочных металлов. Condensed phases of difluoramine and its alkali-metal fluoride adducts. Christie K. O., Wilson R. D. «Inorg. Chem.», 1987, 26, № 6, 920—925 (англ.)

Изучены КР- (λ 647,1 нм) и ИК-спектры поглощения ($200\text{--}4000\text{ см}^{-1}$) HNF_2 (I) и DNF_2 (II) в газ., жидк. и тв. состоянии при различных т-рах, а также КР-спектры аддуктов I с KF , RbF , CsF и ИК-спектры аддукта I с RbF . Анализ спектров и характер изменения спектров при переходе I и II из газ. в конденс. состояние указывает на то, что в жидк. и тв. состоянии имеет место ассоциация I через Н-мостики между атомами N. Аддукты I и II образуются за счет мостиковых Н-связей $[\text{F} \dots \text{HNF}_2]^-$, причем CsF и RbF образуют 2 типа Н-связей различной прочности. По-видимому, все аддукты имеют одинаковую структуру, однако для аддуктов CsF и RbF прочность Н-связей различается достаточно сильно. Показано, что в результате р-ции $\text{KF} - \text{HNF}_2$ с TeF_5OF , OF_2 , FONO_2 и FOClO_3 происходит фторирование I до HF и N_2F_4 .

А. В. Бобров

КР и ИК-
спектры

IX

(4)

X: 1987, 19, N17

F_2HN^+
($HN F_2^+$)

om. 30490

1988

Jacob M.E.,

Ti; J. Phys. and Chem. Ref.
Di; Data, 1988, 17, N2,
383

HNF_2

1988

20 B1222. Инфракрасные спектры HNF_2 , NF_3 , PF_3 и PCl_3 и комплексов с HF в твердом аргоне. Infrared spectra of HNF_2 , NF_3 , PF_3 and PCl_3 and complexes with HF in solid argon. Lascola R., Withnall R., Andrews L. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 8, 2145—2149 (англ.)

Измерены ИК-спектры молекул HNF_2 , NF_3 , PF_3 и PCl_3 , изолированных в матрицах из Ar , а также продуктов их соконденсации с молекулами HF и избытком Ar при 12 К. Выполнено отнесение полос исходных реагентов к нормальным колебаниям. Показано, что во всех случаях при соконденсации образуются комплексы с HF состава 1:1 или 1:2. Для комплексов состава 1:1 идентифицированы след. полосы (см^{-1}): HNF_2 —3681 (ν_s) и 516/498 (ν_e), NF_3 —3919 (ν_s) и 246 (ν_e), PF_3 —3890 (ν_s) и 258 (ν_e), PCl_3 —3868 (ν_s). Установлено, что фрагменты в комплексах связаны Н-связями между атомами Н фрагмента HF и атомом N

М.П.

21(43)

Х. 1988, 19, № 20

или Р основания. Предложены вероятные структуры димеров оснований. Установлена линейная корреляция между сродством к протону и сдвигом полосы ν , фрагмента HF в ряду комплексов между HF и молекулами NH_3 , NH_2F , NHF_2 и NF_3 . Оценены величины сродства к протону для HNF_2 (163 ± 5 ккал/моль) и NH_2F (181 ± 5 ккал/моль). Обсуждается изменение основности в рядах галогензамещ. пр-ных аммиака и фосфина.

С. Б. Осин

HNF_2

1988

11 Л204. ИК-спектры HNF_2 , NF_3 , PF_3 и PCl_3 и комплексов с HF в твердом аргоне. Infrared spectra of HNF_2 , NF_3 , PF_3 , and PCl_3 and complexes with HF in solid argon. Lascola Robert, Withnall Robert, Andrews Lester. «J. Phys. Chem.», 1988, 92, № 8, 2145—2149 (англ.)

Получены ИК-спектры ($4000\text{—}500\text{ см}^{-1}$) молекул HNF_2 , NF_3 , PF_3 и PCl_3 и их комплексов с HF , изолированных в твердых аргоновых матрицах при $t = 12\text{ К}$. Проведено сопоставление колебательных спектров этих молекул и их димеров. Предположено, что димеры HNF_2 в матрице обладают асимметричной структурой. Отмечено, что комплексы с HF образованы посредством водородных связей с участием неподеленной пары электронов атомов N или P. Определены линейные корреляции между частотами колебаний и сродством к протону фторзамещенных аминов. Сделан вывод, что основность PF_3 выше основности молекул NF_3 . Библи. 23.

И. В. А.

М.П.

(73)

ср. 1988, N 11

HNF₂

1988

(ck & sample)

~~AZB~~

108: 176118g Infrared spectra of fluoroimide, nitrogen trifluoride, phosphorus trifluoride, and phosphorus trichloride and complexes with hydrogen fluoride in solid argon. Lascola, Robert; Withnall, Robert; Andrews, Lester (Dep. Chem., Univ. Virginia, Charlottesville, VA 22901 USA). *J. Phys. Chem.* 1988, 92(8), 2145-9 (Eng). IR spectra of HNF₂, NF₃, PF₃, and PCl₃ and their complexes with HF were obsd. in solid Armatrices. An asym. structure was deduced for (HNF₂)₂ based on comparison with HNF₂ spectra. Complexation of these bases with HF produced the following bands: HNF₂, 3681 cm⁻¹ (ν_s) and 516 and 498 cm⁻¹ (ν_i); NF₃, 3913 cm⁻¹ (ν_s) and 246 cm⁻¹ (ν_i); PF₃, 3890 cm⁻¹ (ν_s) and 258 cm⁻¹ (ν_i); PCl₃, 3868 cm⁻¹ (ν_s). The spectra suggested the formation of a H bond between HF and the N or P lone pair for all 4 complexes. A direct correlation between H⁺ affinity and ν_s was found for F1-substituted amines, allowing prediction of the HNF₂ H⁺ affinity as 163 ± 5 kcal/mol and that of NH₂F as 181 ± 5 kcal/mol. Basicity trends in N and P compds. are discussed.

(45) ~~AZ~~

C.A. 1988, 108, N20



NF₃, PF₃, PCl₃, (HNF₂)₂
(ck & sample)
NH₂F (Ae)

F₂NH

1988

Black H. G.,

Christen D. et al.

microm.
paper

J. Mol. Struct. 1988,
190, 215-26.

(C_{60}  NH₃; III)



1989

10 Б4466. Прямое наблюдение $\text{NF}(X)$ методом лазеро-индуцированной флуоресценции. Определение отношения выходов различных каналов реакции $\text{H} + \text{NF}_2$. Direct observation of $\text{NF}(X)$ using laser-induced fluorescence: Determination of the $\text{H} + \text{NF}_2$ branching ratio / Heidner III R. F., Helvajian H., Holloway J. S., Koffend J. B. // J. Phys. Chem.— 1989.— 93, № 23.— С. 7818—7823.— Англ. Место хранения ГПНТБ СССР

спектр

Измерено соотношение каналов р-ции $\text{H} + \text{NF}_2 \rightarrow \text{NF}(X^3\Sigma^-, a^1\Delta, b^1\Sigma) + \text{HF}(v \leq 4)$, протекающей при $T_{\text{ре}} 298 \text{ К}$ с полной константой скорости $1,3 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3/(\text{молекула} \cdot \text{с})$. Атомы H генерировали путем Фт HBr излучением 193 нм эксимерного лазера на ArF . Образование $\text{NF}(a)$ наблюдали по эмиссии при 874 нм как при Фт NF_2 излучением 249 нм эксимерного лазера на KrF , так и в р-ции $\text{H} + \text{NF}_2$. Образование $\text{NF}(X)$ регистрировали методом лазеро-индуци-

X. 1990, N10

рованной Фл в переходе $NF(b^1\Sigma-X^3\Sigma^-)$ при Фт NF_2 излучением 249 нм. Оно не обнаружено в р-ции $H+NF_2$. Показано, что доля $NF(a)$ в полном выходе NF в р-ции $H+NF_2$ превышает $0,90\pm 0,03$. Квантовый выход $NF(a)$ при Фт NH_2 излучением 249 нм по оценке не превышает $0,04\pm 0,02$. Квантовый выход Фт NF_2 излучением 249 нм равен единице, согласно результатам титрования атомов F добавками HCl. Библ. 33.

В. Е. Скурат



HNF_2

1992

Cheng D.P.,

J. Chin. Chem. Soc. (Taipei).
1992, 39(5), 457-9.

(9).

(all. OF_2 ;  III)

NF_2H^+

1993

118: 220137v The fluorimide and fluoramide radical ions(1+) (NF_2H^+ and NH_2F^+): conventional structures or ion-molecule complexes? A GAUSSIAN-1 study. Grandinetti, Felice; Hrusak, Jan; Schwarz, Helmut (Istituto Chimica Nucleare CNR, 00016 Rome, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 204(1-2), 53-8 (Eng). The structures and stabilities of the F_2NH^+ (1), FNFH^+ (2), H_2NF^+ (3), and HNFH^+ (4) radical cations were studied at the GAUSSIAN-1 level of theory. Whereas the conventional structure 3 is largely favored with respect to the ion/dipole complex 4 ($\Delta E = 42.6$ kcal/mol⁻¹), the isomers 1 and 2 were calcd. to be of comparable stability. The interconversion process of the latter species is also discussed. The obtained results actually confirmed previous conclusions concerning the factors that control the structures and stability order of the $[\text{NF}_2\text{H}]^+$ isomers, as obtained from the gas-phase protonation of nitrogen fluoride.

структура
и стабильн.



C.A. 1993, 118, 222