

1967-1969



NH_3

Beyer K. D., Welge K. H. 1967

Z. Naturforsch., 22a, N 8, 1161.

фотодиссоциация молекул
 H_2 , H_2O и NH_3 в далекой ва-
куумной УФ-области с об-
разованием электроно-
возбужденных продуктов рас-

пага. II..

(см. H_2) III

1967

NH₃

9 Б219. Интенсивности чисто вращательных полос поглощения и дисперсия аммиака в далекой инфракрасной области. Bradley Eugene B., Jones Ernest A. Pure-rotation band absorption intensities and dispersion of ammonia in the far infrared. «Mater. Sci. and Engng», 1967, 2, № 2, 61—76 (англ.; рез. франц., нем.)

Для области $78-400 \text{ см}^{-1}$ вычислены показатели преломления аммиака на основании данных по чисто вращательным спектрам, соответствующим переходам между чисто вращательными уровнями энергии молекулы при значениях квантовых чисел суммарного углового момента от $J=4$ до $J=15$. Расчет показывает, что

X. 1968.9

вклад от вращения постоянного электр. диполя в величину показателя преломления весьма существен; вопрос о том, в каком случае один только электронный вклад в показатель преломления полярной молекулы в дальней ИК-области может считаться хорошим приближением, требует знания экспериментально измеренных интенсивностей полос в чисто вращательных спектрах.

Резюме

$C_2H_5NH_2^+(J)$

1967
VII 3998

A.P. ($C_2H_3^+$; $C_2H_5^+$; CNH_4^+ ;

NH_4^+ ; CNH_3^+ ; CNH_2^+ ; NH_3^+)

$\Delta H_f(C_2NH_6^+)$; $D(C-H)$ & $D(N-H)$ (from
 $C_2NH_6^+$); $\Delta H_f[C(CNH_4^+)]$; ($C_2H_5^+$)
(CNH_3)⁺

Collin J.E., Franckin M.J.,
Hyatt D., Bull. Soc. Roy
Sci Liege, 1967, 36, N5-6, 318-27

W M

2

PX 1968195125

NH_3

Dixon R. N.

1967

Moist. Phys., 12, n 1, 83-90.

Приближенные расчеты по
методу молекулярных
орбиталей с самосогласова-
нием для электронных
состояний валентных обо-
лочек. (см. Сл.)

NH_3

ВФ-ХИИ-1759

1967

(12 Д202.) Потенциалы ионизации аммиака.
Frost D. C., McDowell C. A., Vroom D. A. Ionization potentials of ammonia. «Canad. J. Chem.», 1967, 45, № 12, 1343—1345 (англ.)

(7) С помощью сферич. анализатора зарегистрировано распределение по энергиям фотоэлектронов, образующихся при ионизации NH_3 под действием монохроматич. света λ 584 Å (21,21 эв). Обнаружены 2 порога ионизации при 10,35 и 14,95 эв с отношением сечений σ в области порогов 1:7,1 (σ равны соответственно $1,8 \cdot 10^{-18}$ и $1,27 \cdot 10^{-17}$ см²). 1-й потенциал ионизации (ПИ) соответствует ионизации несвязывающей молекулярной орбитали $3a_1$ с образованием иона NH_3^+ , по-видимому,

09.1967.12

плоской структуры типа ${}^2A_2''$ (на это указывают низкое значение σ и расплывчивость порога, обусловленная малой вероятностью возбуждения 1-го колебательного уровня иона). В области выше 2-го ПИ σ плавно растет при увеличении энергии электронов, что указывает на ионизацию основной связывающей орбитали. Это согласуется с отнесением 2-го ПИ процессу $(a_1)^2(e)^4(a_1^*)^2$, ${}^1A_1(C_{3v}) \rightarrow (a_1)^2(e)^3(a_1^*)^2$, ${}^2E(C_{3v})$. Полученные результаты подтверждают расчеты молекулы NH_3 методами теории МО ЛКАО.

В. Е. Скурат

NH₃

XIII-1759-BP 1967

(y)

36421k Ionization potentials of ammonia. D. C. Frost, C. A. McDowell, and D. A. Vroom (Univ. British Columbia, Vancouver, Can.). *Can. J. Chem.* 45(12), 1343-75(1967) (Eng). The kinetic energy spectrum of photoelectrons ejected from NH₃ by monochromatic 584 Å. (21.21 ev.) radiation was detd. by using a spherical grid energy analyzer. Ionization potentials of 10.35 and 14.95 ev. were deduced from the spectrum, and the relative transition probabilities to the ionic states were measured. These exptl. results are discussed in terms of the various M.O. theoretical treatments of the electronic structure of the NH₃ mol. 20 references. RCCM

C. A. 1967. 67.8

NH_3

Frost A.A.,
Prentice B.H.,
Rouse R.A.A.!

1947

полные
жесткие;
гипер-
связей;

J. Amer. Soc., 89, N12,
3064.

Простейшая модель мо-
лекулярной структуры,
базирующаяся на "рас-
пространенных" локаль-

NH_3

1987
4 Д161. Дифракция электронов на газообразном аммиаке. Эффект химической связи. Gervais Annick, Rouault Marcel. Diffraction des électrons par le gaz ammoniac. Effet de liaison chimique. «C. r. Acad. sci.», 1967, 265, № 10, В 602—В 604 (франц.)

Структура
На молекулярном пучке NH_3 с интенсивностью 10^{19} молекул/сек исследована дифракция электронов с энергией 40 и 50 кэВ. Полученные графики зависимости эффективного диффер. сечения рассеяния от угла сравниваются с результатами теоретич. расчетов на основании 2 моделей молекулы NH_3 : 1) модель Дебая — Эренфеста, согласно которой молекула представляет собой набор отдельных атомов, причем ядро каждого атома фиксировано в положении равновесия; 2) молекула описывается на основании теории МО ЛКАО. Показано, что модель 2), учитывающая наличие химич. связи между атомами, лучше описывает эксперим. данные, чем модель 1). В. Е. Скурат

09.1968. 4

NH_3
кв.-мех.
расчет

Harrison J. F.
J. Chem. Phys.
47, N 8, 2990

1967

Нек-рые св-ва H_2O и NH_3
в одноэлектронном
приближении.

(см. H_2O) III

NH_3^{2+}

Foshi Bk.

1967

J. Chem. Phys., 46, n. 3, 875-87

7

Вор-М2298-IV

Исследование BH_3^- , BH_3 ,
 CH_3^+ , NH_3^{2+} и OH_3^{3+} в одно-
центрированном приближении
методом самосогласован-
ного поля

(см. BH_3^{III})

14, 15 NH_3

Koeppe H. W., et al. 1967
J. Amer. Chem. Soc., 89,
N 14, 3396.

Барьеры ионизации и
связанных молекул - H_2 и
 H_2 и родственных моле-
кул молекулы, содержа-
щие группу H_2 . (см. CH_3^-)

M 2574

1967

расчет спектров, Li^+ (HNO , HCF , H_2CO , H_2C_2 , NH_3)

Krofo H.W., Santry D.P.

J.Chem. phys., 1967, 47, N 2, 792-97

CNDO-molecular-orbital theory of molecular spectra I. The virtual-orbital approximation to excited states.

PJF, 1968, 2D142

J.

602

614000

HN_3 ,
 DN_3

1967

ИК-спектр

9 Д217. ИК-спектр HN_3 и DN_3 : распределение кориолисова взаимодействия между деформационными колебаниями. Levine D. M., Dows David A. Infrared spectrum of HN_3 and DN_3 : assignment of the Coriolis-coupled bending vibrations. «J. Chem. Phys.», 1967, 46, № 3, 1168—1172 (англ.)

Исследован ИК-колебательно-вращательный спектр газообразных и твердых HN_3 и DN_3 в области $400—1000 \text{ см}^{-1}$. Выступающие Q-ветви отнесены к трем колебательным переходам, связанным с кориолисовым взаимодействием. Начало полос и константы кориолисова взаимодействия определены из анализа наблюдаемых частот для HN_3 : $\nu_3=1263,7$; $\nu_5=534,2$; $\nu_6=607,0$; $\zeta_{36}^z=-0,31$; $\zeta_{56}^z=-0,93 \pm 0,02$; для DN_3 : $\nu_4=953,8$; $\nu_5=492,1$; $\nu_6=588,4$; $\zeta_{46}^z=-0,41$; $\zeta_{56}^z=-0,82 \pm 0,02$.

И. Галактионов

09. 1967. 98

NH₃

Lide D.R.

1967

Phys.Lett., 24A, 599

Interpretation of the far infrared
laser oscillation in ammonia.

1987

NH_3

Melrose M. P., Parr R. G.

Theoret. chim. acta, 8, 2,
150.

V_0

Некоторые вычисления
с применением интеграль-
ной теоремы Гельман-
Рейнман-на для переки-
си водо-рода и NH_3 .
III (см. H_2O_2)

11-1294

NH_3

XIII - 411

1967

D4 B96. Поглощение аммиака в ультрафиолетовой области при высоких температурах за ударной волной. Menon P. G., Michel K. W. Ultraviolet absorption of ammonia at high temperatures behind shock waves. «J. Phys. Chem.», 1967, 71, № 10, 3280—3284 (англ.)

Исследовано поглощение NH_3 за ударной волной при т-рах 500—2600° К при длинах волн 2225, 2300 и 2400 Å. С ростом т-ры поглощение при этих длинах волн растет. Поглощение в исследованной области авторы связывают с переходом $2p_z \rightarrow 3s$ для колебательных уровней $v_2'' = 1, 2, 3, 4$ и 5 (2212, 2245, 2287, 2335 и 2390 Å). Величины энергии этих переходов, полученные из спектроскопических данных, и величины E , полученные из бoльцмановской зависимости для поглощения при исследованных длинах волн, хорошо согласуются друг с другом. Обнаружено поглощение NH_3 за ударной волной при

(способ
измерения
УФ-поглощ.
в уд. трубах)

X. 1968. 4



3360 А, что указывает на образование радикалов NH при разложении NH_3 в ударной трубе. Описан способ измерения УФ-поглощения в ударных трубах.

Ю. В. Кисниц

NH₃ (un. used.)

XIII 1753 1964

Nelson J. P.,
Dissert. Abstr., 1964, B27
(8), 2641

10

CA 1964

NH₃ (unrec. no.) 13

1964

XIII 475

Oka Takeshi

J. Chem. Phys., 1964, 41, N/2, 5410-
5426 (av.)

Vibration-rotation interaction
in symmetric-top molecules
and the splitting between
A₁ and A₂ levels.

Proc. Roy. Soc., 1968, B2142

ESTD. OPTICAL

NH₃

(31)

1067
1) Б1331. Фотодиссоциация аммиака в вакуумной ультрафиолетовой области излучения. Okabe H., Lenzi M. Photodissociation of NH₃ in the vacuum ultraviolet. «J. Chem. Phys.», 1967, 47, № 12, 5241—5246 (англ.)

Исследована фотодиссоциация NH₃ с образованием радикалов в электронно-возбужденном состоянии: NH₃ → NH₂ ($\tilde{A}^2A_1$) + H (1) и NH₃ → NH ($c^1\pi$) + H₂ (2). Измерена интенсивность флуоресценции указанных радикалов как функция λ падающего света. Полученные кривые флуоресценции сравнивают со спектром поглощения NH₃. Показано, что процесс (1) может быть связан с полосами $\tilde{B}^1E''$ (1165 Å), $D'A_2''$ (1434 Å), $\tilde{E}'A_2''$ (1330 Å), 1286 Å и континуумом 1250—1600 Å, а

ж. 1969. 1

+2



процесс (2) — с континуумом 1250—1600 и < 1250 А. Пороговое значение λ для (2) равно 1325 ± 7 А. Электронная энергия 1-го синглетного состояния $\text{NH}(a'\Delta)$ по отношению к основному триплетному состоянию $\text{X}^3\Sigma^-$ составляет $\leq 1,6 \pm 0,1$ эв. Электронная энергия $\text{NH}(c'\pi)$ по отношению к $a'\Delta$ составляет 3,813 эв. Рассматривают также др. первичные процессы при фотодиссоциации NH_3 . При $\lambda < 1200$ А наряду с (2) становится доминирующим процесс $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + e$. Резюме

11 Д560. Фотодиссоциация NH_3 в вакуумной УФ-об-
ласти. Okabe H., Lenzi M. Photodissociation of NH_3
in the vacuum ultraviolet. «J. Chem. Phys.», 1967, 47,
№ 12, 5241—5246 (англ.)

Исследованы фотодиссоциационные процессы (ФП)
 NH_3 в вакуумной УФ-области, сопровождающиеся обра-
зованием электронновозбужденных радикалов: $\text{NH}_3 \rightarrow$
 $\rightarrow \text{NH}_2 A^2 A_1 + \text{H}$ (1); $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH} c^1 \Pi + \text{H}_2$ (2). Интенсивность
флуоресценции радикалов $\text{NH}_2 A^2 A_1$ и $\text{NH} c^1 \Pi$, наблюдае-
мой в двух различных областях спектра 4000—6000 Å

при 3240 Å, соответственно, измерена в ф-ции от длины
волны возбуждающего света с разрешением 7 Å. Спект-
ры флуоресценции радикалов сопоставлены со спектром
поглощения NH_3 (1050—1650 Å). Предположено, что
ФП (1) связан с $B^1 E''$ (полосы 1665 Å), $D^1 A_2''$ (1434 Å),
 $E^1 A_2''$ (1330 Å), с полосами 1286 Å и континуумом 1250—
1600 Å. Процесс (2) связан с поглощением в области
континуума 1250—1600 Å и ниже 1250 Å. Определены по-
роговые значения (ПЗ) длин волн возбуждения, ниже

9.1968. 118

+2



которых рассматриваемые процессы энергетически воз-
 можны: для ФП (1) $\lambda_{\text{порог}}^{(1)} = 2175 \text{ \AA}$, для ФП (2)
 $\lambda_{\text{порог}}^{(2)} = 1325 \pm 7 \text{ \AA}$. Электронная энергия первого син-
 глетного состояния $\text{NH } a^1\Delta$ относительно энергии основ-
 ного триплетного состояния $X^3\Sigma^-$ ($1,6 \pm 0,1 \text{ эв}$) определе-
 на на основании измерений ПЗ энергии $h\nu_0$ для возник-
 новения излучения $\text{NHc}^1\Pi \rightarrow a^1\Delta$ теплоты реакции ΔH°_f
 для $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NHX}^3\Sigma^- + \text{H}_2$ и значения энергии 0—0 пере-
 хода $\text{NHc}^1\Pi - a^1\Delta$ ($3,813 \text{ эв}$). Установлена связь всех
 наблюдаемых при диссоциации NH_3 первичных ФП с по-
 лосами поглощения NH_3 . Показано, что при длинах волн
 возбуждающего света короче $1200 \text{ \AA}$ преобладающими в
 системе становятся ионизационные процессы типа $\text{NH}_3 \rightarrow$
 $\rightarrow \text{NH}_3^+ + e$ и (2). Библ. 22.

А. М. М.

NH_3

Ritchie C.D., King H.F.

1967

J.Chem.Phys., 47, 564. ~ 2.

Gaussian basis SCF calculation
for OH^- , H_2O , NH_3 and CH_4 .

(see. OH^-) III

NH₃(bp-pe)

PH₃(bp-pe)

Uzlep. Wzrost.

XIII - 924

1967

73670g Measurements of absolute infrared intensities in solution and calculations of dipole moments. III. Ammonia, phosphene. Marisa Scrocco and Bruno De Luca (Univ. Rome). *Ric. Sci.* 37(3), 250-7(1967)(Ital). Abs. intensities of the fundamentals ν_1 , ν_2 , ν_3 , and ν_4 were measured from spectra of NH₃ and PH₃ in CCl₄ and MeCN. For NH₃, overlap of ν_1 and ν_3 in both solvents necessitated division of the total area by using the criteria of McKean and Schatz. In MeCN, ν_2 was obscured by the solvent absorption. For PH₃, overlap of ν_1 and ν_3 was such that only approx. values of the intensities were obtained. The contributions to the total mol. dipole moment of the bond moments μ_B and the lone pair moment μ_{lp} were calcd. by using exptl. values of the mol. dipole moment and its variation $\partial u_{tot}/\partial S_2$ with the symmetry bending coordinate. The latter is obtained from the intensity of the totally sym. bending vibration.

C.A. 1968 · 68 · 16



The directions of the bond orbitals do not coincide with the bond direction and $\partial\beta'/\partial\beta_0$ measures orbital following. (β' is the angle between a bond orbital and bond direction; β_0 is the angle between bond direction and z axis). It is assigned values 0.75, 0.85, and 1.0 α , the bond angle, is $90-120^\circ$ for NH_3 and $70-120^\circ$ for PH_3 . $\partial\mu/\partial r$ for NH_3 in the gas phase differs considerably for the A_1 and E class vibrations, and to a lesser extent in soln. This is probably due to an inductive effect of the 3 bond moments on the lone pair which is more polarizable along the symmetry axis. For NH_3 in CCl_4 , the dipole moment in benzene was used. $\partial\mu_{\text{tot}}/\partial S_2$ is assigned a neg. sign as being most consistent with the results obtained. For NH_3 , neither μ_B nor μ_{lp} is very sensitive to β' or $\partial\beta'/\partial\beta_0$. For PH_3 , β' has more influence on the moments. Values μ_B are smaller than μ_{lp} .

Michel J. M. Campbell

6114 413 11 5 11967
Cyanogen (CO₂, H₂O, HCN,
NH₃, BF₃, CH₄, C₂H₂,
C₂H₄, CHF₃, NO, CO)

Segal G. A., Klein M. L.

J. Chem. Phys, 1967, 47, 10, 4236 -
Calculation of infrared ^{4240 (cm)}
intensities by the $\bar{c}^2/\bar{D}$ method.
B. Baxley et al.

Physica, 1968, 155: 152

NH_3

Strey G.

1967

J. molec. Spectr., 24, 87

Экстремальные свойства
силовых постоянных.
ч. I.



(см. H_2O) III

XIII - 936

1967

V_i (YX_3 , i.e. $Y = \underline{N, P, As, Sb, Bi}$,
 $X = \underline{H, F, Cl}$)

Smit W. M. A., Maas J. H.
Vander, Spectrochim acta,
1964, A23, N 8, 2453-55

P.V 1968

etc opus.

10

80315-1553

Ph, Ca

NH_3 (мет.
исслед.)

1967

XIII 475

Oka Takashi.

Vibration-rotation interaction in symmetric top molecules and the splitting between A_1 and A_2 levels.

"J.Chem.Phys.", 1967, 47, 12, 5416

5426 (англ.)

ES: OCHN

10

14

В зурбач

ар

667

675

682

БВНННН

1967

W113

(Noseg. uora)

73819n Effect of modulation of microwave resonance absorptions by saturation. T. Toerring and E. Schnabel (Freie Univ., Berlin). *Z. Phys.* 204(2), 198-204(1967)(Ger). Equations are developed to show that satn. modulation is expected to have about the same theoretical limiting sensitivity (without some of the disadvantages) as Stark-effect modulation. Exptl. results confirm theory. For the absorption line of the inversion spectrum of $^{14}\text{NH}_3$, the absorption coeff. is $2.8 \times 10^{-4}/\text{cm}$.

F. G. Norris

C. A. 1968. 68. 16

МНЗ (суд. пос., Терноп. обл.) 1967

Умкано А.А.,

ЮФ

ХІІІ 1012
5

Холодильная установка Терноп. 1967,
№ 5, 80-3.

Распознавание ошибок, квадратного
модульного взаимодвижения
при работе ф. н. Терноп. обл.
ноябрь 74 год. С.А. 1968, 62, 120, 2104.

NH_3 [BOP-112002-IV] White K.F.,
Cook R. Y.

1917

J. Chem. Phys., 46, n1, 143.

Вращательные спектры
силь. спектры HNCO , DNCO ,
 HN_3 в миллиметровой
диапазоне: изменение ди-
польного момента с из-

NH_3

Yonezawa T., Yama- 1947
guchi K., Kato H.

Bull. Chem. Soc. Japan, 40,
N 3, 536.

Полупроводниковое рассеяние
вещи системы Васильева
Электрон - нов методом

самостоятельное мо-
менту. орбитальной. 7. Ма-
лые измерения.

(см. Ст. 4) III

XIII-A-BP

1968

NH₃

(40810r) SCF [self-consistent-field] wavefunctions for the ammonia molecule. Potential-energy surface and vibrational force constants. Body, R. G.; McClure, Donald S.; Clementi, Enrico (Univ. of Chicago, Chicago, Ill.). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(11), 4916-24 (Eng). S.C.F. wavefunctions have been calcd. for the NH₃ mol. in a no. of geometrical configurations by using a basis set of Gaussian *s*- and *p*-type functions. The equil. geometry was $R_{\text{NH}}^{\circ} = 0.996 \text{ \AA}$. and $\alpha_{\text{HNH}}^{\circ} = 114.6^{\circ}$, the total energy was -56.18517 hartree and the inversion barrier was 0.00127 hartree. Energies for configurations without C_{3v} symmetry were fitted to an assumed potential function which included all second- and third-degree terms, and the vibrational force consts. were detd. The addn. of *d*-type functions to the basis set gave much better results for the equil. geometry and inversion barrier. With this basis set, the equil. geometry was $R_{\text{NH}}^{\circ} = 1.102 \text{ \AA}$. and $\alpha_{\text{HNH}}^{\circ} = 106.2^{\circ}$, the total energy was -56.19821 and the inversion barrier was 0.0118 hartree. RCJQ

Kb. see.
paceru

C.A. 1969. 70. 10

NH_3

XIII - 61-ВФ · 1968

кв.-мех.

расчет,

стат. постр.
структура

5 Д97. Самосогласованные волновые функции молекулы NH_3 . Поверхность потенциальной энергии и колебательные силовые постоянные. Body R. G., McClure Donald S., Clementi Enrico. SCF wavefunctions for the NH_3 molecule. Potential-energy surface and vibrational force constants. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 11, 4916—4924 (англ.)

Для ряда геометрич. конфигураций молекулы NH_3 с использованием базисного набора из гауссовских ф-ций s- и p-типа рассчитаны самосогласованные волн. ф-ции. Равновесная длина связи N—H найдена равной 0,996 Å, угол H—N—H 114,6°, полная энергия —56,18517 хартри и барьер инверсии 0,00127 хартри. С предложенной

Ф. 1969. 52

потенц. кривой сопоставлены энергии конфигураций, не обладающих симметрией C_{3v} , и определены колебательные силовые постоянные. Дополнительное включение в базисный набор ф-ций d -типа приводит к более хорошим результатам: равновесная длина связи N—H равна 1.102 Å, угол H—N—H 106,2°, полная энергия —56,19821 хартри и барьер инверсии 0,0118 хартри.

Резюме

1968

XI-112

NH₃ (photoionized)
H₂O (photoionized)

1172011a) ion-molecule reactions of NH₃⁺ by photoionization. W. A. Chupka and M. E. Russell (Argonne Natl. Lab., Argonne, Ill.). *J. Chem. Phys.* 48(4), 1527-33(1968)(Eng). Photoionization-efficiency curves were measured for NH₃⁺, NH₄⁺, and H₃O⁺ ions in NH₃ gas and in gaseous mixts. of NH₃ and H₂O. The results are interpreted to det. how the relative reaction cross section depends on the vibrational energy of the NH₃⁺ ion for the reactions NH₃⁺ + NH₃ → NH₄⁺ + NH₂ (1) and NH₃⁺ + H₂O → NH₄⁺ + OH (2). The cross section for reaction (1) decreases with increasing vibrational energy while that for reaction (2) is nearly independent of vibrational energy. The results are discussed in terms of the formation of an intermediate complex and in terms of stripping models. The upper limit of the proton affinity was detd. to be ≥ 8.54 ev. for NH₃ and ≥ 7.0 ev. for H₂O.
RCSQ

(+Luf)

C.A. 1968. 68. 26

X

NH_3

сродство
к протону

5 Б1110. Изучение ионно-молекулярных реакций NH_3^+ с помощью фотоионизации, Chupka W. A., Russell M. E. Ion—molecule reactions of NH_3^+ by photoionization. «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 4, 1527—1533 (англ.)

1968

На масс-спектрометре с ионизацией монохроматическим светом получены кривые эффективности ионизации для ионов NH_3^+ , NH_4^+ и H_3O^+ , образованных в NH_3 или его смесях с H_2O . На основании этих данных найдены зависимости сечений σ ионно-молекулярных реакций $\text{NH}_3^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{NH}_2$ (1) и $\text{NH}_3^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{OH}$ (2) от энергии колебательного возбуждения E_v иона NH_3^+ . Для реакции (1) σ уменьшается с ростом E_v , а для реакции (2) практически не зависит от E_v . Это различие может объясняться тем, что реакция (1) протекает по механизму образования промежуточного комплекса, а реакция (2) — по механизму переноса протона без образования комплекса. Сделаны оценки сродства к протону для NH_3 ($\geq 8,54$ эв) и H_2O ($\geq 7,0$ эв). А. М.

+1

х. 1969. 5



NH_3

спектр
м.п.

5 Д340. Вращательно-инверсионный спектр аммиака.
Dowling Jerome M. The rotation-inversion spectrum
of ammonia. «J. Moléc. Spectrosc.», 1968, 27, № 1—4,
527—538 (англ.)

По ИК-спектрам поглощения ($35\text{--}240\text{ см}^{-1}$) при разрешении $\sim 0,3\text{ см}^{-1}$ исследованы вращательно-инверсионные переходы в молекуле аммиака при давл. $6,0\text{--}15,5\text{ мм рт. ст.}$ Отмечено значительное К-расщепление, главным образом, вследствие центробежного искажения молекулы и обнаружено много линий одиночных переходов. Приведены рассчитанные и экспериментальные частоты вращательно-инверсионного спектра NH_3 для вращательных квантовых чисел J до 11. По неперекрывающимся разрешенным линиям выполнен вращательный анализ. Приведена ф-ла для вычисления энергетич. уровней с учетом вращения и инверсии. Получены следующие значения вращательных постоянных молекулы NH_3 : $B_0 = 9,9438 \pm 0,0006$; $D_0^J = (8,41 \pm 0,08) \cdot 10^{-4}$; $D_0^{JK} = (1,56 \pm 0,02) \cdot 10^{-3}$ (все — в см^{-1}). Библ. 20. С. Ф. Б.

1968

881-881-1111

ф. 1969. 52

NH₃

BP-XIII-188

1968

(Cuepp)

(63073w) The rotation-inversion spectrum of ammonia. Dowling, Jerome M. (Space Phys. Lab., Aerosp. Corp., Los Angeles, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1968, 27(1-4), 527-38 (Eng). The rotation-inversion spectrum of NH₃ was observed in the wave no. region 35-240 cm.⁻¹, with a resolu. of ~0.08 cm.⁻¹. The K splitting (owing primarily to centrifugal distortion) is extensive and many lines owing to single transitions are observed. The best resolved of these unblended lines are used in a rotational anal. The major rotational consts. obtained are $B_0 = 9.94378 \pm 0.00057$ cm.⁻¹, $D_0^J = (8.407 \pm 0.076) \times 10^{-4}$ cm.⁻¹, and $D_0^{JK} = (-1.584 \pm 0.015) \times 10^{-3}$ cm.⁻¹ 19 references.

RCKP

C. A. 1968. 69. 16

NH_3

кв.-мех.
расчет

Frost. A.A.

1968

J. Phys. Chem., 72, N4, 1289

Исследования строения
молекулы с пол. подвижных
сферич. гауссовых орбит.
III. Изгибы атомов
второго периода.



(см. BeH_2) III

NH_3

1968
Frost D.C., et al.

Advan. Mass Spectrom.,

1968, 4, 481.

(4)
гониом.
спектр

(Cer. Hg) II



NH_3

Gordon M.S.

1968

расчет
равнов.
весов.

J. Chem. Phys.

1968, 49, N10, 4643-50.

• (с CH_2 ; IV)

Haar L.,

Leonard
H. L.

Y. Res Nat. Bur. Stands,
1968, 7208, 207

N17

$\Delta H_f^\circ \text{NH}_3(\text{r})$

CH_3D ; NH_3 , H_2O (V;) 4 17
XIII 294 1968.

Hopkins H.P., Curl R.F., Pitzer K.S.

J. Chem. Phys., 1968, 48(7), 2959-65

Infrared matrix-isolated studies
of nuclear-spin species conversion.

NO

g

○

CA, 1968, 63, 52, 6613y

NH₃

1968

82760e Microwave echoes in gaseous ammonia. Jenkins, J. L.; Wagner, Peter E. (Johns Hopkins Univ., Baltimore, Md.). *Appl. Phys. Lett.* 1968, 13(9), 308-9 (Eng). Echoes have been produced at microwave frequencies of 23-26 GHz. from the transition between inversion levels in NH₃. Preliminary studies are reported prior to further use of the technique for mol. spectra in gases. V. W. Hatton

u. b. chertip

C. A. 1969. 10. 18

11 13 14

1968

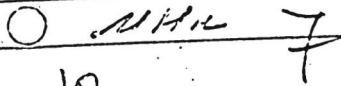
curr. nos., E: (HF, H₂O, NH₃, CH₄)

XIII 1645

Kim H., Parr R. G.

J. Chem. Phys., 1968, 48, 27, 3041-3083/2007

One-center perturbation approach
to molecular electronic energies.
IV Ten-electron molecules of type



Q. Rev. 1968, 16523

10

NH₃

XIII - 1357

1968

и. в. снелер

снелер

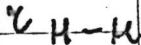
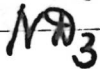
52821h Measurement of the $J = 0 \rightarrow 1$ transition frequency of ¹⁴NH₃ in the submillimeter range and a new structure determination for the ammonia molecule. Krupnov, A. F.; Skvortsov, V. A.; Sinegubko, L. A. (Gor'k. Univ., Gorki, USSR). *Izv. Vyssh. Ucheb. Zaved., Radiofiz.* 1968, 11(8), 1186-91 (Russ). The lower rotational transition $J = 0 \rightarrow 1, K = 0$ of ¹⁴NH₃ was studied by microwave spectroscopy at $\lambda \sim 0.53$ mm. Detailed descriptions of the exptl. set-up and conditions for the expt. are given. A single line was observed in accordance with theory, and an unresolved quadrupole structure, of a considerable intensity, which corresponds to the transition at $572,499.4 \pm 3$ Mc. The rotational const. was $B_0 = 298,106$ Mc. The N-H bond length was 1.0134 Å., and the H-N-H bond angle, $106^\circ 36'$.

A. L. Skup

C.A. 1969. 70. 12

XIII-352

1968



1007895 Electron-diffraction study of ammonia and deuterioammonia. Kuchitsu, Kozo; Guillory, J. P.; Bartell, L. S. (Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *J. Chem. Phys.* 1968, 49(6), 2488-93 (Eng). The gas-phase structures of NH_3 and ND_3 mols. were detd. by the sector-microphotometer method of electron diffraction. The following internuclear distances r_0 and mean amplitudes l_e with estd. standard errors were obtained: For NH_3 , $r_0(\text{N-H}) = 1.030_2 \pm 0.002$, $r_0(\text{H-H}) =$

+1



C.A. 1968. 69. 24



1.662 ± 0.010 , $l_e(\text{N-H}) = 0.073_1 \pm 0.002$, $l_e(\text{H-H}) = 0.125 \pm 0.006$, and for ND_3 , $r_0(\text{N-D}) = 1.026_6 \pm 0.003$, $r_0(\text{D-D}) = 1.654 \pm 0.008$, $l_e(\text{N-D}) = 0.061_1 \pm 0.002$, $l_e(\text{D-D}) = 0.101 \pm 0.006$ Å., with the parameter κ representing bond-stretching anharmonicity fixed at 1.0×10^{-5} and 0.5×10^{-5} Å.³ for N-H and N-D, resp. Effects of anharmonicity and isotope differences in the structural parameters analogous to those in CH_4 and CD_4 were observed. The r_a^0 and r_e bond distances calcd. from the above r_0 distances are found to be consistent with the corresponding r_s and r_e distances derived from the spectroscopic rotational consts. of Benedict and Plyler. The isotope effects reported by Bell and by Halevi for the dipole moment and polarizability of NH_3 are discussed briefly in the light of the present results.

RCJQ

XIII-352

1968

NH₃

/12 Б90. Электронографическое исследование аммиака и дейтероаммиака. Kuchitsu Kozo, Guillory J. P., Bartell L. S. Electron-diffraction study of ammonia and deuterioammonia. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 6, 2488—2493 (англ.)

Электронографически в газовой фазе с применением сектор-фотометрич. методики исследовано строение молекул NH₃ и ND₃. Эксперим. кривые молек. составляющей интенсивности рассеяния получены в интервале углов от 12 до 130 Å⁻¹ в единицах q . Расшифровка проведена методом радиального распределения, с уточнением МНК в применении к кривым интенсивности с учетом коэф. ангармоничности колебаний, равного 1,0 · 10⁻⁵ Å³ или N—H и 0,5 · 10⁻⁵ Å³ для N—D. Эффекты

момент.
стр-ра

+1

X. 1969. 12

X

ангармоничности и изотопные различия аналогичны таковым в CH_4 и CD_4 . Получены следующие межъядерные расстояния и амплитуды колебаний: для NH_3 r_g (N—H) $1,030 \pm 0,002$, l_e (N—H) $0,073 \pm 0,002$, r_g (H—H) $1,662 \pm 0,010$, l_e (H—H) $0,125 \pm 0,006$ А, для ND_3 r_g (N—D) $1,026 \pm 0,003$, l_e (N—D) $0,061 \pm 0,002$, r_g (D—D) $1,654 \pm 0,008$, l_e (D—D) $0,101 \pm 0,006$ А. Валентные расстояния r_a и r_e , вычисленные из полученных r_g , находятся в хорошем соответствии с r_x - и r_e -расстояниями, полученными из вращательных спектров.

И. Ронова

XIII - 100

1968

 NH_3

спектр

 ν_2

2 Д482. Сверхтонкая структура $N^{15}H_3$. Kukolich Stephen G. Hyperfine structure of $N^{15}H_3$. «Phys. Rev.», 1968, 172, № 1, 59—63 (англ.)

С помощью мазер-спектрометра с двумя ячейками исследована сверхтонкая структура инверсионных переходов для вращательных состояний $N^{15}H_3$ $J-K=4-4$, $5-5$, $6-6$, $7-7$. Теоретич. анализ эксперим. данных совместно с полученными ранее для $J-K=2-2$ проведен с учетом $I_N \cdot J$ - и $I \cdot J$ -взаимодействий (I_N -спин азота, I — суммарный спин атомов Н), а также Н—Н и Н—Н спин-спиновых взаимодействий. Для $J-K=2-2$, $4-4$, $5-5$ и $7-7$ наблюдается хорошее согласие между измеренными и рассчитанными значениями частот. Для $J-K=1-1$, $3-3$ и $6-6$ рассчитанные частоты сильно отличаются от экспериментальных. Приведены таблицы измеренных и рассчитанных значений частот. Э. В. Б.

ср. 1969.

2A

NH₃, HNCO, HNCS (Braun 13 4 1968)
HN₃, HNCO, HNCS (Braun 13 4 1968)
Krauskopf B., Lord R.C. Neely G.O.,
J. Mol. Spectrosc. 1968, 27(1-4), 148-76
High resolution far infrared study of
rotation in hydrazoic acid, isocyanic
acid, isothiocyanic acid, and NH₃
deuterium derivatives. CA, 1968, 69, 116, 63184h

NH_3

м.в.
резонанс

амплитуда 1051

Lees R. M., Oka T.

1968

J. Chem. Phys., 49, n 9, 1234

(см. MCN) III

1968

NH₃

propag

38866z Dissociation of molecules and molecule ions in molecular orbital theory. II. Dissociation of ammonia and NH_3^+ . Lindholm, Einar (Roy. Inst. Technol., Stockholm, Swed.). *Ark. Fys.* 1968, 37(5), 49-58 (Eng). A crit. examn. into the decompn. of NH_3 during photolysis and of NH_3^+ in a mass spectrometer is discussed by using M.O. theory. NH_2 is predominantly formed. This is explained on the basis of the min. change of energy in the dissoen. process involving loss of H from NH_3 after excitation of one electron. The formation of NH during photodissoen. of NH_3 by loss of 2 H does not occur because the process requires high energy. In the dissoen. of NH_3^+ in a photoionization or charge exchange mass spectrom-

+ Ind no uuu. propag

C.A. 1968. 69. 10



eter, NH_2^+ is formed in its ground state because of low appearance potential. NH^+ cannot be formed in its ground state by loss of H_2 because the appearance potential is high. But NH^+ can be formed in its quartet ground state together with H_2 after electron impact, the appearance potential being low. At increased pressure the following ion-mol. reaction occurs in NH_3 : $\text{NH}_2^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 + \text{NH}_3^+$. It is impossible to distinguish between the ground state of NH_2^+ and the excited state by means of investigation of the ion-mol. reaction.

M. A. Schotten

Учен.
группы
 NH_3

Lindholm E.

1968

Арх. Fys.

37, N5, 49

Диссоциация мал-1 и
малекулярных паров в
теории малекулярных
орбит. II. Диссоциация
 NH_3 и NH_3^+ .

$(\text{Сил. } \text{NH}_3) \text{ III}$

XIII - 1714 - ВД

1968

521

NH₃

) 22 Б29. Константы ангармоничности и усредненная модель молекулы аммиака. Morino Yonezo, Kuchitsu Kozo, Yamamoto Seiya. The anharmonic constants and average structure of ammonia. «Spectrochim. acta», 1968, A 24, № 4, 335—352 (англ.)

Вычислены константы потенциальной энергии третьего и четвертого порядка для молекул NH₃ и ND₃ в предположении внутримолекулярного потенциала как функции от внутренних координат; переход от внутренних координат к нормальным осуществлен при помощи нелинейного преобразования. При построении модели валентных сил приняты во внимание как обычные элементы F-матрицы, так и параметры типа Морзе, учитывающие ангармоничность вал. кол. связей N—H; взаимодействие между атомами водорода представлено в рамках модели Ван-дер-Ваальса. Большинство констант третьего поряд-

X. 1968. 22

24

ка, констант колебательно-вращательного взаимодействия α и констант l -удвоения g_l , вычисленных по принятой схеме, согласуется с эксперим. данными. Сравнение показывает, что почти все силовые постоянные третьего порядка во внутренней системе координат, каковыми пренебрегается при построении модели валентных сил, представляют собой небольшие величины отрицат. знака, как наблюдается для некоторых нелинейных молекул XU_2 . Оценен возможный порядок величин этих констант. Подобным же образом вычислены колебательные константы ангармоничности χ на основе силовых постоянных третьего и четвертого порядков. Усредненные параметры структур в нулевом приближении, оцененные с использованием эксперим. вращательных постоянных, найдены равными: $r_z(NH) = 1,0240 \text{ \AA}$, $\alpha_z(HNH) = 107,32^\circ$; $r_z(ND) = 1,0206 \text{ \AA}$, $\alpha_z(DND) = +07,22^\circ$.

Резюме

НН₃

Оттиск 521 | 1968

У 8 Д140. Ангармонические постоянные и усредненная структура аммиака. Morino, Yonezo, Kuchitsu, Kozo, Yamamoto Seiya. The anharmonic constants and average structure of ammonia. «Spectrochim. acta», 1968, A24, № 4, 335—352 (англ.)

Вычислены кубические и квадратичные постоянные в выражении для потенц. энергии колебаний атомов в молекулах NH₃ и ND₃, записанном во внутренних координатах. Такие расчеты проводились ранее авторами для молекул типа XY₂. Отмечается, что использование внутренних координат имеет преимущество в наглядности по сравнению с использованием норм. координат. Подробно (в приложении) рассмотрена общая схема пере-

номер,
структура;

и.и.;

оп. 1968. 8А

69-6/7/1-111X

8

хода от внутренних координат к нормальным. В расчетах использовалась модель валентных сил и предполагалось, что потенц. энергия взаимодействия атомов водорода описывается кривой Ван-дер-Ваальса. Большинство кубич. постоянных, постоянные колебательно-вращательно-го взаимодействия и расщепления I -типа, рассчитанные при использовании этих моделей, согласуются в основном с соответствующими эксперим. значениями. Сравнение с эксперим. данными также показывает, что почти все постоянные в системе внутренних координат, игнорируемые в модели валентных сил, должны иметь малые отрицат. значения, как это имеет место и для некоторых изогнутых молекул XY_2 . Проведена оценка порядка величины этих постоянных. Полученные значения постоянных потенц. энергии (точнее вклад в их значения от гармонич. части энергии) использованы для определения геометр. структуры NH_3 и ND_3 по данным вращательных спектров.

В. А. Морозов

NH₃

XIII - 1799-BZ

1988

521

emp-pe

90065f The anharmonic constants and average structure of ammonia. Yonezo Morino, Kozo Kuchitsu, and Seiya Yamamoto (Univ. Tokyo, Tokyo, Japan). *Spectrochim. Acta, Part A* 24(4), 335-52(1968)(Eng). The cubic and quartic potential consts. for NH₃ and ND₃ were calcd. by assuming intramol. potential functions of internal coordinates and by means of the nonlinear transformation of the internal coordinates into the normal coordinates. The ordinary *F* matrix elements in the internal-symmetry coordinate system and the Morse-like parameters representing the anharmonicity of the N-H bond-stretching vibrations are taken into account in the valence force model, and in addn. the H-H potential terms are assumed in the van der Waals model. A majority of the cubic consts., the vibration-rotation interaction constants α , and the *l*-type doubling consts.

C.A. 1968. 68. 20



q_i calcd. by these models agree with the exptl. values reported by Benedict and Plyler. The comparison has indicated that almost all the 3rd-order potential consts. in the internal coordinate system ignored in the valence force model should have small neg. values, as observed for several bent XY_2 mols. Possible orders of magnitude of these consts. were estd. The vibrational anharmonic consts. x were estd. in a similar manner from the cubic and quartic consts. The zero-point av. structure is derived from the exptl. rotational consts. to be: $r_s(\text{N-H}) = 1.024_0 \text{ \AA.}$, $\alpha_s(\text{H-N-H}) = 107.3_2^\circ$, and $r_s(\text{N-D}) = 1.020_6 \text{ \AA.}$, $\alpha_s(\text{D-N-D}) = 107.2_2^\circ$.
30 references. RCSQ

НМ₃

10 Б268. Исследование индуцированных столкновениями переходов между вращательными уровнями молекул в микроволновой области. IV. Равновесные измерения для NH_3 . Ока Takeshi. Microwave studies of collisioninduced transitions between rotational levels. IV. Steady-state measurements in NH_3 . «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 11, 4919—4928 (англ.)

Методом двойного МВ-резонанса исследованы индуцированные столкновениями переходы между вращательными уровнями аммиака. Излучением мощного кластера производится накачка отдельных инверсионных переходов NH_3 с заданными значениями вращательных квантовых чисел J и K и измеряется изменение интенсивности $\Delta I/I$ нижележащих инверсионных переходов. Измерения выполнены для 18 четырехуровневых систем.

ра
с о п.
что

Х. 1969. 10

1968

868

аммиак

с различным J и K со ср. ошибкой δ ($\Delta I/I$) = $\pm 0,2\%$. Наибольшие значения $\Delta I/I$ (вплоть до 10%) получены для дипольных переходов типа $\Delta J=0, \pm 1$ с изменением четности уровней ($+\leftrightarrow-$). Величины $\Delta I/I$ для переходов $\Delta J=\pm 1$ при $J \approx K$ малы по сравнению с $\Delta I/I$ для переходов $\Delta J=0$, а при $J \gg K$ $\Delta I/I$ для этих переходов одинаковые. Обнаружены также нек-рые индуцированные столкновениями переходы $\Delta J > 1$ и $\Delta K \neq 0$, для к-рых величина $\Delta I/I$ не превышает $0,5\%$, а также переходы между уровнями с одинаковой четностью $\pm \leftrightarrow \pm$ $\Delta J = \pm 1$. Рассмотрена зависимость $\Delta I/I$ от J и K и отмечено, что при малых K $\Delta I/I$ с увеличением J сильно растет, достигая максим. значения при $J \approx 5$ и затем уменьшается, а при заданном J с увеличением K $\Delta I/I$ уменьшается, причем это уменьшение наиболее резко выражено для переходов с малыми J . Путем приближенного решения кинетич. ур-ний для случая теплового равновесия получены ф-лы, связывающие $\Delta I/I$ с вероятностями переходов между вращательными уровнями, при помощи к-рых из эксперим. значений $\Delta I/I$ определены некоторые функции вероятностей переходов для всех четырехуровневых систем. При помощи теории Андерсона вычислены значения $\Delta I/I$. Расчет во всех случаях дает завышенные (от 2 до 8 раз) значения $\Delta I/I$. Сообщ. III см. РЖХим, 1968, 20Б259. М. Р. Алиев

NH_3

м. в.
спектр

1968

2 Д481. Микроволновые исследования переходов между вращательными уровнями, индуцированных столкновениями. IV. Измерения для NH_3 в стационарном состоянии. Oka Takeshi. Microwave studies of collision-induced transitions between rotational levels. IV. Steady-state measurements in NH_3 . «J. Chem. Phys.», 1968, 48, № 11, 4919—4928 (англ.)

Методом двойного резонанса в микроволн. области исследованы переходы между вращательными уровнями в NH_3 , индуцированные столкновениями. Возрастание интенсивности поглощения ряда инверсионных дублетов исследовалось как ф-ция «накачки» инверсионных дублетов с заданными J. Подробно описана измерительная аппаратура и техника эксперимента. Полученные резуль-

868

оттиск

таты проанализированы на основе ур-ний устойчивых состояний и получены относит. значения констант скоростей. Получены следующие правила отбора для наиболее распространенных дипольных индуцированных переходов: $\Delta J = 0, \pm 1$; $+\leftrightarrow -$. Вероятность переходов $\Delta J = 0$ выше, чем $\Delta J = \pm 1$ для уровней с $J \sim K$, в то время как для $J \gg K$ переходы с $\Delta J = 0$ и ± 1 равновероятны. Переходы с $\Delta J > 1$ и $\Delta K \neq 0$ имеют малые вероятности. На основании сравнения теоретич. и эксперим. данных сделан вывод, что квадрупольные переходы с $\Delta J = \pm 1$, $+\leftrightarrow +$ равновероятны с соответствующими дипольными переходами. Библ. 17. Ч. III ом. РЖФиз, 1968, 7Д191. Э. В. Б.

1968

NH₃

фотодиссоциация

10 Б1153. Фотодиссоциация NH₃ в вакуумной ультрафиолетовой области, образование и реакционная способность электронно-возбужденных радикалов NH*. Okabe Hideo. Photodissociation of NH₃ in the vacuum-ultraviolet production and reactivity of electronically excited NH. «J. Chem. Phys.», 1968, 49, № 6, 2726—2733 (англ.)

При фотодиссоциации NH₃ (I) в вакуумной УФ-области образуются электронно-возбужденные радикалы NH* в состоянии $c^1\Pi$ и $A^3\Pi_i$; и, возможно, N₂($B^3\Pi_g$), флуоресценция к-рых была исследована в области 1700—6000 Å. Выход NH ($c^1\Pi$) составляет 2%. Полоса (0,0) является наиболее интенсивной из (0,0), (1,0) и (0,1)-полос системы NH с $^1\Pi - a^1\Delta$, наблюдаемой при облучении Kr и Xe-линиями. Интенсивность полосы (1,0) составляет 7%

+1

2. 1969.

10

X

от интенсивности полосы (0,0). Вращательные уровни полосы (0,0) населены вплоть до $K=18$. Прямое образование $\text{NH}(A^3\Pi_i)$ является спин-запрещенным процессом и, по-видимому, играет незначительную роль. Из данных по зависимости от давления отношения $\text{NH}(A^3\Pi_i)/\text{NH}(c^1\Pi)$ следует, что $\text{NH}(A^3\Pi_i)$ может получаться при р-циях электронно-возбужденных молекул $\text{N}_2(B^3\Pi_g)$ с I. Предполагается, что $\text{NH}(c^1\Pi)$ может получаться при преддиссоциации электронно-возбужденных I ($<1450 \text{ \AA}$) или при прямой диссоциации I ($>1450 \text{ \AA}$). $\text{NH}(c^1\Pi)$ гасится почти при каждом соударении с H_2 , CO , O_2 и NO . Основным процессом при гашении парамагнитными газами O_2 и NO является конверсия $c^1\Pi$ в $A^3\Pi_i$ -состояние.

Резюме

1968

NH₃

Price W.C.

Molec. Spectrosc.

рото экстр
спектр

Proc. Conf. Brighton,
1968. London, 1968, 221

[Chem. H₂] III

J (H_2 , HCl , H_2O , NH_3 , CH_3 , N_2 , NO , O_2)

XI 427 1968

Price W.C.,
Molec. Spectrosc. Proc. Conf.
Brighton, 1968, London
1968, 221-33, Discuss, 237-38

PX 1970

45168

CP

ЕСТЬ Ф. Н.

20

1968

NH_3
(D, T-замес.)

ампл.
колеб.

3 Д162. Средние амплитуды колебаний: пирамидальные молекулы типа XYZ_2 . Rao B. Purnachandra, Rama Murthy V. Mean amplitudes of vibrations: pyramidal XYZ_2 type molecules. «Indian J. Pure and Appl. Phys.», 1968, 6, № 7, 339—341 (англ.)

Из литературных данных о структурных параметрах, частотах основных колебаний и силовых коэф. вычислены среднеквадратичные и средние амплитуды колебаний 18 частично дейтерированных и тритированных изотопич. модификаций молекул NH_3 , PH_3 и AsH_3 типа XYZ_2 ($\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}$) с симметрией C_{2v} при $t \sim 300^\circ \text{K}$. Рассмотрена зависимость вычисленных величин от масс атомов и показано, что средние амплитуды колебаний связей XY практически не зависят от массы атома Z и увеличиваются с увеличением массы атома X, а средние амплитуды колебаний несвязанных пар атомов Z...Z и Y...Z увеличиваются при увеличении масс атомов Y и Z.

М. Р. Алнев

ф. 1969.

3 Я

х 2

X

NH_3

B90-4505-X 1988
Roy L. S.

Proc. Phys. Soc., London, A.
Mol. Phys., [2] 1 (2), 326.

An empirical relation -
ship between bond length
and frequency.

(see. Chy) III

NH₃

XIII-964-187 1968

53456p Theoretical conformational analysis. I. An ab initio SCF-LCAO-MO study of the nitrogen inversion barriers in ammonia and in ethylenimine. A. Veillard, J. M. Lehn, and B. Munsch (Lab. Chim., Paris). *Theor. Chim., Paris. Theor. Chim. Acta* 9(3), 275-7(1968)(Eng). A theoretical ab initio stable crystal field-L.C.A.O.-M.O. study of the N inversion barriers of NH₃ and ethylenimine is presented. The total energy is calcd. for the most stable conformation (pyramidal form) and the planar form of the 2 compds. The increased energy from the pyramidal to the planar conformation is probably related to a transfer of electron d. from the 2s to the 2p_z N orbitals. Thus, from a N at. population anal. of the 2 mols. in the pyramidal and planar states the increase in the energy barrier going from NH₃ to ethylenimine is reflected in the increase in 2s → 2p electronic transfer from 0.1 electron in the case of NH₃ to 0.3 electron in the case of ethylenimine.

CJJN

W. exp. poor

C.A. 1968. 68. 12.



NH_3
 ND_3

фотоэлектронный
спектр,
Зр

X. 1970.

8

1969
/ 8 Б176. Ионизационные потенциалы аммиака и аммиака- d_3 , измеренные при помощи фотоэлектронной спектроскопии и рассчитанные методом ННДП. Branton G. R., Frost D. C., Herring F. G., McDowell C. A., Stenhouse I. A. The ionization potentials of ammonia and ammonia- d_3 , measured by photoelectron spectroscopy, and an INDO calculation of these values. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 8, 581—584 (англ.)

Получены фотоэлектронные спектры высокого разрешения NH_3 и ND_3 при возбуждении резонансной линией гелия 584 А. В спектрах обнаружены ионизац. процессы, соотв-щие ионизации с молекулярных орбиталей $3a$ и $1e$. Для полос первого ионизац. потенциала (ИП) в каждом спектре наблюдалась хорошо разрешенная колебат. прогрессия, к-рая отнесена к симм. неплоск. деф. кол. ν_2 . Проведен расчет ИП методами ПНДП и ННДП. Методом ННДП получен лучший результат, хотя оба расчета дали величины, превышающие данные эксперимента.

О. Г. Гаркуша

(X)

NH₃
3

BP-XIII-72

1969

(J)

(105334f) Ionization potentials of ammonia and ammonia-d₃. Measured by photoelectron spectroscopy, and an INDO calculation of these values. Branton, G. R.; Fröst, D. C.; Herring, E. G.; McDowell, C. A.; Stenhouse, I. A. (Univ. British Columbia, Vancouver, British Columbia). *Chem. Phys. Lett.* 1969, 3(8), 581-4 (Eng). New high-resoln. photoelectron spectra of NH₃ and ND₃ are reported. The spectra of both compds. show 2 ionization processes corresponding to ionization of the 3a and 1e mol. orbitals. The 1st band in the photoelectron spectrum of each compd. shows a well-resolved vibrational progression which is assigned to ν_2 , the totally sym. out-of-plane bending mode. Calcn. of the ionization potentials have been carried out using the C.N.D.O./2 and I.N.D.O. M. O. methods. The I.N.D.O. method gave better results than the C.N.D.O./2 calcn., but both sets of values were higher than the exptl. ones.

BGIN

C.A. 1969. 71. 22

[X]

1969

2 Д148. Потенциалы ионизации аммиака и аммиака- d_3 , измеренные методом фотоэлектронной спектроскопии, и расчет этих величин в приближении неполного пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Branton G. R., Frost D. C., Herring F. G., McDowell C. A., Stenhouse I. A. The ionization potentials of ammonia and ammonia- d_3 , measured by photoelectron spectroscopy, and an INDO calculation of these values. «Chem. Phys. Letters», 1969, 3, № 8, 581—584 (англ.)

Получены новые фотоэлектронные спектры высокого разрешения аммиака и аммиака- d_3 . Спектры этих молекул указывают на два процесса ионизации, соответствующих ионизации с $3a$ и $1e$ молекулярных орбиталей. Первые полосы спектров имеют хорошо разрешенную колебательную структуру, приписываемую полнометричному пространственному колебанию ν_2 . Проведены расчеты потенциалов ионизации методом МО в

ите,
едова
едез

90: 1970. 28

приближении полного (I) и неполного (II) пренебрежения диффер. перекрыванием. Метод II даст лучшие результаты, чем I, однако оба метода дают величины, большие экспериментальных. Эксперим. величины потенциалов ионизации аммиака с орбитали $3a$ равны 10,15 эв (адиабатический) и 10,8 эв (вертикальный); с орбитали $1e$ соответственно 14,92 и 15,5 эв. Наилучшие теоретич. величины потенциалов ионизации с орбиталями $3a$, $1e$ и $2a_1$ соответственно равны 10,2; 15,89 и 33,55 эв. Сделано заключение о том, что метод II может быть полезен для отождествления полос, наблюдаемых в молекулярной фотоэлектронной спектроскопии. Приводится сравнение данных для молекул аммиака и аммиака- d_3 . Колебательные частоты для ионов аммиака и аммиака- d_3 соответственно равны 950 и 720 см^{-1} . При облучении резонансной линией гелия энергии первых наблюдаемых членов колебательной прогрессии для аммиака и аммиака- d_3 равны соответственно 10, 14 и 10,35 эв. Однако дополнительные опыты указывают на то, что полоса O—O, наблюдаемая в аммиаке, не наблюдается в аммиаке- d_3 , и адиабатич. потенциал ионизации аммиака- d_3 равен 10,17 эв.

Г. К.

NH_3

(ref)

Chamberlain F.
Costley A. E., Gebbie H.

1969

Spectrochim. Acta, A25,
v1, 9-18.

μ

Дисперсия в субмилли-
метровой области,
иногда свисает в ра-
зрешимых линиях

и димометрический момент
назобразного анализа
из.

(см. все) III

XIII - 4588

1969

NH₃

3 Б85. Возбуждение электронным ударом и образование отрицательных ионов в NH₃ и ND₃. Compton R. N., Stockdale J. A., Reinhardt P. W. Electron-impact excitation and negative ion formation in NH₃ and ND₃. «Phys. Rev.», 1969, 180, № 1, 111—120 (англ.)

На времяпролетном масс-спектрометре типа Bendix экспериментально исследовано возбуждение электронным ударом вблизи пороговых значений и образование отрицательных ионов в аммонии и ND₃. Сравниваются результаты, полученные методом использующим интенсивное присоединение к SF₆ резонансных электронов с энергией близкой к нулю для улавливания электронов, образующихся при неупругих соударениях с молекулами исследуемого газа в масс-спектрометре, и данные измерений поперечного сечения диссоциативного захвата и кинетической энергии ионов с помощью электронной ловуш-

D₀

x. 1970. 3

(41)(1)



ки, действующей на квазимоноэнергетич. электронном пучке с разрешением по энергии $\sim 0,1$ эв. Спектры возбуждения электронным ударом, полученные обоими методами, обсуждаются и наблюдаемые в области 4—17 эв пики интерпретируются соотв-щими электронными состояниями NH_3 . Среднее из 23 измерений значение поперечного сечения диссоциативного захвата для NH_3 составляет $(5,74 \pm 0,2) 10^{-18} \text{ см}^2$ и для ND_3 из 17 измерений $(5,36 \pm 0,3) 10^{-18} \text{ см}^2$. Приведены кривые выхода отрицательных ионов D^- и ND_2^- из ND_3 и NH_2^- из NH_3 . Измерения кинетич. энергии отрицат. ионов произведено методом задерживающих потенциалов и представлено в виде соотв-щих кривых. Энергия диссоциации $\text{NH}_2\text{—H}$ найдена равной $4,35 \pm 0,15$ эв.

М. Туркина

1969

NH_3

Gey Z., Maksic Z.B.,
Trinajstic N.

Y. Mol. Struct., 3 (1-2),
21-6.

Кв. мех.
расчет

(см. BH_3) III

A(p) (CH_3NH_2 , NH_3 , CH_3OCH_3 , $\overline{x}$ 652¹⁹⁶⁹
 PH_3 , CH_3CN , CH_3SH , CH_3OH ,
 HCN , CH_3Cl , HJ , HCl , HBr) 15

Haney M.A., Franklin F.L., 14

J. Phys. Chem, 1969, 73, v12, 4328-4331 (ang)

Mass spectrometric determination
of the proton affinities of various
molecules.

$\overline{x}$ 652
"MILINDO KLOZ"

Proc Phys, 1970, 60250.

10

20

(2)

NH₃

XIII-245

1969

61086r Submillimeter-wave spectra of ammonia and phosphine. Helminger, Paul; Gordy, Walter (Dep. of Phys., Duke Univ., Durham, N.C.). *Phys. Rev.* 1969, 188(1), 100-8 (Eng). Rotational transitions of different isotopic species of NH₃ and PH₃ have been obsd. in the $\frac{1}{2}$ to 1-mm region. The frequency of the $J = 0 \rightarrow 1$ transition of ¹⁴NH₃ is $572,496.69 \pm 0.60$ MHz and that for ¹⁵NH₃ is $572,053.18 \pm 0.50$ MHz. Spectral consts. B_0 obsd. for the different isotopic species (in MHz) are: 298,114.68 for ¹⁴NH₃, 297,359.32 for ¹⁵NH₃, 154,173.25 for ¹⁴ND₃, and 153,600.82 for ¹⁵ND₃. Structural dimensions for the ground vibrational state of NH₃ obtained by isotopic substitution are 1.0136 Å for the bond length and 107°3' for the bond angle. For PH₃, the rotational consts. obtained (in MHz) are: $B_0 = 133,480.15$, $D_J = 3.95$, and $D_{JK} = -5.18$; for PD₃ they are $B_0 = 69,471.09$, $D_J = 1.02$, and $D_{JK} = -1.31$. An upper limit of $\frac{1}{2}$ MHz has been put on the unknown inversion frequency of PH₃.

RCPJ

M.H.

G. A. C. A.

C.A.

1970.72.12

NH_3

245

XII + XII

М. И.

Структура

09. 1970.

68

6 Д475. Спектры аммония и фосфина в субмиллиметровой области. Helminge Paul, Gordy Walter. Submillimeter-wave spectra of ammonia and phosphine. «Phys. Rev.», 1969, 188, № 1, 100—108 (англ.)

В области $0,5 \div 1$ мм измерены вращательные переходы различных изотопич. комбинаций молекул NH_3 и PH_3 и их дейтерированных образцов в основном колебательном состоянии. Зарегистрирована частота перехода $J=0 \rightarrow 1$ для N^{14}H_3 при $572496,69 \pm 0,60$ Мгц и для N^{15}H_3 при $572053,18 \pm 0,50$ Мгц. Для всех изотопич. образцов определены вращательная постоянная B_0 и постоянная центробежного искажения D_J и для PH_3 также и D_{JK} . Для N^{14}D_3 найдена постоянная квадрупольного взаимодействия $eqQ = -4,10$ Мгц. Найдены структурные параметры аммония: длина связи, равная $1,0136$ Å, и угол между связями, равный $107^\circ 3'$. У верхней границы исследованной области найдена инверсионная частота для PH_3 .

Г. П.

(+1)

XI

1960

1969.

NH_3

Holt & D.,
Beauchamp Y. &

сродство
к протоку

J. Amer. Chem. Soc.,

1969, 91, ~ 21, 5913

(Ser. PH_3) III

1969

NH₃

110214a Rotational and vibrational relaxation in gaseous ammonia. Jones, David Grandison; Lambert, James D.; Saksena, M. P.; Stretton, John L. (Univ. Oxford, Oxford, Engl.). *Trans. Faraday Soc.* 1969, 65(4), 965-73 (Eng). Measurements of ultrasonic velocity and absorption have been made in gaseous NH₃ at 298.15°K., and show both rotational and vibrational relaxation to occur with approx. the same relaxation time. The estd. collision nos. for energy transfer are $Z_{vib} = Z_{rot} = 4.9$. The vibrational relaxation time of NH₃ is considered to be abnormally short even though there is agreement between the exptl. results and that calcd. by using the R. N. Schwartz, Z. Slawsky, and K. F. Herzfeld (1952) theory since the theory underest. considerably the relaxation times of other small polar mols. including ND₃. Approx. calens. of rotational

corrected
w
gray. peak
-calcd

C. A. 1969. 40. 24

relaxation on a classical "rough spheres" model give $Z_{\text{rot}} = 14.4$. The discrepancy with expt. is attributed to the effect of dipole-dipole interaction in helping rotational energy transfer. The exptl. collision nos. are significantly larger than published values calcd. by the Mason-Monchick (1962) theory from observed transport properties. An accurate exptl. value for the velocity of sound in Ar, which was used as a calibrating gas for the app. is included.

RCTD

NH₃

24 Б55. Значение неподеленной пары электронов для внутримолекулярной потенциальной функции гидридов и тригалогенидов элементов V группы. King Shih-Tung, Overend John. The importance of lone-pair electrons in the intramolecular potential function of group V hydrides and trihalides. «J. Phys. Chem.», 1969, 73, № 2, 406—412 (англ.)

1969

Сил. пог.

Определены постоянные силового поля Юри—Брэдли молекул ЭX_3 ($\text{Э} = \text{N, P, As, Sb}$; $\text{X} = \text{H, D, Hal}$) и NHF_2 , NDF_2 , учитывающего кулоновское взаимодействие неподеленной пары электронов с периферийными атомами. Силовая постоянная $F_\beta < 0$ для гидридов и $F_\beta > 0$ для галогидных соединений. Наиболее чувствительны к варьированию F_β частоты полносимм. вал. и деф. кол. ЭX_3 . Введение F_β улучшает соответствие между вычисленными и эксп. найденными значениями частот; в случае гидридов получено соответствие в пределах 1%.

В. А. Сипачев

3-3
X

(+25)

X. 1969. 24



NH₃

расши-
ритель
свист

Krell J. et al.

1969

Chem. Phys. Letters,
4(5), 261.

(coll. CH₄) III

$^{15}\text{NH}_3$

XIII - 1350

1969

72939- Rotational constant of isotopic ammonia $^{15}\text{NH}_3$.
Krupnov, A. F.; Gershtein, L. I.; Shustrov, V. G.; Polyakov,
V. V. (Nauch.-Issled. Radiofiz. Inst., Gor'k, Univ., Gorki,
USSR). *Izv. Vyssh. Ucheb. Zaved., Radiofiz.* 1969, 12(10), 1584-
5 (Russ). In an 8:1 mixt. of $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$ the usual spectral
line transitions $J = 0 \rightarrow 1$, $K = 0$ were recorded in the 525- μ
band: 572,115 MHz for $^{15}\text{NH}_3$ ($572,499.4 \pm 3$ MHz literature
value). The rotational consts. were: $B_0(^{15}\text{NH}_3) = 297,379.3$
MHz vs. the literature value 297,377.5 MHz.; $B_0(^{14}\text{NH}_3) =$
298,104.2 MHz; the frequency difference of the transitions of
 $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$ $\Delta\nu_{0-1} = 384.1$ MHz vs. the reported value
384.8 MHz. Karl H. Bloss

справ. мет.

М.В. Череп

C.A. 1970. 72.14

1969

 $N^{15}H_3$

М.И.

 $\frac{1}{2}$

0581-1750

XIII

4 Д457. Определение вращательной постоянной изотопного аммиака $N^{15}H_3$. Крупнов А. Ф., Герштейн Л. И., Шустров В. Г., Поляков В. В. «Изв. высш. учебн. заведений. Радиофизика», 1969, 12, № 10, 1584—1585

В диапазоне $\lambda = 0,525$ мм с помощью газового радиоспектроскопа одновременно наблюдались спектральные линии переходов $J=0 \rightarrow 1$, $K=0$ обычного ($N^{14}H_3$) и изотопного ($N^{15}H_3$) аммиака. Измерено расстояние между ними, равное $384,8 \pm 0,2$ МГц. На основе проведенных ранее измерений частоты перехода $J=0 \rightarrow 1$, $K=0$ обычного аммиака определена частота перехода изотопного аммиака, равная $572\,115 \pm 3$ МГц, и рассчитана вращательная постоянная $B_0(N^{15}H_3) = 297\,378$ МГц. Точность значения B_0 определяется, по-видимому, точностью значения инверсионного расщепления, входящего в расчетную формулу.

Автореферат

05.1970. 48

1969

NH₃

смерз

4 Б271. Влияние перекрестной релаксации в длинноволновом инфракрасном спектре аммиака. Lightman A. Cross-relaxation effects in the far infrared spectrum of ammonia. «Israel J. Chem.», 1969, 7, № 2, 299—301 (англ.)

Измерены ширины и сдвиги линий инверсионных дублетов вращательных переходов $I=3 \rightarrow 4$, $4 \rightarrow 5$ и $5 \rightarrow 6$ в длинноволновом ИК-спектре NH₃. Показано, что с ростом давл. интервал между компонентами дублетов уменьшается, а при нек-ром давлении линии дублета сливаются в одну, ширина к-рой меньше суммарной ширины отдельных линий. Определены параметры ширины γ_0 и перекрестной релаксации ζ_0 для исследованных линий.

М. Р. Алиев

X. 1970

4

NH₃

1969

Lojko M.S.
Beers I.

sp. nos.

Y. Res. Nat. Bur. Stand.

A 43, ~ 2, 233.

(Cue H₂O) III

M. N., cur. n. (O₃, OF₂, SO₂, SeO₂,
OCS, NH₃) ¹⁹⁶⁹

Marino, V.

11 13 12 14

XI 364

Pure and Appl. Chem, 1969, 18, 13, 823-338
(acc)

Intramolecular potential function
of polyatomic molecules by vibra-
tion-rotation interactions.

Pure Chem, 1970, 35163

10

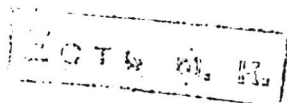
12

см. ност (H_2O , H_2S , H_2Se , NH_3 ,¹⁹⁶⁹
 PH_3 , AsH_3 , SbH_3) XI 416

Pfeiffer M.,
J. molec. Spectrosc., 1969, 31, N2,
181-195

b x 70

10



C_2H_4 ; CH_4 ; LiH_2^- ; CH_3^+ ; IX 813 1969

OH^- ; NH_3 ; C_2H_2 ; C_2HF ; C_2HCl ; C_2 ; C_3 ;
 C_4 ; $BeHBe^+$; $BeHBe^-$; BeH^+ ; BeF_3 ;
 HF ; FHF^- ; H_2O ; HeH^+ ; $F(H_2O)_n$
($n=1,2,3$); $HeHHe^+$; F_2 ; KF ; NaF ;
 HCl ; $LiCl$; (ΔH_f , D , T , $2e$, v , kv - u
расчет)

Preuss H., Janoschek R.,
J. Mol. Struct., 1969, 3(4-5),

423-28

ЕСТЬ

1110

NH₃

(memorandum XY₂Z H, D, T-isomers.) 1969

V₂

110218e Vibrational frequencies of isotropically substituted molecules of the pyramidal type XY₂Z (X = N, P, As, or Sb; Y or Z = H, D, or T) by the method of Green's function. Ramaswamy, K.; Swaminathan, S. (Univ. Annamalai, Annamalai Nagar, India). *Spectrosc. Mol.* 1969, 18(202), 7-11 (Interlingua). The wave nos. corresponding to the vibrational frequencies of 24 mols. of the pyramidal type XY₂Z are calcd. from the wavenos. of the corresponding XY₂ mols. by use of Green's function, and the results are compared with the previous values. Reasonably good agreement was obtained in almost all cases except for some bending vibrations. The anal. by use of the Green function gives a better understanding of the isotope rule from the point of view of mol. dynamics.

Forrest F. Cleveland

C.A. 1969.

70.24

+3

X

NH_3

XIII - 531

1969

№1 Д161. Вычисление молекулярных постоянных гидридов V группы методом функции Грина. Ramaswamy K., Swaminathan S. Molecular constants of group V hydrides by Green's function analysis. «Austral. J. Chem.», 1969, 22, № 2, 291—297 (англ.)

Методом ф-ции Грина из литературных данных о частотах колебаний гидридов XH_3 ($\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}, \text{Sb}$) и их производных (XD_3, XT_3) определены параметры форм колебаний, а из последних вычислены силовые коэф. наиболее общего силового поля XH_3 , среднеквадратичные амплитуды колебаний σ для связанных и несвязанных

см.
пост.

+3

Ф. 1969. 112

пар атомов, постоянные центробежного искажения D_j , D_{jk} , D_k и кориолисового взаимодействия ζ_i ($i=3, 4$) компонент вырожденных колебаний для всех XH_3 , XD_3 и XT_3 . Результаты расчета σ для NH_3 , ND_3 и PH_3 согласуются с электронографич. данными, а для остальных молекул — с результатами других расчетов. Вычисленные значения ζ -постоянных, хотя и удовлетворяют правилам сумм, но в некоторых случаях отличаются от эксперим. значений в несколько раз.

М. Р. Алиев

1969

19 Б49. Анализ молекулярных констант гидридов V группы с помощью функции Грина. Ramaswamy K., Swaminathan S. Molecular constants of group V hydrides by Green's function analysis. «Austral. J. Chem.», 1969, 22, № 2, 291—297 (англ.)

С помощью I-матрицы, элементы которой определяются только колебательными частотами гидрида, его пердеитеро- и пертретий-производных, независимо рассчитаны силовые константы, среднеквадратичные амплитуды, константы колебательно-вращательного и кориолисова взаимодействия гидридов V группы NR_3 , PR_3 , AsR_3 , SbR_3 ($\text{R}=\text{H, D, T}$). Полученные величины находятся в отличном соответствии с эксперим. данными и результатами расчета с помощью нормальных координат. Предложенный метод позволяет проводить расчет указанных энергетич. констант без использования определенного силового поля.

С. Зимонт

NH_3

ND_3

NT_3

сил. пост.
мол. пост.

х. 1969.

19

+3

19

NH_3

1969

12 Д382. Сверхтонкая структура инверсионного спектра. Roberts James A. Hyperfine structure in the inversion spectrum of NH_3 . «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 30, № 2, 351—353 (англ.)

Измерены частотные интервалы $\Delta\nu$ между центральными компонентами; обусловленными взаимодействием протонных спинов с вращением сверхтонкой структуры линий с $1 \leq J \leq 8$, $K=1$ инверсионного спектра молекулы NH_3 . Получена линейная зависимость $\Delta\nu$ от J в согласии с теоретич. предсказаниями. М. Р. Алнев

М.И.

ф. 1969. 12Д

NH_3

1969

1 Б274. Сверхтонкая структура в инверсионном спектре NH_3 . Roberts James A. Hyperfine structure in the inversion spectrum of NH_3 . «J. Molec. Spectrosc.», 1969, 30, № 2, 351—353 (англ.)

и-в. спектр

X. 1970. 1

1969

 NH_3

4 Д197. Дипольный момент NH_3 в возбужденном состоянии ν_2 . Shimizu Fujio. Dipole moment of NH_3 in the ν_2 excited state. «J. Chem. Phys.», 1969, 51, № 6, 2754 (англ.)

Методом штарковской спектроскопии определены дипольные моменты μ молекулы NH_3 в основном и возбужденном колебательном ν_2 -состояниях. Они равны, соответственно, 1,475 и 1,25 ед. Дебая, погрешность 1%. Приведен штарковский спектр NH_3 в области 10 μ . Предполагается, что уменьшение μ в состоянии ν_2 объясняется тем, что в возбужденном состоянии молекула становится плоской.

И. С. Милевская

дип. моменты

ф. 1970. 4Д

NH_3

вакуотне
ор-цел

кв-мех
раем

Snyder L.C.,
Basch H.

1969

J. Amer. Chem. Soc.,
1969, 91, 29, 2189.

$(\text{Ces. CH}_4)^{\text{III}}$

NH_3

протонна
структура

1969
Thomas J. L.

Chem. Phys. Letters,
1969, 3, 29, 405

$(\text{Cu. CH}_4) \text{ III}$

NH_3

1969

9 Б29. Протонное строение молекул. 1. Аммиак.
Thomas I. L. Protonic structure of molecules. I. Ammonia molecules. «Phys. Rev.», 1969, 185, № 1, 90—94 (англ.)

Проведен неэмпирический расчет молекулы аммиака, учитывающий все электроны и все протоны. Предполагалось, что ядро атома азота фиксировано и в гамильтониан включались члены, учитывающие отталкивание ядер и кинетическую энергию протонов. Приближенная волновая функция Ψ определялась в виде $\Psi = \Phi \Omega$, где Φ зависит только от координат электронов, а Ω — от координат трех протонов. В качестве одночастичных функций (как протонных, так и электронных) использовались $1s$ -, $2s$ -, и $2p$ -функции типа Слейтера, центрированные на атоме азота. Функция Φ построена в виде одного

кв. - мех.
расчет

X. 1970. 9

слейтеровского детерминанта; функция Φ представлена в виде линейной комбинации 20 конфигураций, которые можно образовать с помощью 6 ортогональных спин-орбиталей, построенных из s - и p -функций. Минимизация энергии проводилась по параметрам слейтеровских орбиталей и коэффициентам в однопротонных функциях. Получен спектр энергетических уровней протонов. Исследованы протонные и электронные части волновой функции. Авторы отмечают, что на основании их расчета молекула аммиака должна выглядеть как эллипсоидальное облако электронов, окруженное слоем протонов. Эта модель существенно отличается от всех известных. Вычислены значения кинетической энергии протонов (~ 3 ккал/моль) и энергия основного состояния $-55,44$ ат. ед.

И. Станкевич

XI 529

1969

H₂O
NH₃ } расчётном. структура

Valko L., Pelikan P.,
Theoret. chim. acta, 1969, 14,
N1, 53-64

10

13 lvs