

$\text{NO}_2^{+,-}$

111-2362

$\text{NO}_2^{++}$  ( D )

1932

Friedländer E., Kallman H.,  
Lasareff W., Rosen B.

Z. Physik 1932, 76, 60-9  
"The dissociation of molecule  
ions by collision"

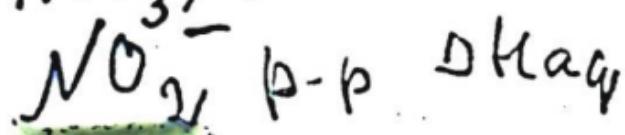
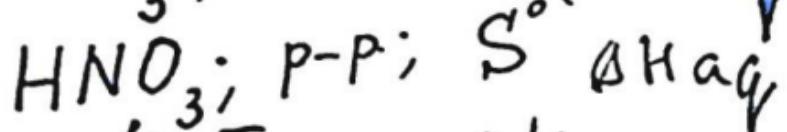
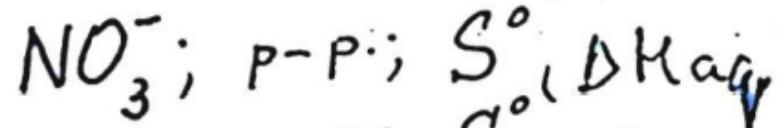
C.A., 1932, 5829

10 μ

III-38

1937

Brown, Smith, and Latimer  
J. Am. Chem. Soc. 59, 921 (1937)



Circ. 500

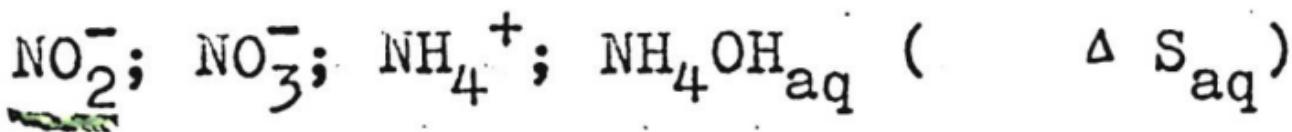
B



Eq. 2 g

M-2287

1938



Latimer W.M., Pitzer K.S.,  
Smith W.V.

The entropies of aqueous ions

Jour. Am. Chem. Soc., 1938, 60, 1829

Kelley, bull. 592,  
c. 685



e.q.

B

III - 1095  
Δ H<sub>f</sub> (K<sup>+</sup>, OH<sup>-</sup>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, HCOO<sup>-</sup>, ClO<sub>3</sub><sup>-</sup>, 1947

CH<sub>3</sub>COO<sup>-</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, CN<sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, HS<sup>-</sup>, CHS<sup>-</sup>)

Δ H<sub>f</sub> (23)

Δ H<sub>aq</sub> [соли  
(RBCNS; Ni(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>/ (ClO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>;

S<sub>2</sub>(ClO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>; CH<sub>3</sub>COOLi; HCO<sub>2</sub>Li)]

ЙЦИМИРСКИЙ К.Б.

Известия АН СССР отд. хим. наук 1947;  
453-7. "Термохимический радиус ионов и тепло-  
та образования солей". С.Л., 1948, 2163а

и

ЭУЗ №96

III-1131

$\text{NO}_2^-$  ( Н гидр. )

1948

Яцимирский К.Б.

Известия АН СССР. Отд. хим. наук.  
1948, 398-405.

"Термохимические радиусы и теплоты  
гидратации ионов"

С.А., 1948, 8604e

✓4

e.g.

111-1136



1958

Altschuller A.P.

J.Chem.Phys., 1958, 28, N 6,  
1254-1255 (*ann.*)

Entropies of some diatomic and  
polyatomic ions

PX., 1958, N 24,  
80632



egp

10.M. R

III - 350

$\text{NO}_2^-$  (K<sub>p</sub>)

1954

Spindel W.

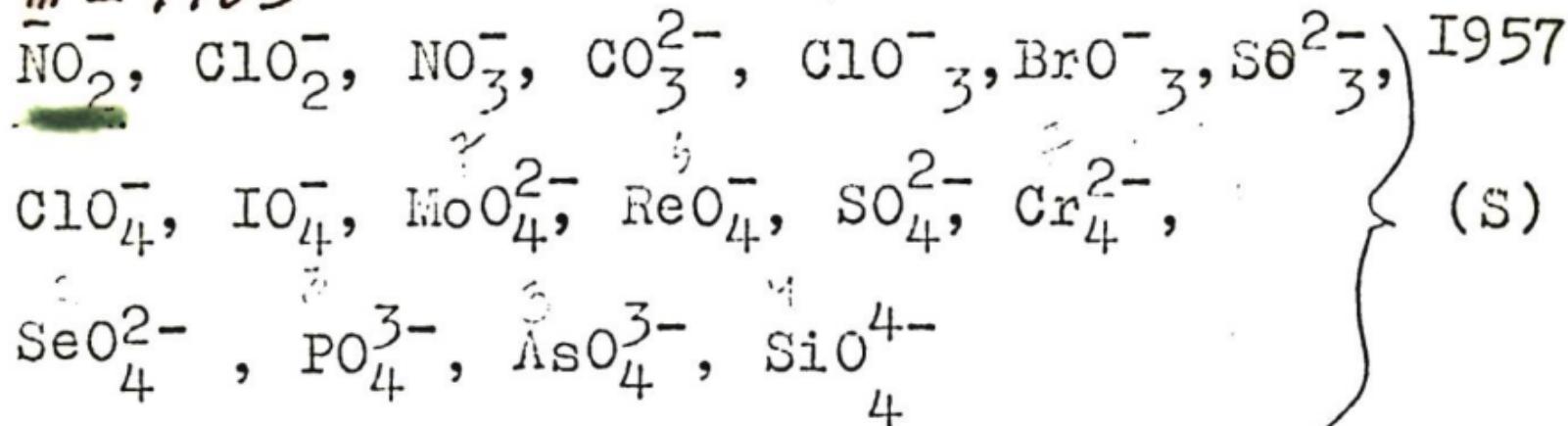
J. Chem. Phys., 1954, 22, 1271-2

The calculation of equilibrium constants for several exchange reactions of nitrogen<sup>15</sup> between oxy compounds of nitrogen

C.A., 1954, 12522L

40

III - 1103



Altshuller A.P.

J.Chem.Phys., I956, 24, N 4, 642-643( )  
Entropies of hydration of gaseous oxyanions.

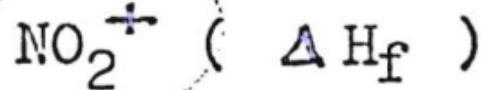
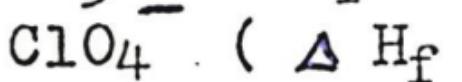
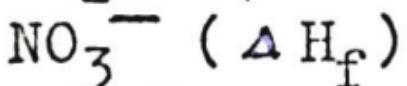
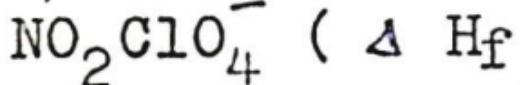
PX, I957, 29879

10 13

Oct 9-10.

BP-III-1092 ; BP-5123-III

1958



Cordes H.F., Fetter N.R.

J.Phys.Chem., 1958, 62, N 10, 1340-1341  
( $\Delta H_f$ )

The heat of formation of nitronium perchlorate and of the gaseous nitronium ion.

PX, 1959.

26392

μ B

+1 coupling  
B singule  
Eens gr.

BP- III - 1062; BP- 5668-III

1958

$\Delta H_{\text{aq}}$ ,  $\Delta H_f$  ( $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_3^-$ ,  $\text{ClO}_4^-$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ )  
CNS,  $\text{BrO}_3^-$ )

Morris D.F.C.

J. Am. Phys. and Nucl. Chem. 1958, 6, p. 4,  
295-302 (AH2N.)

Lattice energies and related properties  
derived using lyotropic numbers.  
R.A., 10 9, 1958

M.B.



Some gr.k.

II-3072

H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>Se, H<sub>2</sub>S, CH<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>Se, 1963

D<sub>2</sub>S, SCl<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>O, Cl<sub>2</sub>O, ClO<sub>2</sub><sup>-</sup>, UO<sub>2</sub><sup>2+</sup>,

NO<sub>2</sub><sup>+</sup>, NO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, CF<sub>2</sub>, CCl<sub>2</sub>, CBr<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>

( H<sub>F</sub>-H<sub>O</sub>, G<sup>O</sup>, S<sup>O</sup>, Cp )

Venkateswarlu K., Tahanalakshmi R.

Indian J. Pure Appl. Phys., 1963,  
1(11), 377-9

- Urey-Bradley, force field and ...

CA., 1964, 60, N 5,

4823d

10



1965  
NO<sub>2</sub>(aq); Lumme P., Lahesmaa P., Tuomi  
Juri Y..

ML

, Acta Chem. Scand., 1965, 19, 2175-81

Teperogenetische Eigenschaften  
chlorierter Azoxyketone

Bildung von dimeren Lumme P., Tuomi  
Juri Y., Acta Chem. Scand., 1965, 19, 612 beschreibt  
diese Arbeit

- von neuerst. Messen ~~EPC~~ aufgetragen

Прически  $\text{HNO}_2$  при  $25^\circ\text{C}$ . Изменение констант  
 (затраты энергии на разрыв).  
 константы при  $15, 20, 25, 35^\circ\text{C}$ . Рассмотрим  
 неизменную константу смысла. Тогда  $\log K_0 =$   
 $\frac{1}{2} - \alpha T - CT + \beta$ ;  $\Delta H = 2,303 R (a - cT^2)$ .



	$\rho K_0$	$\rho K_0$	$D_{\text{H}}^{\text{HNO}_2}$	$\Delta H$	$\Delta S$	$\Delta G_p$	$-T\Delta S^\circ$
$25^\circ\text{C}$	3,148	3,152	4,31	8,5	-6,1	-112	1,81
$20^\circ$	3,11						
$15^\circ$				3,6			
$35^\circ$					1,3		

HF, NO<sub>2</sub><sup>+</sup> (Kp)

15 " XI 1339 1967

Вдовенко В.Н., Шорников В.Д., Трофимова А.И.  
Кривохатский А.С.

Ж. неоргн. химии, 1967, 12, N10, 2756-2759

Взаимодействие между азотной и фтористо-  
богородной кислотами в водных растворах.

РНХ № 20, 1968

ЗБ50

B (P)

1968.

NO -  
2

Kebabule P.  
Arshadi St., Scarborough

J. chem. Phys., 49(2), J.  
F 817.

49 reprints.

(See F - ) T

1968

$\text{NO}_2(\text{aq})$  Tummaruori J., Lumme P.  
 $\text{Mf}$  Acta Chem. Scand., 1968, 22, 2003<sup>-11</sup>

~~1968~~ 97 Процессы  $\text{HNO}_2$  в буферных  $\text{NaNO}_2$

и  $\text{NaNO}_3$  при различных темп.

изменение концентрации процесса  
 $\text{HNO}_2$  в буферах приводит к  $\text{NaNO}_2$ ,  $\text{NaNO}_3$   
 и при различных концентрациях цинка при 15, 20, 25, 35°C  
 диспропорционирует  
 $\text{NO}_2 - \text{X}$ . Но



и изменение концентрации  
 золота влияет на концентрацию

зене під нормою бозе

при  $25^{\circ}\text{C}$  маємо:  $\text{p}K_0 = 3,138$  (3,141) -  
 $\Delta G^\circ = 4,25$  ;  $\Delta H^\circ = 2,2 \text{ ккал}$ ,  $\Delta S^\circ = -2,12 \text{ е}$

До більшості речовин нормальна  
іонізаційна енергія ( $1565 \text{ ккал}$ ) вимірює  
більше обсягу 1 але в  
нормалізається.

NO<sub>2</sub>

Payzant Y. D., et al. <sup>1971</sup>

Can. J. Chem.,

KP,

1941, 49, n20, 3308.

o Haq

(Ces. CN<sup>-</sup>)I

$\text{NO}_2^-$

XI-4588

1972

$\text{SO}_4^{2-}$

$\text{MoO}_4^{2-}$

$\text{F}^-$

$\text{Te}^{2-}$

$\text{AsO}_4^{3-}$

✓ 35537a Entrothermal capacity of gaseous ions at various temperatures. Krestov, G. A.; Krestova, N. V. (Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst., Ivanovo, USSR). *Tr. Ivanov. Khim.-Tekhnol. Inst.* 1972, 14, 65-73 (Russ). The calcn. of entropy and heat capacity of gaseous ions is discussed and the calcns. are performed for a series of 145 element cations, 10 mononuclear anions (like  $\text{F}^-$ ,  $\text{Te}^{2-}$ ,  $\text{Ro}^{2-}$ ) and 16 acid anions (like  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{MoO}_4^{2-}$ ,  $\text{AsO}_4^{3-}$ , etc.) at various temps., period in some cases reaching  $10,000^\circ\text{sk}$ .

(cp, S)

(+5)

C.I.S. 1975, dd, n6

$\text{NO}_2^-$

ommrec 9582

1972

$\text{NO}_3^-$

$\text{NaO}_2^-$

( $\text{H}_2\text{O}$ )

Pilcher G.

Comp. Analysis of Thermo-chem  
Data. 1972 Univ. Sussex Brighton  
Sussex 1972.

таблицы

$O_2^-$ ,  $NO_2^-$ ,  $NO_3^-$  ( $K_P$ )  $\bar{x} \bar{I}$  4178 1974

Burke J.D., Kerridge D.H.

Electrochim. Acta, 1974, 19, N6, 251-256/ann,  
Concerning oxygen anions in a nitrate  
melt.

PHILIPS, 1975

1570Z

Q

high-electrolyte opacities  
B, SH Ø

$\text{NO}_2^-$

Paniceia Franco.

1976

measuring  
cb. Ba

J. Chem Soc Faraday  
Trans 1, 1976, 72(7)

1512-18 (eng).

(see  $\text{NO}_3^-$ ; I)

X 6-14703

1976

$\text{NO}_2^-$

$\text{IN}^-$

$\text{NO}^-$

$\text{IN}$

$\text{HNO}$

$\Delta H_f^{\circ}$

85: 182544r Endoergic ion-molecule-collision processes of negative ions. IV. Collisions of atomic iodine(-) on nitrogen dioxide, nitrous oxide and nitric oxide. Refaei, Kamel M. A. (Phys. Dep., Cairo Univ., Cairo, Egypt). *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* 1976, 21(1-2), 21-33 (Eng). The ions  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{IN}^-$ , and  $\text{O}^-$  were formed in collisions on  $\text{NO}_2$  of  $\text{I}^-$  ions (at lab. energies of 0-100 eV) produced in resonance electron capture by  $\text{HI}$ ;  $\text{NO}^-$  ions were also formed with very low cross section. With  $\text{N}_2\text{O}$  as the target gas,  $\text{IN}^-$  and  $\text{O}^-$  were formed; with  $\text{NO}$  as the target,  $\text{NO}^-$ ,  $\text{IN}^-$ , and  $\text{O}^-$  were formed. The threshold energy ( $E_{th}$ ) for  $\text{O}^-$  prodn. from  $\text{NO}$  was consistent with the reaction  $\text{I}^- + \text{NO} \rightarrow \text{O}^- + \text{IN}$ . From the  $E_{th}$  values, the heats of formation calcd. were  $\Delta H_f = -41$ ,  $+23$ ,  $\approx +3$ ,  $+51.5$ , and  $\leq +2.5$  kcal/mole for  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{IN}^-$ ,  $\text{NO}^-$ ,  $\text{IN}$ , and  $\text{HNO}$ , resp.; the electron affinities calcd. were  $2.1$ ,  $0.8 \pm 0.2$ , and  $1.3$  eV for  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}$ , and  $\text{IN}$ , resp. The ions  $\text{NO}_2^-$  and  $\text{IN}^-$  have excited states at  $\sim 3.05$  and  $\sim 3.3$  eV above the ground state, resp.

(+3)  $\text{IN}$



C.A. 1976.85 N2Y

$\text{NO}_2^+$

1974

Rosenstock H. H. et al

J. Phys. Chem. Ref. Data,  
1974, 6. Suppl. n1, pt 273

T.g. ebba

W<sub>2</sub><sup>(a)</sup>

DFTI

~~July 38~~

Ho, Wo - tising

1977

Proc. Natl. Sci.

Counc.. Part 1 (Taiwan),

1977, 10, cop 175

(C.R.C.A., 1928, 88, N6, 42307a).

C.A. 1928, 88, N6, 42307a

~~Please see back~~  
~~31 Aug 1981~~

Kонцентрационный конденсатор  $\text{HNO}_3 = \text{H}^+ + \text{NO}_3^-$   
для измерения концентрации  
и температуры в батарее chemistry  
первой. измерение концентрации  
 $\text{NaNO}_3, \text{NaCl}, \text{NaClO}_3$ .

Для предотвращения коррозии  
измерительной ячейки = 1 измерение

$$\Delta H_{25^\circ} = 1,42 \pm 0,03 \text{ ккал}, \Delta S = -9,9 \pm 0,12 \text{ энтропия}$$

1200000

1977

(all. KOMP., geccern.)

$\text{NO}_2^-$

Wu R.L.C., Lifshitz and alii.

( $\Delta H_f$ )  
( $\delta_0$ )

In: Argonne Natl. Lab. [Rep.]  
ANL-77-21.  
ANL-77-21.  
Conf. High Temp. Sci. Open  
Cycle, Coal- Fired MHD sys-  
~~27-29.~~ 49-53

*NO<sub>2</sub>*

*1982*

5 Б873. Стандартная энталпия образования нитрит-иона в водном растворе. Ефимов М. Е., Смоляр М. И., Хренова И. В., Медведев В. А. «9 Всес. конф. по калориметрии и хим. термодинам., Тбилиси, 14—16 сент., 1982. Расширен. тез. докл.» Тбилиси, 1982, 29—31

В калориметре с изотермич. оболочкой LKB-8700 при 298 К измерены энталпии взаимодействия с р-ром  $K_2Cr_2O_7$  тв.  $K_2SO_4$ , воды и р-ра  $NaNO_2$  (в 1-й серии), а во 2-й серии — тв. KJ,  $NaNO_3$  и р-ра  $H_2SO_4$ . Конц-ии в-в были подобраны таким образом, чтобы конечные состояния р-ров были одинаковыми. Вычислена энталпия суммарной р-ции  $NaNO_2$  (р-р) +  $J_2$  (кр.) +  $+ K_2SO_4$  (кр.) +  $H_2O$  (ж.) =  $NaNO_3$  (кр.) + 2 KJ (кр.) +  $+ H_2SO_4$  (р-р), равная  $52,41 \pm 0,43$  кДж/моль. Отмечено, что получающиеся кристаллы иода вступают в неизвестную медленную экзотермич. р-цию. С использованием лит. данных вычислена станд. энталпия образования иона  $NO_2^-$  (р-р,  $\infty H_2O$ , 298 К), равная  $-100,31 \pm 0,69$  кДж/моль.

П. М. Чукуров

*X. 1983, 19, N5*

$\text{NO}_2^-$  (aq)      On. 17034, 16994 1983

100: 57572a The standard molar enthalpy of formation of nitrite ion in aqueous solution. Efimov, M. E.; Medvedev, V. A.; Smoljar, M. I.; Khrenova, I. V. (Inst. High Temp., 127412 Moscow, USSR). *J. Chem. Thermodyn.* 1983, 15(7), 603-7 (Eng). The heats of oxidn. of  $\text{NaNO}_2$ (aq) and  $\text{KI}$ (s) by  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  in 1 mol/dm<sup>3</sup>  $\text{H}_2\text{SO}_4$  soln. were measured in a 0.1 dm<sup>3</sup> reaction vessel of an isoperibol calorimeter. The heat of the reaction at 298.15 K was 52.06 kJ/mol, which leads to the heat of formation ( $\text{NO}_2^-$ , aq. 298.15 K) of 100.0 kJ/mol.

$(\Delta_f H)$

c.A.1984, 100, N8

1983

NO<sub>2</sub>

16 Б799. Равновесие нитрат $\rightleftharpoons$ нитрит в расплавах NaNO<sub>3</sub>—KNO<sub>3</sub>. Nitrate/nitrite chemistry in NaNO<sub>3</sub>—KNO<sub>3</sub> melts. Nissen D. A., Meeker D. E. «Inorg. Chem.», 1983, 22, № 5, 716—721 (англ.).

В интервале 500—620° С исследовано равновесие процесса  $\text{NO}_3^- \rightleftharpoons \text{NO}_2^- + 1/2\text{O}_2$  (1), протекающего в эквимол. расплаве KNO<sub>3</sub>—NaNO<sub>3</sub>. Равновесные конц-ии нитрит-иона определяли цериметрич. Тт проб расплава. Установлено, что в этом интервале т-р никаких других анионов в расплаве нет. Величины константы равновесия ( $K$ ) процесса (1) получены равными 100,0; 40,3; 18,0 и 12,5 при 500, 550, 600 и 620° С соотв. Изучено влияние парц. давл. O<sub>2</sub> и продолжительности выдержки расплава на состав продуктов, и сделан вывод, что процесс (1) является преобладающим. Т-рная зависимость энергии Гиббса представлена ур-нием  $\Delta G(\text{кал/моль}) = -23\,000 + 20,6\ T$ . Исследована кинетика окисления нит-

Kp,  
ΔG

X. 1983, 19, N16

рит-иона кислородом и показано, что оно описывается  
р-цией 2-го порядка. Определены константы скорости  
процесса (1) и обратного ему и рассчитана энергия ак-  
тивации окисления  $\text{NO}_2^-$ , равная 26,4 ккал/моль. Отме-  
чено, что в интервале 500—600° С термич. разложение  
нитратного расплава по схеме (1) незначительно.

П. М. Чукуроев

1983

 $\text{NO}_2^-$ ,  
 $\text{NO}_3^-$ 

газофазная  
сolvатация  
этилнитратом

24 Б895. Газофазная сольватация  $\text{NO}_2^-$  и  $\text{NO}_3^-$  этилнитратом. Gas-phase solvation of  $\text{NO}_2^-$  and  $\text{NO}_3^-$  by ethyl nitrate. Włodek S., Łuczyński Z., Winsel H. «Int. J. Mass Spectrom. and Ion Phys.», 1983, 52, № 2—3, 149—163 (англ.)

В масс-спектрометре высокого давл. в интервале т-р 200—380 К и давл. 0,5—2 Торр при длине ионизац. камеры 4—15 мм изучены газофазные р-ции  $\text{NO}_2^- \cdot (\text{EtONO}_2)_{n-1} + \text{EtONO}_2 = \text{NO}_2^- \cdot (\text{EtONO}_2)_n$  (1) ( $n=1—3$ ) и  $\text{NO}_3^- \cdot (\text{EtONO}_2)_{n-1} + \text{EtONO}_2 = \text{NO}_3^- \cdot (\text{EtONO}_2)_n$  (2) ( $n=1, 2$ ). Установлено, что в данных эксперим. условиях при давл.  $>1$  Торр достигается термодинамич. равновесие, исключая р-цию (1) при  $n=1$ . Величина  $\Delta H$  этой р-ции была определена косвенным путем из  $\Delta H$  р-ции  $\text{NO}_2^- \cdot \text{EtONO}_2 + \text{SO}_2 = \text{NO}_2^- \cdot \text{SO}_2 + \text{EtONO}_2$  (3). Значения  $-\Delta G^\circ$  (298 К) и  $-\Delta H^\circ$  р-ций составили: (1),  $n=1$  —,  $20,9 \pm 1,0$  ккал/моль,  $24,7 \pm 0,35$  и  $8,5 \pm 0,5$ , 3  $3,1 \pm 0,5$  и  $7,3 \pm 0,7$ ; (2),  $n=1$   $7,6 \pm 0,5$  и  $17,2 \pm 0,6$ , 2  $4,6 \pm 0,7$  и  $7,2 \pm 0,5$ ; (3)  $4,5 \pm 0,1$  и  $5,0 \pm 0,8$ . Полуэмпирич. методом ЧПДП МО с экспе-

X. 1983, 19, № 24

рим. геометрией  $\text{NO}_2^-$  и  $\text{NO}^-$  и оптимизированной геометрией  $\text{EtONO}_2$  рассчитаны возможные структуры и энергии связей сольватированных ионов. Проведено обсуждение термодинамич. данных, исходя из устойчивости различных структур.

Р. Г. Сагитов

M<sub>2</sub><sup>-</sup> [om. 23459] 1984

Marcus Y., Loewensches S.,

S; Ann rept. Progress Chemistry,  
Section C, Physical Che-  
mistry, 1984, C81, 81-135,  
Chem. Soc. (London).

Mit [om. 23459] 1984

Marcus Y., Loewenscheess H.,  
S; Ann. rept. Progress Chemistry,  
Section C, Physical Chemi-  
stry, 1984, C81, 81-135;  
Chem. Soc. (London).

$NO_2(2)$  1984

Menoux V., Le Doucen R.,  
et al.

( $\Delta_f H$ ) Can. J. Phys. 1984, 62(4),  
322-9.

(cel.  $(NO_2)(2)$ ;  $\bar{I}$ )

$NO_2^{-}(z)$

DM. 19437 |

1984

Wecker D., Schindler R.N.,

Z. Naturforsch., 1984,  
A39, N6, 542-547.

AsH;

№<sub>2</sub>

[Om. 24574]

1986

Луце Г.А., Архипов И.В.  
"gp.",

ХР;

21. 04. 1986  
60, №8, 1904-1908.

NO<sub>x</sub><sup>-</sup> JOM. 25/69/ 1986

Pearson R. G.,

D<sub>f</sub>H,  
Ae;

J. Amer. Chem. Soc.,  
1986, 108, N20, 6109 -  
- 6114.

$\text{NO}_2^-$

1987

Iffert R., Zug R.

et al., Theor. Chim. Acta, 1987,  
 $\Delta_f H$ ; 72, N5-6, 373-378.

(Cal.  $\text{CH}_2^-$ ; III)

NO<sub>2</sub><sup>-</sup> (M: 30.968) 1988

Ervin Kull, Mo J., et al.,

$\Delta_f H^\circ$  J. Phys. Chem. 1988, 92,  
N 19, 5405-5412.

No: (om 36 660) 1992

Yu D., Rauk A., et al;

mesoxum. g. Phys. Chem. 1992,  
(Hf, A) 96, 6038-6038.

$\text{NO}_2^+$

1995

123: 43352s Raman spectroscopic study of nitronium ion formation in mixtures of nitric acid, sulfuric acid and water. Edwards, Howell G. M.; Turner, James M. C.; Fawcett, Victor (Chem. Chem. Technology, Univ. Bradford, West Yorkshire, UK BD7 1DP). *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 1995, 91(10), 1439-43 (Eng). Quant. Raman spectroscopic measurements of the intensity of the v(NO) sym. stretching band of  $\text{NO}_2^+$  in aq. solns. of nitric and sulfuric acid mixts. have been carried out over the temp. range 293-313 K. From the spectroscopic data it was found that the  $\text{NO}_2^+$  species concn. decreased with an increase in temp. Equil. consts. for the reaction  $\text{HNO}_3 + 2\text{H}_2\text{SO}_4 \rightleftharpoons \text{NO}_2^+ + \text{H}_3\text{O}^+ + 2\text{HSO}_4^-$  were detd. at 293 and 313 K and the av. enthalpy of  $\text{NO}_2^+$  formation was found to be  $\Delta H = -25 \pm 5 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

(A/H)

C.A. 1995, 123, N4

$\text{NO}_2^-$

1996

Marciszak M.,  
Koppenol W. H.

(A. f. H) Thermochem. Acta  
1996, 273, 11-15.

(ccer.  $\text{NO}_3^-$ ; I)

2003

F: HO<sub>2</sub>NO HONO<sub>2</sub>

P: 3

03.12-19Б1.19. Структура и  
фотоэлектронная спектроскопия HONO[2]  
и HOONO / Pei Ke-Mei, Li Yi-Min, Kan  
Rui-Feng, Luo Xiao-Lin, Li Hai-Yang // Wuli  
huaxue xuebao = Acta Phys.-Chim. Sin. -  
2003. - 19, N 1. - C. 55-59. - Кит.; рез.  
англ.

Равновесная структура, колебательные частоты и энергии HONO[2] (I) и конформеров HOONO (II) и HOONO{+} исследованы методом теории функционала плотности в приближении B3LYP/6-311G(d). Для двух последних систем рассчитаны

кривые потенциальной энергии вращения относительно хим. связей O-O. Результаты расчета использованы для анализа активных колебательных мод в фотоэлектронных спектрах I и II. Библ. 14.

F: NO<sub>2</sub>

P: 3

01.13-19Б1.158. Вращательный анализ пяти новых электронно-колебательных полос NO[2] в области 5050-5200 Å. The rotational analysis of the five new vibronic bands of NO[2] in the range 5050-5200 Å / Zhifeng Cui, Dong Chen, Erying Feng, Xuehang Ji, Tongxing Lu, Shikang Zhou, Xuechu Li // Spectrosc. Lett. - 2000. - 33, N 5. - C. 743-753. - Англ.

---

С разрешением 0,01 Å и точностью 0,009 Å измерена и проанализирована вращательная структура пяти новых

вибронных полос диоксида азота в области 5050-5200 Å. Регистрация велась по спектру возбуждения флуоресценции при комнатной температуре. Найдены положения начал полос, рассчитаны вращательные постоянные и постоянные спин-вращательного взаимодействия. Показано, что возбужденное состояние A{2}B[2] сильно возмущено высоколежащими колебательными уровнями основного состояния, что является основной причиной сложной структуры спектра NO[2] в видимой области.