Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Matrix infrared spectra and ab initio calculations of the nitrous acid complexes with nitrogen monoxide.

Autorzy

Zofia Mielke

Zdzisław Latajka

Adriana Olbert-Majkut

Robert Wieczorek

Rok wydania

2000

Czasopismo

Journal of Physical Chemistry A

Numer woluminu

104

Strony

3764-3769

DOI

10.1021/jp993889i

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Complexes between trans and cis isomers of nitrous acid and nitrogen monoxide have been isolated in argon matrices and studied using FTIR spectroscopy and ab initio calculations at the ROMP2 level. The calculations indicate formation of four hydrogen-bonded complexes with *trans*- or *cis*-HONO isomer bound to nitrogen or oxygen atoms of NO molecule. Comparison of the calculated frequencies with the frequencies of the complexes trapped in solid argon proved that the more stable ON···HONO trans and ON···HONO cis complexes with an acid molecule attached to nitrogen atom are trapped in the matrix.

Słowa kluczowe

Molecular structure, Molecules, Monomers, Nitrogen, Oscillation

Adres publiczny

https://doi.org/10.1021/jp993889i

Strona internetowa wydawcy

https://www.acs.org/content/acs/en.html

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-04 04:59:16

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/qsKNpBO.