

C-N-F-O

1965

$\text{NO}_2\text{F}_2-\text{CF}_3\text{NO}_2$

N-оп

$\text{C}_2\text{N}_2\text{F}_4\text{O}_2$

N 1295

6 Б173. 1,2-динитротетрафторэтан. Спектры поглощения и взаимодействие с растворителями. Ungnade H. E., Loughran E. D., Kissinger L. W. 1,2-dinitrotetrafluoroethane, absorption spectra and bonding with solvents. «J. Phys. Chem.», 1965, 69, № 5, 1758—1760 (англ.)

Измерены ИК-полосы сим. и антисим. вал. кол. группы NO_2 1,2-динитротетрафторэтана (I) в газовой фазе и в р-рах CCl_4 , диоксана, метанола, хлороформа, дихлорметана и триэтиламина, а также УФ-спектры I в указанных р-рителях, а также гексане, циклогексане, воде, диэтиловом эфире, гексилаmine и дипропилаmine. Обсуждены изменения, наблюдаемые в спектрах при переходе от одного р-рителя к другому.

Б. Рассадин

Х. 1967.6

CF_2NO

1968.

Modica A.

(Avio Space Systems
Division)

"Bull. of Amer. Phys. Soc"
1968, Ser II, 13 N 5 795

Время пролет
массовых и

Служба по делам детей.

$(CF_3)_2NO$

1971

16 Б116. Молекулярная структура бис-(трифторметил)нитроксид: электронографическое исследование. Glidewell C., Rankin D. W. H., Robiette A. G., Sheldrick G. M., Williamson S. M. Molecular structure of bis(trifluoromethyl)nitroxyl: an electron diffraction study. «J. Chem. Soc.», 1971, A, № 3, 478—481 (англ.)

Методом газовой электронографии изучена структура молекулы $(CF_3)_2NO$. Найдены след. значения межъядерных расстояний (А) и валентных углов: N—O $1,26 \pm 0,03$, C—N $1,441 \pm 0,008$, C—F $1,320 \pm 0,004$, $\angle FCF$ $109,8 \pm 1,0^\circ$, $\angle CNC$ $120,9 \pm 2,0^\circ$, $\angle CNO$ $117,2 \pm 0,6^\circ$. Угол между связью N—O и плоскостью CNC $22 \pm 3^\circ$. В. Спиридонов

геом.

структ.

X. 1971. 16

1971

 $(CF_3)_2NO$ Структур
парам.Электро-
нофаз.

68925p Molecular structure of bis(trifluoromethyl) nitroxide electron diffraction study. Robiette, Alfred G.; Gildewell, C.; Rankin, D. W. H.; Sheldrick George M.; Williamson, Stanley Morris (Univ. Chem. Lab., Cambridge, Engl.). *J. Chem. Soc.* A 1971, (3), 478-81 (Eng). The mol. structure of bis(trifluoromethyl) nitroxide $(CF_3)_2NO$, was detd. in the vapor phase by the sector microphotometer electron diffraction method. Principal structural parameters with estd. std. deviations in parentheses are $r(NO)$ 1.26(3), $r(CN)$ 1.441(8), and $r(CF)$ 1.320(4) Å; F-C-F 109.8(1.0°), C-N-C 120.9(2.0), C-N-O 117.2(0.6°). The angle between the CNC plane and the NO bond is 22(3°).

RCGF

C.A. 1971. 74, 14

1972
(CF₃)₂ NO Photoelectron spectra of
free radicals. Cornford A.B.
Faraday Discuss. Chem. Soc.
1972, No 54, 56-63 (Eng)

(7)

(all NF₂; III)

C.A. 1974.80.N8.

FNCO

B90-5-7459

1972

Rode B.M., Kosmus W. et al.,

$\epsilon_i; \Delta E$
геометр.

Chem. Phys. Lett, 1972, 17, n2,
186-188 (англ.)

Pre Chem, 1973, 8537

CF₃OONO₂

Х 4-5023

1974

(Di)

9 Д447. Некоторые реакции CF₃OO-производных - с неорганическими соединениями азота. Синтез и колебательный спектр трифторметилпероксинитрата. Hohorst Frederick A., DesMarteau Darryl D. Some reactions of CF₃OO derivatives with inorganic nitrogen compounds. Synthesis and vibrational spectrum of trifluoromethyl peroxyxynitrate. «Inorg. Chem.», 1974, 13, № 3, 715—719 (англ.)

Изучены физико-химич. свойства и спектры комб. рас. жидкого (при —25° С) и ИК-спектры поглощения (200—4000 см⁻¹) газообразного и твердого (при —196° С) CF₃OONO₂. В предположении симметрии C_s и в сравнении со спектрами сходных галондсодержащих пероксинитратов выполнено отнесение наблюдавшихся полос. Библ. 27. С. Ф. Б.

Ф. 1974. № 9

$\text{CF}_3\text{O}_2\text{NO}_2$

* 4-5023

1974

интенс.
полос.

2. 1974
N18

18 B258. Некоторые реакции производных CF_3OO с неограниченными соединениями азота. Синтез и колебательные спектры трифторметилпероксинитрата. No-horst Frederick A., DesMarteau Darryl D. Some reactions of CF_3OO derivatives with inorganic nitrogen compounds. Synthesis and vibrational spectrum of trifluoromethyl peroxynitrate. «Inorg. Chem.», 1974, 13, № 3, 715—719 (англ.)

Описан синтез CF_3OONO_2 (I) при взаимодействии CF_3OOH с N_2O_5 или CF_3OOF с N_2O_4 . Исследованы ИК- и КР-спектры I. Табулированы данные по положению и относит. интенсивности полос в спектрах и дано их отнесение к характеристич. колебаниям: асим. вал. кол. NO_2 1760, сим. вал. кол. NO_2 1305, сим. вал. кол. CF_3 1281, асим. вал. кол. CF_3 1244 и 1186, вал. кол. CO 953, вал. кол. OO 880 сим. вал. кол. NO 783, неплоск. сим. деф. кол. NO_2 702, сим. деф. кол. CF_3 669, сим. деф. кол. NO_2 600, асим. деф. кол. CF_3 562 и 485, асим. маятн. кол. NO_2 436, асим. маятн. кол. CF_3 371, деф. кол. COO 287, деф. кол. OON 264 cm^{-1} . В F^{19} ЯМР спектре продукта присутствует синглет с $\Phi^* = 69,4$. Ю. В. Киссин

CF₃ OONO₂

* 4-5023

1974

(Vi)

90577x Reactions of trifluoromethyl peroxy derivatives with inorganic nitrogen compounds. Synthesis and vibrational spectrum of trifluoromethyl peroxyxynitrate. Hohorst, Frederick A.; DesMarceau, Darryl D. (Dep. Chem., Kansas State Univ., Manhattan, Kans.). *Inorg. Chem.* 1974, 13(3), 715-9 (Eng). Trifluoromethyl peroxyxynitrate, CF₃OONO₂, is obtained in high yield by the reaction of CF₃OOH with N₂O₃ or CF₃OOF with N₂O₄. Phys. and chem. properties of the new compd. are re-

C.A. 1974. 80. N16

40522.1926

$$\text{CF}_3\text{OONO}_2$$

1974

Ex-C, TE, Ph, Ch

И К 40534 02
спектр

*45023

Hohorst Frederick A., DesMarteau Darryl D. Some reactions of CF_3OO derivatives with inorganic nitrogen compounds. Synthesis and vibrational spectrum of trifluoromethyl peroxyxynitrate.

"Inorg. Chem.", 1974, 13, N 3, 715-719
(англ.)

092 095

ВІННИТИ

CF₃NCO

спектр.
строен.

х. 1974.
№ 15

15 Б36. Расчеты изоцианатов методом МО ССП. Сообщ. 2. Соединения CF₃NCO, H₃SiNCO и F₂PNCO. Röde B. M., Kosmus W., Nachbauer E. MO-SCF-Berechnungen an Isocyanaton, 2. Mitt.: Die Verbindungen CF₃NCO, H₃SiNCO und F₂PNCO. «Monatsh. Chem.», 1974, 105, № 1, 191—195 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в валентном приближении ППДП/2 исследовано электронное строение изоцианатов CF₃NCO (I), H₃SiNCO (II) и F₂PNCO (III). Равновесные длины связей N—C и C—O во всех соединениях найдены равными 1,26 и 1,23 Å соотв., длины связей C(F₃)—N в I, Si—N в II и P—N в III оценены в 1,46; 1,84 и 1,72; валентные углы C—N—C и Si—N—C в I и II соотв. 170,1 и 180°, углы N—C—O 174,7; 177,4 и 179,9° в I—III соотв. Отмечено, что разность энергий равновесных форм и форм с линейными группировками N—C—O невелика (0,2—3,0 ккал/моль). Полученные результаты согласуются с имеющимися эксперим. данными. Рассчитаны распределения электронной плотности и дипольные моменты—1,29; 1,72 и 1,43 D соотв. Отмечена высокая полярность группы C—O в II, согласующаяся с высокой р-ционной способностью II. Сообщ. 1 см. РЖХим, 1973, 8Б37.

В. Л. Лебедев

1974

577114 2265

(42)

⊗

CF₃NCO

аттмск 2265

1974

(геометр.; Mo)

II Д147. Расчеты изоцианатов методом МО ССП. Ч. 2. Молекулы CF₃NCO, H₃SiNCO и F₂PNCO. Rode B. M., Kosmus W., Nachbaur E. MO—SCF—Berechnungen an Isocyanaten. 2. Mitt. Die Verbindungen CF₃NCO, H₃SiNCO und F₂PNCO. «Monatsh. Chem.», 1974, 105, № 1, 191—195 (нем.; рез. англ.)

Расчет перечисленных молекул (I, II и III соответственно) выполнен методом ППДП/2 с оптимизацией части геометрич. параметров. Угол NCO оказался 174,7°, 177,4° и 179,9° соответственно в I, II и III. Порядок связи по Вайбергу (Wiberg H. B. «Tetrahedron», 1968, 24, 1083) равен 1,3 для связи P—F, что приписано, влиянию d-АО в Р, и 1,75 для C=O в I и II, что коррелирует с высокой реакционной способностью этих соединений. Ч. I см. РЖФиз, 1973, 4Д157.

Ю. Е. Эйзнер

ф. 1974. N 11

(+2) ☒

HC(O)N.

1975

Harrison T. H., et. al.
J. Amer. Chem. Soc., 1975,
97, N15, 4172-4176.

расчет
равнов.
геометрии
и строения

● (as HC(O)N

60624.4367
Ph, Ch, TC, MGU,
Ex-C.

CF₂+NO 40892

CF+NO

(механизм
р-ции)

1976

4482

Burks T.L. Lin M.C. Mechanisms of
CF₂+NO and CF+NO reactions via mass
spectral and chemical laser emission me-
asurements. "J.Chem.Phys.", 1976, 64, N 10,
4235-4236 (англ.)

0643 пик

624 630

8 35

ВИНИТИ

$(CF_3)_2NO$

1 Д245. Прилипание электронов к стабильным свободным радикалам $(CF_3)_2NO$ в газовой фазе. Harland and Peter W. Electron attachment to the stable free radical bis-trifluoromethylnitroxide in the gas phase. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1977, 25, № 1, 61—70 (англ.)

Масс-спектральным методом изучено ассоциативное и диссоциативное прилипание электронов к газовым стабильным свободным радикалам $(CF_3)_2NO$ в интервале энергий электронов 0—10 эв. В противоположность молекулярным отрицат. ионам с эквив. числом колебательных степеней свободы, где пик электронного захвата узок и времена автоотрыва электрона 10—60 мксек, ион $(CF_3)_2NO^-$ образуется в интервале энергий до 2 эв со средним временем автоотрыва примерно 650 мксек. Анализы кривых диссоциативного прилипания для осколочных ионов F^- , CF_3^- и $(CF_3)NO^-$, образованных в интервале энергий электронов 0—10 эв, приводят к оценке предельных величин термодин. параметров свободного радикала и продуктов его распада: $D(F-CF_2NO \cdot CF_3) \leq 3,4$ эв; $D(CF_3-NO \cdot CF_3) \leq 2,0 \pm 0,2$ эв; $D(CF_3-NO) \leq 1,3 \pm 0,1$ эв; $EA(CF_3-NO) \geq 2,0 \pm 0,2$ эв. Г. К.

до диссоц.
прилипания
электронов.

ф. 1978 №1

1974

5638

оттиск

FC (NO₂)₃

number 5668 1977

Vulfsen S. G.
et al

M,

Wet. Kerr,
Newspg.

J. Mol. Street,

1977, 40, 225-31.

CFNO

1978

Poppinger Dieter et al.

равнов
равнов
равнов

J. Amer. Chem. Soc. 1978,
100, N12, 3674-85

св. CFNO-III

$(CF_3)_2 NO$

1981

Compton D. A. C.,
et al.

Vi; J. Phys. Chem., 1981, 85,
N21, 3093-3100.

●
(see $(CF_3)_2 NOH$; III)

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

1981

спектр
флуоресценции

9 Д740. Ван-дер-ваальсовские молекулы и механизм образования димеров при охлаждении CF_3NO в сверхзвуковой струе. Van der Waals molecules and the mechanism of dimer formation in jet-cooled CF_3NO . DeKoven Benjamin M., Levy Donald H. «J. Chem. Phys.», 1981, 74, № 2, 1515—1516 (англ.)

В области $14\,290\text{--}14\,315\text{ см}^{-1}$ получены спектры возбуждения флуоресценции паров CF_3NO , охлажденных в сверхзвуковой струе в смеси с He. Для возбуждения использовался перестраиваемый лазер на красителе. В спектрах обнаружена структура, отнесенная авторами к ван-дер-ваальсовскому комплексу CF_3NOHe . Установлено, что увеличение концентрации паров CF_3NO в струе с 0,5% до 1,5% при полном давлении смеси 60 атм приводит к исчезновению комплексов. По мнению авторов, этот факт связан с механизмом образования димеров $(\text{CF}_3\text{NO})_2$ в бинарных столкновениях: $\text{CF}_3\text{NOHe} + \text{CF}_3\text{NO} \rightarrow (\text{CF}_3\text{NO})_2 + \text{He}$.

ф. 1981 № 9

CF₃NO

1982

10 Д424. Селективная динамика фотодиссоциации молекул CF₃NO. ~~State-selective photodissociation dynamics of CF₃NO.~~ Jones R. W., Bower R. D., Houston P. L. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 6, 3339—3340 (англ.)

фотодис-
социация

С использованием техники сверхзвуковых молекулярных пучков и двух перестраиваемых лазеров на красителях исследована зависимость распределения продуктов реакции фотодиссоциации $\text{CF}_3\text{NO} + h\nu \rightarrow \text{CF}_3 + \text{NO}(X^2\Pi)$ (I) по внутренней энергии возбуждения. Длина волны излучения возбуждающего лазера варьировалась в области ~ 700 нм, а второй, пробный лазер служил для определения характера вибронного возбуждения осколков NO по спектру их флуоресценции в полосе $X^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$. Временная задержка между импульсами возбуждающего и пробного лазеров составляла 200 нс. Результаты получены для реакции I, идущей с возбуждением колебательных мод CF₃NO: 12⁰, 12¹, 8¹, 12³, 7¹ и 12⁵.

ср. 1982, 18, 110

F-NCO

От. 19960

1984

2 Б1153. Образование фторизоцианата (F—NCO) в аргонной матрице. Die Bildung von Fluorisocyanat (F—NCO) in Argonmatrix. Gholivand Khodayar, Willner Helge, Bielefeldt D., Haas A. «Z. Naturforsch.», 1984, B39, № 9, 1211—1215 (нем.; рез. англ.)

Измерены ИК-спектры продуктов УФ-фотолиза (Hg — дуговая лампа) F—CO—N₂, H—CO—NF₂, NF₂—CO—NF₂ и CF₃—CO—NF₂ в Ar-матрице. Наблюдаемые в спектрах фотолизированных матриц новые полосы 2172, 861, 695, 646 и 529 см⁻¹ отнесены с учетом изотопных сдвигов (^{14,15}N) к колебаниям $\nu_{as}(\text{NCO})$, $\nu(\text{NF})$, $\delta(\text{NCO})$, $\delta(\text{NCO})$ и $\delta(\text{FNC})$ молекулы FNCO (расчетное значение недостающей частоты $\nu_s(\text{NCO}) = 1260 \text{ см}^{-1}$). Частоты колебаний FNCO сопоставлены с данными по молекулам XNNN и XNCO (X=F, Cl, Br). Выполнен расчет нормальных колебаний и приведены параметры силового поля молекулы. В. М. Ковба

Vi, см. лссм

X. 1985, 19, №2.

F. NCO

(Om. 19960)

1984

102: 36511f Formation of fluoroisocyanate in an argon matrix. Gholivand, Khodayar; Willner, Helge; Bielefeldt, Dietmar; Haas, Alois (Inst. Anorg. Chem., Univ. Hannover, D-3000 Hannover, 1 Fed. Rep. Ger.). *Z. Naturforsch., B: Anorg. Chem., Org. Chem.* 1984, 39B(9), 1211-15 (Ger). Matrix samples of F-CO-N₃, and X-CO-NF₂ (X = H, NH₂, CF₃) were photolyzed by Hg arc light and the new IR bands at 2172, 861, 695, 646, 529 cm⁻¹ assigned to the F-NCO mol. ¹⁵N isotopic substitution confirmed the assignment of the IR bands of the new compd.

lek cnekmp
b namnye,
vi;

C. A. 1985, 102, NY.

FCNO
CCNO

[see 24 195]

1986

расгій
Ецгол. и
барбер
цголмер.

Чаркеев О. П.,
Знобиль Т. С.

Координат. службы,
1986, 12, N 8, 1011-1037.



CF₃NO

1987

9 Л233. Спектр в видимой области CF₃NO в охлажденной молекулярной струе. The visible spectrum of jet-cooled CF₃NO. Dyet J. A., McCoustra M. R. S., Pfab J. «Chem. Phys. Lett.», 1987, 135, № 6, 534—538 (англ.)

Изучен спектр возбуждения флуоресценции CF₃NO в охлажденной струе He и Ar. В спектре перехода в состояние $S_1(n\pi^*)$ (675—718 нм) выделена прогрессия ($n=0-8$) крутильного колебания группы CF₃ относительно группы NO ($\nu \approx 103 \text{ см}^{-1}$). Уточнено положение полосы чисто электронного перехода $S_1 \leftarrow S_0$ ($13\,930 \text{ см}^{-1}$). Из распределения интенсивностей в прогрессии указанного выше крутильного колебания уточнена величина вращательного барьера в состоянии S_1 у CF₃NO ($\approx 601,5 \text{ см}^{-1}$). Библ. 21. В. А. Л.

М.П.

ф. 1987, 18, 49

CF₃NO

1987

106: 223524g The visible spectrum of jet-cooled trifluoronitrosomethane. Dyet, J. A.; McCoustra, M. R. S.; Pfab, J. (Dep. Chem., Heriot-Watt Univ., Edinburgh, UK EH14 4AS). *Chem. Phys. Lett.* 1987, 135(6), 534-8 (Eng). The electronic origin of the AA'' ← AA' transition of CF₃NO reassigned to the weak feature near 717.9 nm in the fluorescence excitation spectrum of the jet-cooled mol. The prominent torsional progression was reinterpreted and the height of the 3-fold torsional barrier in the A(n,π*) state was revised to 601.5 ± 10 cm⁻¹.

(71. cm⁻¹)

C.A. 1987, 106, N26

CF₃NO

DM. 2B 465

1987

вугляк
спектр

Dyet J.A., McClestra M.R.
et al.,

Chem. Phys. Lett., 1987,
135, N 6, 534-538.

C₃F₇-NO

1989

23 В4804. Диссоциативное рассеяние молекулы $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{NO}$ на поверхности MgO (100) при сверхтепловых энергиях. Первичный $\text{NO}(X^2\Pi)$. Molecule-surface dissociative scattering of $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{NO}$ from MgO (100) at hyperthermal energies: Nascent $\text{NO}(X^2\Pi)$ / Kolodney E., Baugh D., Powers P. S., Reisler H., Wittig C. // J. Chem. Phys.— 1989.— 90, № 7.— С. 3883—3885.— Англ.

Импульсный молек. пучок $n\text{-C}_3\text{F}_7\text{NO}$ (I), ускоренный до кинетич. энергий $E=1-7$ эВ в смеси с H_2 , направляли на Пв скола монокристалла MgO (100) при $T_s=500-800$ К. Скорость молекул I измеряли по времени пролета при помощи квадрупольного масс-спектрометра. Продуктом столкновительно-индуцированной диссоциации (СИД) молекул I на Пв являются молекулы $\text{NO}(X^2\Pi)$. Их распределения по состояниям внутр. энергии на расстоянии 10—15 мм от Пв измеряли методом резонансной двухчастотной двухфотонной фотоионизации. Резонансный переход в обл. 224—227 нм осуществляли лазерными импульсами с энергией 10—20 мкДж, а ионизац. переход при ~ 280 нм — импульсами с энергией ~ 1 мДж. Особенности этих

Жерние дис-
социации
хлел. свери

X. 1989, № 23

распределений ($E=3,0$ эВ, $T_s=720$ К) таковы: 1) основное ($^2\Pi_{1/2}$) и возбужденное ($^2\Pi_{3/2}$) спин-орбитальные состояния NO (расщепление 123 см^{-1}) имеют различные вращат. распределения, соотв. вращат. т-рам 330 ± 20 и 490 ± 30 К; 2) спин-орбитальное возбуждение сравнительно мало: отношение заселенностей уровней $\text{NO}(^2\Pi_{3/2})/(^2\Pi_{1/2})$ равно $\sim 0,35$, что соответствует т-ре 170 К. При повышении E до 5 эВ вращат. т-ра немного повышается, но отношение заселенностей спин-орбитальных состояний не меняется. Аналогичные спин-орбитальные распределения NO с меньшей заселенностью состояния $^2\Pi_{3/2}$ по сравнению с вращат. т-рой наблюдались ранее в процессах газовой мономолек. диссоциации. Однако в газовой фазе в соответствии с предсказаниями статистич. модели вращат. возбуждение состояния $^2\Pi_{3/2}$ было более низким по сравнению с $^2\Pi_{1/2}$, тогда как при СИД I на Пв это соотношение получается обратным. Вероятность диссоциации I при $E=5,1$ эВ и $T_s=570$ К равна $3\pm 1\%$. Она снижается в шесть раз при снижении E до 3 эВ. Порог процесса СИД равен $\sim 2,7$ эВ (энергия диссоциации хим. связи $\text{C}_3\text{F}_7\text{—NO}$ равна 1,71 эВ).

В. Е. Скурат

FNCO
FOCN

i989

Alack Hans-Georg,
Oberhammer Heinz

электрон
сpectrum

Chem. Phys. Lett., 1989, 157,
~5, 436-9

● (Cm. MNCO,
HOCN, III)

FC(O)NCO

1991

Nguyen Minh Tho,
Hajnal M. R., et al.,

сирькмур,
рәсрәт.

THEOCHEM 1991, 77,
185-93.

(сир. ● ccc(O)NCO; III)

FOCN

1992

OCNF

Knop Osvald,
Choi S.C. et al.

сепрхм.

Can. J. Chem. 1992,

парасепрхм,

70(10), 2574-2601.

теор. пархм

(сеп.  OBOH; III)

NCL(O)F

1992

№ 11 Б1146. Фотоэлектронный спектр цианоформилфторида. The photoelectron spectrum of cyanoformyl fluoride / Niessen Wolfgang von, Fougère Scott G., Janvier Dany, Klapstein Dieter // J. Mol. Struct.— 1992. — 265, № 1—2.— С. 133—142.— Англ.

Измерен фотоэлектронный спектр молекул цианоформилфторида, ~~NCC(O)F~~ — возбуждаемый He-I. Цианоформилфторид получался при вакуумном флеш-термоллизе (550°С) паров 2-хлор-2-(хлортиоимино) — ацетилфторида. В случае нек-рых полос наблюдалась разрешенная колебат. структура. При интерпретации ФЭС использованы результаты неэмпирич. и полуэмпирич. расчетов молекулы (ССП, ф-ции Грина, МПДП, АМ I). Положение полос в ФЭС (в эВ), их отнесение (ионизируемая МО), величины колебат. интервалов (в см⁻¹): 13,15 (адиабатич. энергия ионизации 13,01 эВ), 10a', 1460 и 540; 13,90, π_{СН}''(3a''), 1590; 14,14, π_{СН} (9a'); 14,76; n_N'(8a'), 1200 и 500; 15,34, π''_{СОF}—(2a''), 1810 и 520; 16,54, n_F'(7a'); 18,42.

М.П.

X. 1992, № 11

$\pi''_{\text{COF}} + 1a''$), 1280 и 480 $\pi \text{ N}''$ -орбитами CN-группы $\pi''_{\text{COF}} \pm$ — симм. и антисимм. комбинации орбиталей π_{CO}'' и n_{F}''). Колебат. структура связана с вал. кол. групп CN и CO и деф. кол. фрагмента COF в различных состояниях иона. Отмечена сильная делокализация внеплоскостных орбиталей, образованных фрагментами CO, CN и F. Результаты сопоставляются с данными по родственным молекулам. Рассмотрена корреляц. диаграмма положения полос в ФЭС формилфторида, HC(O)F , пропионилфторида, HCCC(O)F ; цианоформилфторида, NCC(O)F ; формилцианида, NCC(O)N , на основании анализа к-рой предложено след. новое отнесение полос (в эВ) в ФЭС формилцианида, NCC(O)N 11,91, n_0' ; 13,51, π_{CN}' , π_{CN}'' ; 14,27, n_{N}' ; 15,88, π_{CO}'' ; 17,17, $\sigma_{\text{CC.CO}}$. В. М. Ковба



CF₃NO₂

1992

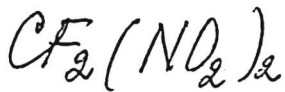
17 Б1179. Внутреннее вращение в CF₃NO₂. Internal rotation in CF₃NO₂ /Tolles W. M. //47th Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15—19, 1992.—Columbus (Ohio), 1992.—С. 249.—Англ.

Для объяснения разногласий в величинах барьера внутр. вращения CF₃NO₂, определенного методами газ. электронографии (3 ккал/моль) и вращат. МВ-спектроскопии (74 кал/моль), предложена модель, рассматривающая эффекты вз-вия между внутр. вращением и колебанием

М.Н.

дет. кванта

X, 1993, N 17



1992

Wu Nianci, Dong Nan,
et al.

Ханчжоу газет сэтгэл.
Узвжамь кэсүэбамь.

и.п.

J. Hangzhou Univ. Natur.
Sci. Ed. 1992. 19, No. C. 172-
178. (сер. $\text{CH}_2(\text{NO}_2)_2$; III)

FC(O)NCO

1994

120: 256293y Raman and infrared spectra, conformational stability, barriers to internal rotation and ab initio calculations of fluorocarbonyl isocyanate. Durig, J. R.; Guirgis, G. A.; Krutules, K. A.; Phan, H.; Stidham, H. D. (Dep. Chem., Univ. Missouri, Kansas City, MO 64110-2499 USA). *J. Raman Spectrosc.* 1994, 25(3), 221-32 (Eng). The Raman (3100-10 cm^{-1}) and IR (3100-30 cm^{-1}) spectra of fluorocarbonyl isocyanate, FC(O)NCO, were recorded for the gas and solid. Addnl., the Raman spectrum of the liq. was recorded and qual. depolarization values were obtained. The obsd. bands are assigned on the basis of the more stable cis conformer (isocyanate group cis to the carbonyl bond) in the fluid states but only the trans conformer remains in the annealed solid. From temp. dependence studies of the Raman spectra of the gas and liq., 2 pairs of conformer peaks were used to det. ΔH values of $258 \pm 47 \text{ cm}^{-1}$ ($738 \pm 134 \text{ cal-mol}^{-1}$) and $140 \pm 29 \text{ cm}^{-1}$ ($400 \pm 83 \text{ cal-mol}^{-1}$), resp., with the cis conformer the more stable rotamer in both phases. Addnl., variable-temp. studies of the IR spectrum of the sample dissolved in liquefied Kr gave $\Delta H = 150 \pm 28 \text{ cm}^{-1}$ ($429 \pm 80 \text{ cal-mol}^{-1}$), which should closely represent the ΔH value for the

(CRP & HK
CALKM)

C. H. 1994, 120, N 20

gas. A complete vibrational assignment is proposed for both conformers based on IR band contours, Raman depolarization data, group frequencies, relative intensities and normal coordinate calcs. The exptl. conformational stability, barriers to internal rotation, structural parameters and fundamental vibrational wavenumbers were compared with those obtained from ab initio gradient calcs. employing the RHF/3-21G, RHF/6-31G* and/or MP2/6-31G* basis sets and to the corresponding quantities obtained for some similar mols.

CF₃NCO

Frankam -
Cherny,
A, B, C

1994

122: 67090k The rotational spectrum of trifluoromethyl isocyanate. Koput, J.; Stahl, W.; Heineking, N.; Pawelke, G.; Steger, B.; Christen, D. (Dep. Chem., Adam Mickiewicz Univ., 60-780 Poznan, Pol.). *J. Mol. Spectrosc.* 1994, 168(2), 323-32 (Eng). The rotational spectrum of trifluoromethyl isocyanate, CF₃NCO, in the ground vibrational state has been measured in the region 3-15 GHz using a mol. beam Fourier transform spectrometer. The spectrum was analyzed using two theor. models: the model of a semirigid mol. with internal rotation of the trifluoromethyl group and the quasi-sym.-top model. The nuclear hyperfine structure of 32 α -type $J + 1 \leftarrow J$ rotational transitions, with $J = 0$ to 3, arising from mols. in two sublevels of the ground torsional state was analyzed, yielding values of all the nonvanishing quadrupole coupling consts. The spectroscopic parameters of trifluoromethyl isocyanate were detd., and the mol. was found to be a nearly prolate sym. rotor with the rotational consts. $A = 5675$ MHz, $B = 1752.524$ MHz, and $C = 1746.132$ MHz. The barrier to internal rotation of the trifluoromethyl group was found to be 48 cm⁻¹. Some of the structural parameters were detd. from the rotational consts. In addn., the values of the mol. parameters was estd. in ab initio calcns.

C.A. 1995, 122, N6

$\text{CF}_2(\text{NCO})_2$

[Dm. 40634]

2000

cmp-pa

Jürgen Suschmann,
Dieter Lentz et al.,

201. Frekmpo

korpaer.

Kb-mek. A104,

paner

J. Phys. Chem. 2000,
7123-28