

1986

NH₃

1986

12 Д91. Динамика диссоциации NH₃($\bar{A}^1A_2''$). Эксперимент и теория. Dissociation dynamics of NH₃($\bar{A}^1A_2''$). Experiment and theory. Ashfold Michael N. R., Bennett Clive L., Dixon Richard N. «Faraday Discuss. Chem. Soc.», 1986, № 82, 163—175 (англ.)

Получена экспериментальная спектроскопич. информация о возбужденных электронно-колебательных уровнях состояния $\bar{A}^1A_2''$ молекул NH₃ и ND₃ и исследованы особенности преддиссоциации с этих уровней. В эксперименте осуществлялось двухфотонное лазерное возбуждение перехода $\bar{X} \rightarrow \bar{C}'$ и проводилась регистрация спектров рассеянного излучения на переходах $\bar{C} \rightarrow A$, $A \rightarrow \bar{X}$ и стимулированного с помощью перестраиваемого лазера излучения на переходе $\bar{C}' \rightarrow \bar{A}$. Анализ этих спектров показал, что скорости преддиссоциации с различных вибронных уровней $\bar{A}^1A_2''$ различаются более чем на 2 порядка, причем преддиссоциация $\bar{X}$ ND₃ идет медленнее, чем NH₃. Возбуждение валентных

М.П.

ф. 1987, 18, № 12

ND₃

колебаний усиливает преддиссоциацию обеих изотопных модификаций. С помощью трехмерного потенциала для спаренных мод растяжения проведено моделирование динамики распада молекулы NH_3 с уровней $v_1=1$ состояния $\tilde{A}$. И. С. В.



NH₃

1986

3 Б4545. Спектроскопия возбуждения и испускания флуоресценции из ридберговского состояния $\bar{C}'^1A_1'$ аммиака. Отождествление «полос Шустера» для аммиака. Fluorescence excitation and emission spectroscopy of the $\bar{C}'^1A_1'$ Rydberg state of ammonia: assignment of the «Schuster bands of ammonia», Ashfold M. N. R., Bennett C. L., Dixon R. N., Fielden P., Rieley H., Stickland R. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 216—227 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Изучены спектры двухфотонного возбуждения Фл в переходах между низшими вибронными уровнями системы полос NH₃ и ND₃ ($\bar{C}'^1A_1' - \bar{X}'^1A_1$) при детектировании полной Фл в переходе $C'^1\bar{A}_1 - A'^1A_2''$ и эмиссионные спектры Фл в этом переходе при двухфотонном возбуждении индивидуальных вращат.-колебат. уровней $\bar{C}'$ -состояния NH₃ и ND₃. Получены новые спектроскопич. данные для состояний $\bar{C}'$ и A'^1 и уточнен механизм

спектр

(4) 17

X. 1987, 19, N 3.

ND₃

преддиссоциации из $\tilde{C}'$ -состояния. Показано, что энергия колебат. уровня ν_1 в $\tilde{A}$ -состоянии очень низка, 2300 ± 50 и 1790 ± 50 см^{-1} соотв. в NH_3 и ND_3 . Подтверждено отнесение «полос Шустера», наблюдаемых в эмиссионном спектре тлеющего разряда в NH_3 , к переходу $\tilde{C}' - \tilde{A}$ между ридберговскими состояниями NH_3 , а не к оптич. переходам в аммониевом свободном радикале, как предполагалось ранее. В. Е. Скурат

МНЗ

1986

7 3 Л394. Флуоресцентная спектроскопия возбуждения и излучения ридберговского состояния C'^1A_1' молекулы аммиака: отнесение полос Шустера молекулы аммиака. Fluorescence excitation and emission spectroscopy of the C'^1A_1' Rydberg state of ammonia: assignment of the «Schuster bands of ammonia». Ashfold M. N. R., Bennett C. L., Dixon R. N., Fielden P., Rieley H., Stickland R. J. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 216—227 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

(М.П.)

Получены спектры возбуждения лазерной флуоресценции и диспергированные спектры флуоресценции при двухфотонном возбуждении отдельных колебательно-вращательных уровней ридберговского состояния C'^1A_1' . Определена колебательная частота ν_1 в состоянии C'^1A_1' молекул NH_3 и ND_3 : 2300 ± 50 и $1790 \pm 50 \text{ см}^{-1}$ соответственно. На основании анализа полученных данных установлено, что наблюдаемая ранее

ф. 1987, 18, № 3

линейчатая структура в спектре излучения молекулы аммиака в разряде (полосы Шустера) и приписываемая радикалам NH_4 в действительности отвечает переходам из состояния $\tilde{C}'A_1'$ молекулы NH_3 . Этот вывод согласуется с результатами работы (Watson J. K. G. et. al. «J. Mol. Spectr.», 1986, 115, 82) В. А. Е.

1986

NH₃

11 Л163. Дублеты Отлер—Таунса в сверхтонких переходах $^{14}\text{NH}_3$. Autler—Townes doublets in the hyperfine transitions of $^{14}\text{NH}_3$. Atherton P. S., Dalton B. J., Dagg I. R. «J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.», 1986, 19, № 3, 277—292 (англ.)

Исследована сверхтонкая структура инверсионного перехода $(J, K) = (1, 1)$ $^{14}\text{NH}_3$, обусловленная взаимодействием электр. квадрупольного момента ядер ^{14}N с электр. полем остатка молекулы. Методом модифицированного двойного микроволн. резонанса для 2 дублетов Отлер—Таунса измерены величины штарковских расщеплений, интенсивности и полуширины компонентов в зависимости от мощности переменного поля, осуществляющего накачку верхних уровней на частоте, близкой к частоте сверхтонких переходов. Представлено сравнение эксперим. данных с рассчитанными в двух приближениях модели столкновительной релаксации. Выполнен сравнительный анализ использованных приближений. Библ. 23.

В. К.

(М.Н.)

ф. 1986, 18, N 11.

NH₃

1986

/ 106: 144132z A new rigid motion algorithm for MD simulations. Ahlrichs, Reinhart; Brode, Stefan (Inst. Phys. Chem. Elektrochem., Univ. Karlsruhe, 7500 Karlsruhe, Fed. Rep. Ger.). *Comput. Phys. Commun.* 1986, 42(1), 59-64 (Eng). A new algorithm was developed to integrate the Newton equations of motion for rigid mols. in mol.-dynamics (MD) simulations of properties (e.g., potential energy, correlation functions) and transport processes (e.g., diffusion) in mol. fluids. The procedure integrates the equations for the center of mass and the principal axes of the moment of inertia tensor with the aid of the Verlet algorithm. Explicit equations were derived, and complications of the method of constraints were avoided. The new method is fast and stable, as is demonstrated in applications for NH₃, H₂O, and CF₄.

no mchus.
Hepruce,
pacem

(+2)  H₂O, CF₄

c. A. 1987, 106, N18 

NH₃

Om. 25688

1986

(21)

104: 233388p Fluorescence excitation and emission spectroscopy of the C¹A₁ Rydberg state of ammonia: assignment of the "Schuster bands of ammonia". Ashfold, M. N. R.; Bennett, C. L.; Dixon, R. N.; Fielden, P.; Rieley, H.; Stickland, R. J. (Sch. Chem., Univ. Bristol, Bristol, UK BS8 1TS). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(2), 216-27 (Eng). Low vibronic levels of the C¹A₁ electronic states of NH₃ and ND₃ were populated by coherent 2-photon excitation. New information about the spectroscopy and the predissocn. behavior of these levels was obtained through anal. of their subsequent C'-A fluorescence. ν_1 is very low in the A state, being $2300 \pm 50 \text{ cm}^{-1}$ for NH₃ and $1790 \pm 50 \text{ cm}^{-1}$ for ND₃. Some of the emissions obsd. from NH₃ discharges (the Schuster bands), and attributed previously to the ammonium radical, are demonstrated to arise from the C'-A Rydberg-Rydberg transition in NH₃, as recently proposed.

C.A. 1986, 104, N26

HN_3

1986

6 Б1335. Чисто вращательный спектр азотистоводородной кислоты в длинноволновой инфракрасной области. The pure rotational absorption spectrum of hydrazoic acid in the far-infrared region. Bendtsen Jorgen, Nicolaisen Flemming M. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 119, № 2, 456—466 (англ.)

чисто вращат.
спектр, М.П.

На фурье-спектрометре с разрешением $0,03 \text{ см}^{-1}$ исследован спектр поглощения молекулы HN_3 в обл.

Х. 1987, 19, № 6

20—400 см^{-1} при давл. 3—10 Торр. Идентифицированы линии 860 чисто вращат. переходов основного колебат. состояния и 250 вращат. переходов первых возбужденных состояний колебаний ν_5 и ν_6 . Определены значения вращат. и кватичных и секстичных центробежных постоянных. Для основного состояния получено: $A=20,38166$, $B=0,401437$, $C=0,392955$, $\Delta_J=1,67 \cdot 10^{-7}$, $\Delta_{JK}=2,632 \cdot 10^{-5}$, $\Delta_K=8,955 \cdot 10^{-3}$, $\delta_J=2,7 \cdot 10^{-9}$, $\delta_K=3,5 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$. Обнаружено сильное возмущение на линиях с $K_a=5-9$, обусловленное близостью вращат. уровней основного и возбужденного ($\nu_5=1$) колебат. состояний, связанных оператором центробежного искажения и кориолисова взаимодействия. Е. В. Алиева

HN_3

[Om. 26252]

1986

Bendtsen J., Hegelund F.,
et al.,

из спектров,
 ν_5, ν_6 ,
справкам
построен.

J. Mol. Spectrosc.,
1986, 118, N 1,
121-131.

NH₃

1986

105: 161154e The pure rotational absorption spectrum of hydrazoic acid in the far-infrared region. Bendtsen, Jorgen; Nicolaisen, Flemming M. (Dep. Chem., Univ. Aarhus, Aarhus, DK-8000 Den.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(2), 456-66 (Eng). The pure rotational absorption spectrum of NH₃ gas was measured at 20-400 cm⁻¹. The obsd. spectrum shows irregularities which may be ascribed to higher order c-type Coriolis interaction and centrifugal distortion interactions between the ground state and the ν_3 state. The present resolu. and waveno. accuracy allows the interaction to be obsd. for levels with $K_a = 6-9$. The detn. of the ground state parameters was performed by using wavenos. for transitions involving $K_a \leq 5$ only. In addn. to the pure rotational transitions in the ground state, some pure rotational transitions in the ν_3 and ν_8 states were identified.

(Bausam.)
checkmp

C.A. 1986, 105, 118

$\text{NH}_3^- (2)$

DM. 26115

1986

Baker J., Nobes R. H.,
Radom L.,

J. Comput. Chem., 1986,
7, N3, 349-358.

M.N.

HN₃

1986

31-Л191. ИК-спектр связанных взаимодействием Кориолиса колебаний ν_5 и ν_6 азотоводородной кислоты. Infrared spectrum of the Coriolis coupled vibrations ν_5 and ν_6 of hydrazoic acid. Bendtsen Jørgen, Hegelund Flemming, Nicolaisen Flemming M. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 1, 121—131 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом фурье-спектроскопии в области 300—900 см⁻¹ с разрешением 0,03 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения HN₃ при давл. 10—40 мм рт. ст. и комнатной т-ре. Для основных ν_5 , ν_6 колебательно-вращательных полос приведены значения частот ~ 840 линий вращательной структуры, измеренных с точностью $\sim 0,003$ см⁻¹. Представлена интерпретация колебательно-вращательных переходов, выполненная в приближении гамильтониана Уотсона с учетом взаимодействия Кориолиса α -типа в 1-м и 2-м порядке между ν_5 и ν_6 . Рассчитаны положения начала полос и значения молекулярных постоянных HN₃ в колебательных состояниях $| \nu_5 \nu_6 \rangle = | 10 \rangle$, $| 01 \rangle$.

В. К.

(м.п.)

фр. 1987, 18, N1

NH_3^+

1986

8 Б1090. Неэмпирические расчеты структуры свободных радикалов. 2. Анизотропные свойства положительных ионов NH_3^+ , $CH_3NH_2^+$, $(CH_3)_2NH^+$ и $(CH_3)_3N^+$. Ab initio calculations as the first step toward the structure of free radicals. 2. Anisotropic spin properties in the amino positive ions NH_3^+ , $CH_3CH_2^+$, $(CH_3)_2NH^+$, and $(CH_3)_3N^+$. Bonazzola L., Leray N., Roncin J., Ellinger Y. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 22, 5576—5578 (англ.)

В рамках неограниченного по спину неэмпирич. метода ССП (базисы 4-31ГФ и 6-31**ГФ) проведены расчеты катионов NH_3^+ , $CH_3NH_2^+$, $(CH_3)_2NH^+$ и $(CH_3)_3N^+$ с оптимизацией геометрии (в базисе 4-31 ГФ). Вычислены константы анизотропного взаимодействия на ^{14}N , ^{13}C и 1H в катионах метиламинов и спиновые плотности на атоме азота. Рассчитанные константы слабо меняются при расширении базиса. Различия между теорет. и эксперим. константами взаимодействия объяснены неучетом движения захваченных радикалов в матрицах.

Э. Д. Герман

М.П.

(+3) X

Х. 1987, 19, № 8

NH_3^+

[Dm. 25289]

1986

смысл,
ab initio
parente

Bonazzola L., Leray N.,
Roccaro J., et al.,

J. Phys. Chem., 1986, 90,
Nd2, 5573 - 5578.

NH₃

1986

† 6 Л158. Измерения дипольного момента перехода полосы ν_2 NH₃ с помощью лазерной штарковской спектроскопии молекулярных пучков. Transition dipole moment measurements for the ν_2 band of NH₃ with molecular beam laser stark spectroscopy. Cai W. Q., Gough T. E., Gu X. J., Isenor N. R., Scoles G. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 120, № 2, 374—380 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

(м.п.)

В области колебательно-вращательной полосы ν_2 ¹⁴NH₃ на переходах ASR (110), $\Delta M=0$ и ASQ (222), $\Delta M=0$, изучены осцилляции Раби, обусловленные резонансом между переходами и электрич. полем световой волны линий 10R(14) и 10P(34) CO₂-лазера в присутствии штарковского поля. Приведены эксперим. данные о зависимости частоты осцилляций от энергии лазерного излучения, полученные в условиях сверхзвукового молекулярного пучка, находящегося под ком-

ср. 1987, 18, № 6

бинированным воздействием штарковского поля и электрич. поля световой волны частотно-стабилизированного CO_2 -лазера. Разрешена сверхтонкая структура переходов, определяемая квадрупольным взаимодействием ядер азота. В результате анализа эксперим. данных рассчитано значение дипольного момента перехода полосы ν_2 .

В. А. К.



№3

1986

24 Б1333. Вращательная структура обертонов валентных колебаний N—H-связей аммиака: полосы пяти- и шестиквантовых переходов. Rotational structure of ammonia N—H stretch overtones: Five and six quanta bands. Co y Stephen L., Lehmann Kevin K. «J. Chem. Phys.», 1986, 84 № 10, 5239—5249 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Методами оптико-акустич. детектирования поглощения и двойного оптически-микроволнового резонанса с использованием лазеров на красителях исследован спектр поглощения аммиака вблизи 15450 и 18110 см^{-1} . Идентифицировано 318 линий полосы $5\nu_{\text{NH}}$ и 105 линий полосы $6\nu_{\text{NH}}$. Обе полосы составлены из A_1 и E компонентов и описаны в рамках модели локальных коле-

(м.п.)

х. 1986, 19, №24

баний. A_1 - и E -компоненты связаны между собой кориолисовым взаимодействием и с составным колебанием: $4\nu_{NH} + 3\nu_2^a$ резонансом Ферми, к-рый приводит к обращению инверсионного расщепления верхних состояний. Отношение интенсивности A_1 - и E -подполос составляет $0,3 : 0,7$ ($5\nu_{NH}$) и $0,35 : 0,65$ ($6\nu_{NH}$) в согласии с предсказанием модели локальных колебаний. Анализ вращат. структуры этих полос проведен с использованием лит. данных по вращательно-инверсионному спектру основного колебат. состояния. Оценены значения вращат. постоянных для верхних колебат. уровней.

Е. В. Алиева

NH₃

1986

7 11 Б1259. Исследование горячих переходов в аммиаке. Investigation of hot band transitions in ammonia. Cunha R. D., Kartha V. B., Job V. A. «Proc. 9th Int. Conf. High Resolut. Infrared Spectrosc., Liblice near Prague, Sept. 8—12, 1986. Progr. Sess. Abstr. Pap.» Prague, s. a., 109 (англ.)

С помощью фурье-спектрометра получен ИК-спектр поглощения аммиака с высоким разрешением. Идентифицировано и отнесено большое число горячих переходов. Определены интенсивности этих полос с применением перестраиваемого диодного лазера и оптогальванич. измерений.

Ю. Н. Панченко

М.А.

X. 1987, 19, N 11

NH₃

[Om. 24688]

1986

Coy S. L., Lehmann K. K.,

вращат.
постоян.

J. Chem. Phys., 1986, 84,
N10, 5239 - 5249.

NH₃

1986

№ 10 Д287. Многочастичная теория возмущений конечного поля. IX. Электрические свойства аммиака. Finite-field many-body perturbation theory. IX. Electric properties of ammonia. Diercksen Geerd H. F., Sadlej Andrzej J. «Mol. Phys.», 1986, 57, № 3, 509—528 (англ.)

Методом многочастичной теории возмущений четвертого порядка в рамках алгебраич. приближения с использованием нескольких расширенных базисов орбиталей гауссовского типа выполнены расчеты ряда электрич. свойств молекулы аммиака. Дано сравнение полученных результатов с эксперим. данными, а также результатами расчетов методом КВ и парными корреляционными методами. Отмечено, что найденные значения дипольного и квадрупольного моментов и дипольной поляризуемости NH₃ являются наиболее точными из всех, полученных ранее путем расчета, и очень хорошо согласуются с данными эксперимента. ч. VIII см. «Chem. Phys.», 1985, 96, 43. Библ. 88.

А. И. К.

ср. 1986, 18, N10

NH_3

1986

Edmiston C., Jarvie J.,
et al.

(Vanderpep.) J. Chem. Phys. 1986,
84 (12), 6907-15.

●
(see H_2O ; III)

$(NH_3)_2$

1986

Frisch Michael J.,
Del Bene Jeret E.,
et al.

4. 12.

J. Chem. Phys., 1986,
84, N 4, 2279-2289.

(cd . $(H_2O)_2$; III)

№3

(М.П.)

ср. 1987, 18, №2

1986

№2 Л139. Полосы ν_2 и ν_4 $^{14}\text{ND}_3$. The ν_2 and ν_4 bands of $^{14}\text{ND}_3$. Fusina L., Di-Lonardo G., Johns J. W. C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 2, 397—423 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом фурье-спектроскопии в области 450—1600 см^{-1} исследован ИК-спектр поглощения газовой фазы $^{14}\text{ND}_3$. Для полос ν_2 и ν_4 с разрешением $\sim 5 \cdot 10^{-3}$ и точностью $\sim 4 \cdot 10^{-4}$ см^{-1} измерены положения 2500 линий, обусловленных колебательно-инверсионно-вращательными переходами. В результате анализа эксперим. данных, выполненного в приближении эффективного колебательно-инверсионно-вращательного гамильтониана, учитывающего ряд колебательно-вращательных взаимодействий между ν_2 и ν_4 , рассчитаны точные значения молекулярных параметров для инверсионно-расщепленных компонент основного и возбужденных $\nu_2=1$, $\nu_4=1$ колебательных состояний. Определены значения 15 постоянных, ответственных за резонансные взаимодействия между ν_2 и ν_4 . Библ. 30. В. К.

ND₃

1986

6 Л191. Дейтерированный аммиак в криптоновой и азотной матрицах: спектроскопия высокого разрешения ν_2 моды. Deuterated ammonia in krypton and nitrogen matrices: high-resolution spectroscopy of the ν_2 mode. Gauthier-Roy B., Boissel P., Abouaf-Marguin L., Pourcin J., Verlaque P. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 115, № 1, 147—155 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии в области основной полосы ν_2 , 759 см^{-1} , исследован ИК-спектр поглощения ND₃ в Kr- и N₂-матрице при T -рах 7,5—20 К. Обнаружено, что в Kr-матрице полоса сохраняет вращательную структуру. С разрешением $0,06\text{ см}^{-1}$ измерены положения ряда линий структуры и предложена их интерпретация. Сравнением с данными для ND₃ в газовой фазе показано, что инверсионное расщепление возбужденного колебательного состояния уменьшается от $3,6\text{ см}^{-1}$ в газовой фазе до 2 см^{-1} в матрице, с уменьшением значения вращательной постоянной на 3%. Представлен анализ спектра ND₃ в N₂-матрице, выявляющий либрационное движение ND₃ с частотой либрации 133 см^{-1} .

В. К.

(Di)

ср. 1986, 18,
N 6

NH_3

1986

Gaw 7. F., Handy N.C.

NATO ASI Ser.,

Ser. C 1986, 166,

79-93.

амгариом.
сир. поет.

(сир. H_2O ; III)

NH₃

DM. 233291

1986

Graner G., Bürger H.,

λ_j° ;

J. Mol. Spectrosc., 1986,
115, N2, 393-418.

NH₃

1986

23 Б4036. Прямые измерения скоростей реакций $\text{NH}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{NH}_3 + \text{H}$ при температурах от 670 до 1000 К. Direct measurements of the reactions $\text{NH}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{NH}_3 + \text{H}$ at temperatures from 670 to 1000 K. Hack W., Rouveirolles P., Wagner H. Gg. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 11, 2505—2511 (англ.)

В условиях изотермич. разряда в потоке при полном давл. 4 мбар предпринято непосредственное определение констант скорости прямой (1) и обр. (—1) р-ции $\text{NH}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{NH}_3 + \text{H}$ с измерением конц-ий радикалов NH_2 и атомов Н. Выполнено два независимых эксперимента в условиях избытка H_2 и NH_3 . В исследованном диапазоне т-р зависимость константы скорости р-ции (1) описывается выражением $k_1(T) = 3,6 \cdot 10^{12} \cdot \exp[-(38 \pm 3) \text{ кДж/моль}/RT] \text{ см}^3/(\text{моль}^{-1} \cdot \text{с})$ и для р-ции (—) $k_{-1}(T) = 8,1 \cdot 10^{15} \cdot \exp-(60,9 \pm 4) \text{ кДж/моль}/RT] \text{ см}^3/(\text{моль}^{-1} \cdot \text{с})$. Оценены границы скорости гибели на стенках радикалов NH_2 и атомов Н, которые

Do;

X. 1986, 19, 123

оставляют $15,5 < k_n < 42$ и $10 < k_n < 40,7$ с⁻¹ соотв. Энергия диссоциации молекулы ~~NH₃~~ из данных по энергиям активации составляет $458 D(\text{H}_2\text{N}-\text{H}) < 472$ кДж/моль, что хорошо совпадает с величиной D , определенной из константы равновесия в диапазоне т-р 670—1000 К. При комн. т-ре энергия диссоциации составляет 457,5 кДж/моль. Сравнение полученных данных с имеющимися в лит. приводит к выражению для $k_{-1}(T) = 5,49 \cdot 10^9 T^{1,3} \exp(-55 \text{ кДж/моль}/RT)$ см³моль⁻¹·с⁻¹, справедливым в интервале т-р 400—2000 К.

Л. Ю. Русин

NH_3

1986

Hall G.G., Tsurinaga K.,

Theor. chim. acta, 1986,

ser. n.

69, N 5-6, 425-436.

(see.  H_2O ; III)

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

1986

105: 161148f Diode laser measurements of ammonia absorption lines over the range 620-740 cm^{-1} . Hermanussen, J.; Bizzarri, A.; Baldacchini, G. (Cent. Ric. Energ. Frascati, ENEA, Rome, Italy). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 119(2), 291-8. (Eng). Over 500 lines of $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$ in the ν_2 bands were measured with a diode laser at 620-740 cm^{-1} . The positions of the transitions are given with an uncertainty of $\sim 0.001 \text{ cm}^{-1}$. The line intensities were reported. About half the transitions were identified.

(ν_2)

c. A. 1986, 105, 18

NH₃

1986

13 Б1076. Симметрия выше точечных групп в молекулярной спектроскопии. Symmetry beyond point groups in molecular spectroscopy. Hougén Jon T. «J. Phys. Chem.», 1986, 90, № 4, 562—568 (англ.)

Краткий обзор теоретико-групповых подходов, используемых при описании спектров высокого разрешения изолированных молекул, для которых характерно внутримолек. движение большой амплитуды. Обсуждены границы применимости концепции точечной группы. Дана общая схема расширения групп симметрии, основанная на переходе к перестановочно-инверсионным группам, либо к расширенным (в частности, двойным) группам. Основные теорет. концепции конкретизированы на примерах молекул типа NH₃, (HF)₂, CH₃—C≡C—CH₃, PF₅, C₂H₃⁺. Библ. 28. Б. И. Жилинский

теор. расчет

(14) 18

X. 1986, 19, N13

NH₃

1986

' 104: 78066m Coherent anti-Stokes Raman spectroscopy of ammonia in supersonic molecular beams. Huisken, Friedrich; Pertsch, Thomas (Max-Planck-Inst. Stroemungsforsch., D-3400 Goettingen, Fed. Rep. Ger.). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 123(1-2), 99-101 (Eng). Supersonic mol. beams of NH₃ were investigated in the expansion region by using CARS. A Raman spectrum of the ν_3 vibration of NH₃ with resolved rotational structure and inversion splitting is reported. Comparison with calens. shows that the rotational temp. for the A nuclear spin modification is $T_A = 50$ K, which is 30 K lower than that for the E modification, indicating larger relaxation cross sections for the A species. The rotational distribution of each modification alone may be well described by a Boltzmann distribution.

(С.К.О., Ра-
узам. см. 4хх,
v₃)

©. A. 1986, 104, N10

NH_3

1986

Усено мимор.

Саммьку, Technol.

ср. н.

Adhes. and Seal., 1986,
30, N3, 97-99.

(ср. H_2O ; III)

NH₃

1986

12 Л198. Лазерная штарковская спектроскопия основной полосы $\nu_2^{15}\text{NH}_3$. Laser Stark spectroscopy of the ν_2 fundamental band of $^{15}\text{NH}_3$. Iwahori Jun'ichiro, Ueda Yoshifumi, Nakagawa Kuniaki. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 1—14 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом лазерной штарковской спектроскопии с разрешением, ограниченным доплеровским пределом, измерены положения ~ 2200 компонентов в 416 штарковских резонансах основной полосы $\nu_2^{15}\text{NH}_3$. С привлечением литер. данных о чисто вращательном спектре $^{15}\text{NH}_3$ выполнен колебательно-вращательный анализ наблюдаемых штарковских расщеплений. Найдено положение начала полосы, рассчитаны значения молекулярных постоянных и дипольного момента в основном и возбужденном колебательных состояниях. Определена зависимость дипольного момента от вращательных квантовых чисел. В области $800\text{--}1160\text{ см}^{-1}$ рассчитаны невозмущенные полем частоты и относ. интенсивности линий полосы ν_2 . В. К.

(М. П.)

Ф. 1986, 18, N 12.

NH₃

[Om. 25118]

1986

Ikueta S.,

Ap. Chem. Phys., 1986, 108,
abinitio; N3, 447-449.

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

[Om. 25672]

1986

Iwahori T., Ueda Y., et al.,

J. Mol. Spectrosc., 1986,

117, N 1, 1-14

(V₂)

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

1986

104: 176901z Laser Stark spectroscopy of the ν_2 fundamental band of ammonia- ^{15}N . Iwahori, Junichiro; Ueda, Yoshifumi; Nakagawa, Kuniaki (Dep. Phys., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(1), 1-14 (Eng). The ν_2 fundamental band of $^{15}\text{NH}_3$ was obsd. with a laser Stark spectrometer in Doppler-limited resolu. A set of 38 band consts. including the elec. dipole moment and its rotational dependence were detd. from 416 obsd. Stark resonances plus 3 sub-mm lines reported in the literature. The ν_2 -band absorption line frequencies at 800-1160 cm^{-1} and their relative absorption intensities were estd. from the band consts.

(P2)

c. A. 1986, 104, N20

NH₃

(om. 24215)

1986

Jug K., Epiotis N.D.,
Buss S.

маекыт.

сөпүктөт., J. Amer. Chem. Soc.,
теор.
раеиit. 1986, 108, N 13, 3640-

● -3644.

NH₃

1986

18 Б1194. Лазерная штарковская спектроскопия фундаментальной полосы ν_2 $^{15}\text{NH}_3$. Laser stark spectroscopy of the ν_2 fundamental band of $^{15}\text{NH}_3$. Iwahori Jun'ichiro, Ueda Yosheumi, Nakagawa Kuniaki. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 1, 1—14 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР.

(М.П.)

На лазерном штарковском спектрометре исследована полоса ν_2 молекулы $^{15}\text{NH}_3$. Конструкция спектрометра и результаты исследований ν_2 $^{14}\text{NH}_3$ описаны ранее («J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, 191). Наблюдалось свыше 400 штарковских резонансов. При анализе использованы также данные по субмиллиметровому спектру аммиака. Значения B , $D_J(\cdot 10^4)$, $D_{JK}(\cdot 10^3)$, $H_J(\cdot 10^7)$, $H_{JJK}(\cdot 10^7)$, $H_{JKK}(\cdot 10^7)$ и др. молек. постоянные (в см^{-1}): основное состояние — 9,919894; 8,42962; —1,55985; 2,290; —8,089; 9,937; состояние

X. 1986, 19, N 18

$v_2 = 1 - 9,960088; 9,22595; -1,84898; 2,587; -9,960;$
 $12,935; \nu_0 = 945,29617, (C' - B') - (C'' - B'') = -0,144085,$
 $D'_K - D''_K = 2,2808 \cdot 10^{-4}, H'_K - H''_K = -1,381 \cdot 10^{-7},$
 $\tau_{xxxx} = 5,446 \cdot 10^{-4}.$ Параметры $\mu_0, \mu_J (\cdot 10^4), \mu_K (\cdot 10^4)$
 (в Д), описывающие зависимость дипольного момента
 от J и $K, \mu = \mu_0 + \mu_J J(J+1) + \mu_K K^2$: основное состоя-
 ние $-1,47027; 1,888; -3,504$; состояние $v_2 = 1 - 1,2445;$
 $5,376; -8,056.$ Рассчитаны положение и интенсивности
 линий поглощения в обл. фундаментальной полосы v_2
 $^{15}\text{NH}_3$ в интервале $800 - 1160 \text{ см}^{-1}.$ В. М. Ковба



NH₃

1986

Kaufmann Elmar, Tidor
Bruce, et al.

see n. J. Comput. Chem., 1986,
7, N3, 334-344.

(see  LiH; III)

№3

1986

19 Б1270. Интерпретация спектра высокого разрешения дейтерированного аммиака в криптоновой матрице. Interpretation of the high-resolution spectrum of deuterated ammonia trapped in a krypton matrix. Lakhilifi A., Girardet C. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 33—42 (англ.)

В рамках разработанной ранее модели («J. Chem. Phys.», 1985, 83, 5506), основанной на разл. полного гамильтониана, описывающего движение изолированной молекулы в матрице, выполнен расчет спектра поглощения ND_3 в матрице из Кг в обл. полосы ν_2 (730—

спектр в
матрице

X. 1986, 19, N 19

810 см^{-1}). При расчете учитывали колебательно-инверсионный вклад в гамильтониан, включающий усредненный по вращат. и трансляц. степеням свободы Пт взаимодействия молекулы с матрицей, вклад, описывающий вращение в матричном окружении симметрии O_h , вклад решеточных колебаний, а также взаимодействие между оптич. состояниями изолированной молекулы (колебательно-инверсионно-вращательными) с фононами матрицы. Полученный синтетич. спектр полосы ν_2 ND_3 в Кг хорошо воспроизводит экспериментальный, зарегистрированный с высоким разрешением, включая контур линии $R(0_0)$.

С. Б. Осин

NH₃

[Am. 24333]

1986

Kartha V.B., Job V.A., et al.

chempr

J. Indian Chem. Soc.,
1986, 63, N 1, 22-28.

NH₃

1986

20 Б1050. Центробежные искажения в молекулах. Неэмпирический подход. Centrifugal distortions in molecules: An ab initio approach. Lohr Lawrence L., Pora Jean-Michel J. «J. Chem. Phys.», 1986, 84, № 8, 4196—4204 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

Рассчитаны центробежные искажения в молекулах NH₃, CH₄, BF₃, SiF₆ и H₂⁺. Расчет проведен методом ЭСП в базисе сгруппированных гауссовых ф-ций 6—31ГФ** для всех молекул, за исключением H₂⁺; для H₂⁺ использована двухпараметрич. волновая ф-ция в эллипсоидальных координатах. Геотерия оптимизирована аналитич. градиентным методом. Вычислены энергии и равновесные геометрич. параметры молекул, отвечающие заданным значениям вращательного квантового числа. Приведены энергии центробежной стабилизации, равные разности энергий жесткой молекулы с фиксированным моментом инерции и нежесткой молекулы, и изменения дипольного момента в результате центробежного искажения. Определены квартичные параметры центробежного искажения. Результаты вполне удовлетворительно согласуются в эксперим. данными.

А. А. Сафонов

Центробежн.
искажения

IX (74)

X. 1986, 19, n20

NH₃

1986

104-195680t Centrifugal distortions in molecules: An ab initio approach. Lohr, Lawrence L.; Popa, Jean Michel J. (Dep. Chem., Univ. Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(8), 4196-204 (Eng). An ab initio approach to the theoretical description of centrifugal distortions in mols. is presented. The method is based on the calcn. of the electronic energy changes and gradients accompanying rotationally induced distortions. A centrifugal distortion pathway in nuclear coordinate space is defined. Results are presented at the HF/6-31G** level for NH₃, CH₄, BF₃, and SF₆, and at the Guillemin-Zener level for H₂⁺. Quartic centrifugal distortion parameters were computed for each mol., with distortion anisotropies presented in the form of tensor coeffs. Centrifugally induced elec. dipole moment coeffs. are presented for CH₄ and BF₃ together with dipole moment changes for NH₃. Agreement with experiment and with conventional theor. descriptions is generally quite satisfactory, particularly for the tensor coeffs. representing the cubic anisotropy in the distortions of the spherical tops CH₄ and SF₆.

(Dy)

(43)

⊗



CH₄, BF₃, SF₆

C.A. 1986, 104, N22

МНЗ

1986

Н 11 Б1086. Применение линейной формы уравнений эквивалентности при определении силовых постоянных молекул аммиака. Маботинский Е. В. «Теор. и эксперим. спектроскопия». Днепропетровск, 1986, 110—113

Описано элементарное преобразование нелинейной формы уравнения эквивалентности в линейную. Рассчитаны нестандарт. спектроскопич. массы водорода и дейтерия молекулы аммиака. Определены гармонич. силовые постоянные и нулевые частоты этой молекулы. Резюме

М.П.

Х. 1987, 19, 211

NH_3^+

Om. 23137

1986

McKinley A.G., Claridge R.F.,
Harland P.W.,

cryst
b
manu-
se

Chem. Phys., 1986, 102, N3,
283-288

NH₃

[Om. 25259]

1986

Nakata M., Kuchitsu K.,

струк-
тура

Мунном караку кайсе,
J. Chem. Soc. Jap., Chem.
and Ind. Chem., 1986, N 11,
1446-1450. ●

(см. H₂O; III)

NH₃

1986

7 8 Л163. Запрещенные переходы $\Delta K = \pm 2$ и $\Delta K = \pm 3$ в колебательно-вращательных спектрах симметричных волчков; NH_3 и H_3O^+ . The $\Delta K = \pm 2$ and $\Delta K = \pm 3$ forbidden transitions in the vibrational-rotational spectra of symmetric top molecules NH_3 and H_3O^+ . Papoušek D., Urban Š., Spirko V., Rao K. Narahari. «J. Mol. Struct.», 1986, 141: Mol. Spectrosc. and Mol. Struct., 1985. Proc. 17th Eur. Congr., Madrid, 8—13 Sept., 1985. Pt A: Plen. and Sec. Lect., 361—366 (англ.)

Методом фурье-спектроскопии в области 1550—1892 см^{-1} исследован ИК-спектр поглощения колебательно-вращательной полосы $2\nu_2^{14}\text{NH}_3$ при давлении 1,5 мм рт. ст. С разрешением $\sim 0,005 \text{ см}^{-1}$ измерены частоты ~ 70 запрещенных колебательно-вращательных переходов с изменением вращательного квантового числа $\Delta K = -3$. Рассмотрены механизмы, ответственные за проявление в спектре полосы $2\nu_2$ -переходов с $\Delta K = \pm 3$, обусловленные взаимодействием близлежащих уровней.

М.А.

ср. 1986, 18, № 8

вследствие возмущений Кориолиса и взаимодействий l -типа, проявляющихся одновременно при учете нежесткости деформаций в молекуле. Определены значения параметров возмущения и представлено сравнение рассчитанных частот переходов с наблюдаемыми. Предсказаны частоты и интенсивности запрещенных переходов с $\Delta K = \pm 3$ в спектре полосы ν_2 для H_3O^+ и D_3O^+ .

В. К.



NH₃

Am 24130 !

1986

10 Л216. Испускание света радикалом NH($A^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma^-$) в результате двухфотонного фотолиза NH₃ на длине волны 193 нм. NH($A^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma^-$) emission from 193 nm two-photon photolysis of NH₃. Ni Tuqiang, Yu Shuqin, Ma Xingxiao, Kong Fanao. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 126, № 5, 413—416 (англ.)

Изучены спектры испускания радикала NH в области 331—343 нм (переход $A^3\Pi \rightarrow X^3\Sigma^-$), образующегося при двухфотонном фотолизе под действием импульсов лазера на ArF. Измерены время жизни свечения: $\tau = (470 \pm 40)$ нс и константы скорости тушения NH($A^3\Pi$) аргоном и молекулами O₂, NO, H₂, CH₄. Предложена схема двухфотонного возбуждения аммиака, приводящего к образованию NH($A^3\Pi$). В. К. Р.

(М.П.)

ср. 1986, 18, N10

NH₃

1986

19 Б1339. Запрещенные переходы с $\Delta K = \pm 2$ и ± 3 в колебательно-вращательных спектрах молекул типа симметричного волчка NH₃ и H₃O⁺. The $\Delta K = \pm 2$ and $\Delta K = \pm 3$ forbidden transitions in the vibrational-rotational spectra of symmetric top molecules NH₃ and H₃O⁺. Papoušek D., Urban S., Špirko V., Narahari Rao K. «J. Mol. Struct.», 1986, 141, 361—366 (англ.)

На фурье-спектрометре с разрешением 0,005 см⁻¹ в сочетании с многоходовой кюветой (оптич. длина 192 м, давл. 1,5 Торр) исследован ИК-спектр молекулы NH₃ в обл. 1550—1900 см⁻¹. Идентифицированы линии более 70 запрещенных переходов с $\Delta K = \pm 3$ ($J \leq 12$). Анализ спектра выполнен по нежесткой ангармонич. модели с учетом недиагональных элементов с $\Delta K = \pm 3$ центробежного гамильтониана и определены параметры при этих элементах для NH₃. По этим же параметрам оценены коэф. поглощения для ряда запрещенных переходов с $\Delta K = \pm 3$ в полосе ν_2 молек. ионов H₃O⁺ и D₃O⁺ и обсуждена возможность их наблюдения в ИК-спектрах этих ионов. Е. В. Алиева

колеб.-
вращат.
спектр

X 4

X. 1986, 19, N 19

NH₃

[Om. 23592]

1986

Papoušek A., Urban J.,
Špirko V., et al.,

(P₂)

J. Mol. Struct.,
1986, ● 141, 361-
366.

NH₃

1986

8 Б1063. Изменение геометрии при ионизации. Расчет энергий релаксации $I_V - I_A$ для NH₃, N₂H₄ и CH₃NH₂. Geometry change on ionization. Calculation of $I_V - I_A$ relaxation energies for NH₃, N₂H₄ and CH₃NH₂. Peel Barrie J. «Austral. J. Chem.», 1986, 39, № 8, 1281—1285 (англ.)

Методом Хартри — Фока с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера — Плессета 2- и 3-го порядков изучено электронное и геометрич. строение нейтр. молекул NH₃, N₂H₄ и CH₃NH₂ и их катионов. Энергетич. разности рассчитаны в базисе 6-31ГФ**, а колебат. частоты и энергии нулевых колебаний в базисе 6-31ГФ*. Для NH₃ и CH₃NH₂ энергия релаксации, $I_V - I_A$ не превышает ~1 эВ и хорошо согласуется с данными фотоэлектронных спектров и ион-молек. равновесия. Необычно большое $I_V - I_A$ для N₂H₄, к-рое составляет ~2,5 эВ и на 0,5—1,0 эВ превышает опытное значение, связано с более значительными изменениями геометрии при ионизации по сравнению с NH₃ и CH₃NH₂. Учет корреляции приводит к равномерному сдвигу величин I_V и I_A на ~1 эВ.

С. П. Долин

М.П.

(+2) 

X. 1987, 19, 148

NH₃

[Dm. 25207]

1986

Peel J.B.,

ab initio
pacem

Austral. J. Chem.,
1986, 39, N8, 1281-5.

HN₃

1986

12 Б4381. Фотолиз азотистоводородной кислоты излучением ArF лазера. Образование и кинетика NH(c¹π).
ArF-Laser photolysis of hydrazoic acid: formation and kinetics of NH(c¹π). Rohrer F., Stuhl F. «9th Int. Symp. Gas Kinet., Bordeaux, 20—25 July, 1986. Abstr.» [Bordeaux], s. a., F7/1—F7/3 (англ.)

Исследован Фт HN₃ при давл. 0,013—13 Па излучением ArF-лазера (30 мДж/см², 15 нс, 193,3 нм). Образование радикалов регистрировали по их Фл. Найдено, что на колеб. степени свободы NH приходится 1% полной энергии, на вращат. —10%. Вращат. т-ра составляет 800 К, квантовый выход NH (c¹π) 5·10⁻⁴. Излучат. времена жизни NH (c) : при $\nu' = 0,470 \pm \pm 15$, при $\nu' = 1,65 \pm 20$ нс в пределах нулевого давл. Вращат. релаксация в Ar (6600 Па) приводит к T_{вращ.} = 300 К уже за 50 нс. Табулированы поперечные сечения тушения NH (c), NH₂ (A³π) и OH (A²π) на 15 буф. газах.
Г. В. Шмерлинг

фотолиз

(4) X

X. 1987, 19, N 12

NH (c; образов. и кинетика)

NH₃

1986

†/2 Л160. Спектроскопия высокого разрешения полосы $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ ¹⁴NH₃. High-resolution spectroscopy of the $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ band of ¹⁴NH₃. Sasaki Hiroyuki, Schwendeman R. H., Magerl Gottfried, Poynter R. L., Margolis J. S. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 317—330 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом фурье-спектроскопии и методом, сочетающим технику лазерной и микроволн. спектроскопии, в области 770—1160 см⁻¹ исследован ИК-спектр поглощения ¹⁴NH₃ при давл. (0,5—2,25) мм рт. ст. С точностью $(2-5) \cdot 10^{-5}$ см⁻¹ измерены положения 138 линий колебательно-вращательной полосы, обусловленной «горячим» переходом $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$. В приближении эффективного гамильтониана, с учетом взаимодействия $\Delta(K-l) = \pm 3$ между колебательными состояниями $\nu_2=2a$ и $\nu_4=1a$, выполнен анализ эксперим. данных и определены значения 17 молекулярных постоянных ¹⁴NH₃ для состояния $\nu_2=2a$, найденных по методу наименьших квадратов. Для нескольких линий ¹⁴NH₃ и ¹⁵NH₃ измерены коэф. сдвига линий в зависимости от давл. Библ. 25.

В. К.

(М.Л.)

ср. 1987, 18, №2

NH₃

1986

№ 12 Л168. Спектр высокого разрешения полосы $\nu_2 = 2a \leftarrow \nu_2 = 1s$ молекулы $^{15}\text{NH}_3$. High-resolution spectroscopy of the $\nu_2 = 2a \leftarrow \nu_2 = 1s$ band of $^{15}\text{NH}_3$. Sasaki Hiroyuki, Schwendeman R. H. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 331—341. (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

(м.п.)

Методом двойного ИК-МВ-резонанса с использованием CO₂-лазера для накачки измерены частоты 24 переходов «горячей» полосы $2\nu_2(a) - \nu_2(s)$ молекулы $^{15}\text{NH}_3$. Еще 149 линий этой полосы измерено на фурье-спектрометре с разрешением 0,02 см⁻¹. Анализ спектров выполнен с учетом кватеричного, секстичного и октичного центробежного искажения, включая недиагональные элементы с $\Delta K = \pm 3$ матрицы вращательной энергии, и определены значения вращательных и центробежных постоянных. М. Р. Алиев

ср. 1986, 18, N 12.

NH₃

1986

7. 5 Б1336. Спектроскопия высокого разрешения полосы $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ молекулы $^{15}\text{NH}_3$. High-resolution spectroscopy of the $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ band of $^{15}\text{NH}_3$. Sasada H., Schwendeman R. H. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 331—341 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

На лазерно-микроволновом гетеродинном спектрометре и на фурье-спектрометре с разрешением $0,02 \text{ см}^{-1}$ исследована вращат. структура горячей ИК-полосы $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$. Идентифицированы линии 173 переходов. Анализ спектра выполнен с учетом недиагональных элементов с $\Delta(k-l_4)=\pm 3$ между состояниями $\nu_2=2a$ и $\nu_4=1a$ и поправок кватерционного, секстичного и октичного центробежного искажения и вращат. энергии. Определены значения 17 вращат. центробежных и резонансных параметров для состояния $\nu_2=2a$. См. пред. реферат. Е. В. Алиева

(м.п.)

Х. 1987, 19, N 5

NH₃

1986

№ 5 Б1335. Спектроскопия высокого разрешения полосы $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ молекулы $^{14}\text{NH}_3$. High-resolution spectroscopy of the $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ band of $^{14}\text{NH}_3$. S a - s a d a H., Schwendeman R. H., Magerl G., Poynter R. L., Margolis J. S. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 117, № 2, 317—330 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

На лазерно-микроволновом гетеродинном спектрометре, основанном на смешении излучения CO₂- и N₂O-лазеров с МВ-излучением, с точностью до $2 \cdot 10^{-5}$ см⁻¹ измерены частоты 21 перехода горячей ИК-полосы $\nu_2=2a \leftarrow \nu_2=1s$ молекулы аммиака. Эта же полоса исследована на фурье-спектрометре с разрешением 0,005 см⁻¹ и идентифицировано 170 линий ее вращат. структуры. Анализ спектра выполнен с учетом квартичного, секстичного и октичного центробежного искажения и резонансных недиагональных матричных элементов с $\Delta(k-l_4)=\pm 3$ между состояниями $\nu_2=2a$ и $\nu_4=1a$. Определены значения 17 вращат. центробежных и резонансных параметров, воспроизводящих частоты всех измеренных переходов с точностью до 0,00012 см⁻¹.

Е. В. Алиева

(м.п.)

X. 1987, 19, N 5

NH₃

1986

104: 233192v High-resolution spectroscopy of the $\nu_2 = 2 \leftarrow \nu_2$ band of ammonia (¹⁴NH₃). Sasada, Hiroyuki; Schwendeman, J. H.; Magerl, Gottfried; Poynter, R. L.; Margolis, J. S. (Dep. Chem., Michigan State Univ., East Lansing, MI 48824-1322 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(2), 317-30 (Eng). Twenty-one transitions of the $\nu_2 = 2 \leftarrow \nu_2 = 1$ s hot band of ¹⁴NH₃ were obsd. by a IR microwave sideband laser spectrometer with an abs. accuracy of 0.00002 cm⁻¹. One hundred and seventeen transitions of the band were obtained by a Fourier transform IR spectrometer at a resolu. of 0.005 cm⁻¹. A weighted least-squares anal. of these data was carried out to yield 17 mol. parameters for the $\nu_2 = 2$ a state. These parameters reproduce the exptl. frequencies with a root mean square deviation of 0.000123 cm⁻¹. To calc. the frequencies to this accuracy it was necessary to take into account the $\Delta(K-1) = \pm 3$ interaction between the $\nu_2 = 2$ a and $\nu_4 = 1$ a states.

(ν_2 , точная
структура)

с. А. 1986, 104, № 26

NH₃

1986

104: 215537g High-resolution spectroscopy of the $\nu_2 = 2 \leftarrow \nu_2 = 1$ s band of ammonia (¹⁵NH₃). Sasada, Hiroyuki; Schwendeman, R. H. (Dep. Chem., Michigan State Univ., East Lansing, MI 48824 USA). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 117(2), 331-41 (Eng). Twenty-four transitions of the $\nu_2 = 2 \leftarrow \nu_2 = 1$ s hot band of ¹⁵NH₃ were obsd. by an IR microwave sideband laser spectrometer. In addn., 149 transitions of the band were obtained by a Fourier transform spectrometer at a resolu. of 0.02 cm⁻¹. A weighted least-squares anal. was carried out and the root-mean square deviation of the fit is 0.00097 cm⁻¹. It was necessary to include the $\Delta(K - l) = \pm 3$ interaction between the $\nu_2 = 2 \leftarrow$ and the $\nu_4 = a$ states in the anal.

(ν_2 , UK)

C. A. 1986, 104, N24

NH₃

[Om. 24107]

1986

Sagarik K. P., Ahlrichs R.,
Brode S.,

~~mon~~

дипольн-
момент,
расчет,
OE

J. Mol. Phys., 1986, 57,
N 6, 1247-1264.

NH₃

[Om. 25694]

1986

Sazada H., Schwendeman R.H.,
et al.,

спектр
в широком
диапазоне
инфракрасного

J. Mol. Spectrosc., 1986,
117, N2, 317-330.

15 NH_3

[Om. 25695]

1986

Sasada H., Schwende-
man R.H.,

u.n.

J. Mol. Spectrosc., 1986,
117, N2, 331-341.

NH₃

Om. 24924

1986

Sellers H.,

curr.
room.

J. Mol. Struct. Theorchem.,
1986, 139, N3-4,
207-212.

МНЗ

1986

№ 17 Б1093. Неэмпирические расчеты строения, силовых полей и частот колебаний молекул некоторых органических азидов. The ab initio calculated molecular structures, force fields and vibrational frequencies of some organic azides. Sjøgren C. E., Nielsen C. J. «J. Mol. Struct.», 1986, 142, 285—290 (англ.)

Методом ССП в двухэкспонентном базисе вычислены равновесные геометрич. параметры, относит. энергии конформеров, квадратичные силовые постоянные и частоты колебаний молекул HN_3 и CH_3N_3 .
В. Т. Соломоник

силы
постоян.,
расчет
колебан.

(H) ☒

х. 1986, 19, N 17

NH₃

DM-24439

1986

105:123294t A quantum chemical study of the infrared absorption intensities of the isoelectronic C_{3v} systems ammonia, protonated water cation (H₃O⁺) and methyl(-). Swanton, David J.; Bacskay, George B.; Hush, Noel S. (Dep. Theor. Chem., Univ. Sydney, Australia, 2006 Australia). *Chem. Phys.* 1986, 107(1), 9-23 (Eng). The dipole moment derivs. and the IR absorption intensities for the isoelectronic, isostructural species NH₃, H₃O⁺ and Me⁻, calcd. by ab initio quantum chem. methods within the double harmonic approxn., are reported. The calcs. were performed at the SCF, CI and CPA" levels of theory using basis sets of triplet $\zeta + 2$ polarization functions quality. For H₃O⁺ and Me⁻, in the absence of adequate exptl. information, the calcs. are fully ab initio, since the equil. geometries and force consts. were computed. The applicability of the harmonic treatment to systems with inversion potentials is discussed, esp. with regard to H₃O⁺. The dipole moment derivs. of the 3 systems show regular trends in accordance with the amt. of electronic charge assocd. with the H atoms.

ab initio
pariem

(42) ~~47~~



H₃O⁺, CH₃⁻

C.A. 1986, 105, N 14

NH₃

1986

19 Б1335. Лазерная штарковская спектроскопия; пример исследования для основной полосы $\nu_2^{14}\text{NH}_3$. Laser Stark spectroscopy; a case study in the ν_2 fundamental band of $^{14}\text{NH}_3$. Ueda Y., Iwahori J. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 191—213 (англ.)

2
Как пример применения метода лазерной штарковской спектроскопии для анализа колебательно-вращат. полос на CO₂- и N₂O-лазерном штарковском спектрометре исследована с доплеровским разрешением основная полоса $\nu_2^{14}\text{NH}_3$. Всего в колебательно-вращательно-инверсионном спектре идентифицировано 1530 штарковских

X. 1986, 19, N 19

компонент. На основе данных для 360 штарковских резонансов и лит. данных для 67 линий определены значения 41 молекулярной постоянной. Определены частота полосы $\nu_0 = 949,88132(13) \text{ см}^{-1}$, дипольные моменты в колебат. состояниях $v=0$ и $v=1$ соотв., $\mu_0 = 1,47129(15)$ и $1,24478(230)$ Д и их зависимость от вращат. квантовых чисел. С использованием полученных данных вычислены частоты и относит. интенсивности линий поглощения основной полосы $\nu_2^{14}\text{NH}_3$ в обл. частот $805\text{—}1160 \text{ см}^{-1}$ с точностью около 10^{-4} см^{-1} в диапазоне интенсивностей $1\text{—}10\,000$. С. Н. Мурзин

NH₃

(М.П.)

1986
7 11 Л190. Лазерная штарковская спектроскопия. Исследование основной полосы ν_2 $^{14}\text{NH}_3$. Laser Stark spectroscopy. A case study in the ν_2 fundamental band of $^{14}\text{NH}_3$. Ueda Yoshifumi, Iwahori Jun'ichiro. «J Mol. Spectrosc.», 1986, 116, № 1, 191—213 (англ.)

Методом лазерной штарковской спектроскопии с разрешением, ограниченным доплеровским пределом, измерены положения ~ 1530 компонентов в 360 штарковских резонансах основной полосы ν_2 $^{14}\text{NH}_3$. С привлечением литер. данных о частотах инверсионных и инверсионно-вращательных переходов выполнен колебательно-вращательный анализ наблюдаемых штарковских расщеплений. Найдено положение начала полосы; рассчитаны значения молекулярных постоянных и дипольного момента $^{14}\text{NH}_3$ для основного и возбужденного колебательных состояний, определена зависимость дипольного момента от вращательных квантовых чисел. В области $800\text{—}1160\text{ см}^{-1}$ рассчитаны невозмущенные полем частоты и относ. интенсивности линий полосы ν_2 . Библ. 34. В. К.

ср. 1986, 18, N 11.

NH₃

1986

24 Б1292. Переходы с высокими J в полосе ν_2 молекул $^{14}\text{NH}_3$ и $^{15}\text{NH}_3$. High- J transitions in the ν_2 bands of $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$. Urban S., D'Cunha Romola, Mannheim Jon, Rao K. Narahari. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 1, 298—309 (англ.). Место хранения ГПНТБ СССР

На фурье-спектрометре с разрешением $0,005 \text{ см}^{-1}$ с использованием многоходовой кюветы с оптич. длиной пути 192 м при давл. 0,1—1,5 Торр исследованы ИК-спектры поглощения молекул $^{14}\text{NH}_3$ и $^{15}\text{NH}_3$ в обл. $500\text{—}1400 \text{ см}^{-1}$. Идентифицировано около 440 новых линий с высокими J (≤ 25) полосы ν_2 каждой из этих молекул: число измеренных линий в полосе ν_2 теперь составляет ~ 900 для обеих молекул. Из частот вновь измеренных линий и из значений вращат., квартичных и секстичных центробежных постоянных, вычисленных авторами ранее по линиям с малыми J , определены значения постоянных оптичного центробежного искажения [т. е. коэф. при $J^4(J+1)^4$, $J^3(J+1)^3$ и т. д. в выражении для вращат. энергии]. Е. В. Алиева

(М.П.)

Х. 1986, 19, № 24

NH_3

1986

№ 1 Л189. Переходы на уровни с высокими J в полосах ν_2 $^{14}\text{NH}_3$ и $^{15}\text{NH}_3$. High- J transitions in the ν_2 bands of $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$. Urban S., D'Cunha Romola, Mannheim Jon, Narahari Rao K. «J. Mol. Spectrosc.», 1986, 118, № 1, 298—309 (англ.) Место хранения ГПНТБ СССР

Методом фурье-спектроскопии исследованы ИК-спектры поглощения в области колебательно-вращательных полос ν_2 в $^{14}\text{NH}_3$ и $^{15}\text{NH}_3$. Приведены значения частот линий вращательных структур, измеренных с разрешением 0,005 и точностью 0,002 см^{-1} , обусловленных переходами в колебательно-вращательные состояния с $J \geq 12$. Определены интенсивности линий. С привлечением литер. данных о молекулярных постоянных, полученных из спектров, обусловленных переходами в состояния с меньшими значениями J , рассчитаны более точные значения постоянных центробежного искажения высшего порядка для основного и возбужденного состояний. Впервые для 445 и 443 из наблюдаемых для $^{14}\text{NH}_3$ и $^{15}\text{NH}_3$ линий измерены частоты и дана интерпретация соответствующих колебательно-вращательных переходов.

В. К.

М. Л.

ф. 1987, 18, N 1

¹⁴NH₃

(Om. 23672)

1986

(v₂)

104: 138541z Laser Stark spectroscopy; a case study in the v_2 fundamental band of ammonia-¹⁴N. Ueda, Yoshifumi; Iwahori, Junichiro (Dep. Phys., Univ. Tokyo, Tokyo, Japan 113). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 116(1), 191-213 (Eng). The v_2 fundamental band of ¹⁴NH₃ was obsd. with a laser Stark spectrometer in Doppler-limited resolu. A set of 41 consts. including the elec. dipole moment and its rotational dependence were detd. from 360 Stark resonances obsd. in the present work and 67 mm- and submillimeter-wave inversion and rotation-inversion lines reported in the literature. The rms residual of the fit is 3.1×10^{-4} cm⁻¹. Field-free transition frequencies of the band in the region 800-1160 cm⁻¹ were calcd. from the consts. and tabulated together with their estd. uncertainties and relative absorption intensities. Rotational dependence of the elec. dipole matrix elements of a C_{3v} mol. is presented on the basis of the conventional theory of vibration-rotation.

C.A. 1986, 104, N16

NH₃

1986

105: 51154x High- J transitions in the ν_2 bands of ammonia ($^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$). Urban, S.; D'Cunha, Romola; Manheim, Jon; Rao, K. Narahari (J. Heyrovsky Inst. Phys. Chem. Electrochem., Czechoslovak Acad. Sci., Prague, Czech.). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 118(1), 298-309 (Eng). The Fourier transform spectra measured using the multiple reflection absorption cell with a path length of 192 m are reported for the high- J transitions of the ν_2 bands of $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$. For >400 transitions which were assigned in both $^{14}\text{NH}_3$ and $^{15}\text{NH}_3$, these represent nearly 100% extension of the ν_2 data.

(ν_2)

C.A. 1986, 105, N 6

NH₃

Om. 36746

1986

104: 98506h Assignment of the Schuster band of ammonia. Watson, J. K. G.; Majewski, W. A.; Glowina, J. H. (Herzberg Inst. Astrophys., Natl. Res. Counc. Canada, Ottawa, ON Can. K1A 0R6). *J. Mol. Spectrosc.* 1986, 115(1), 82-7 (Eng). The Schuster band which is excited by elec. discharges or electron impact in NH₃, is a broad diffuse emission band with max. at 5672 and 5639 Å. The corresponding band in ND₃ has resolved rotational line structure, which is consistent with assignment to the 2₁¹ vibrational band of the C' ¹A₁-A¹A₂ electronic transition of ND₃. The corresponding 0-0 vibrational band is also present, although much weaker. The wavelength of the diffuse NH₃ band agreed with this assignment. The previous identification by G. Herzberg (1981) of this band as a transition of the NH₄ radical was based on the no. of intermediate bands for mixts. of NH₃ and ND₃, but this evidence is not unambiguous and can be interpreted consistently with the present assignment.

($\tilde{C}'^1A_1 - A^1A_2''$)

④ ND₃

c. A. 1986, 104, N 12

NH₃

1986

7 Л1148. Спектроскопия ионного провала как средство зондирования быстрых преддиссоциирующих центров: состояние $A^1A_2''NH_3$. Ion dip spectroscopy as a means of probing fast predissociating species: $NH_3A^1A_2''$ state. Xie Jinchun, Sha Guohe, Zhang Xiaoyuan, Zhang Cunhao. «Chem. Phys. Lett.», 1986, 124, № 2, 99—104 (англ.)

Разработана методика исследования быстрых процессов преддиссоциации молекул с использованием спектроскопии ионных провалов (комбинация ионной спектроскопии и метода оптико-оптич. двойного резонанса), где вследствие конкуренции процессов ионизации молекул через промежуточное резонансное состояние и вынужденной дезактивации промеж. состояния пробным излучением на более низкие уровни наблюдаются резонансные провалы в ионном токе. Модельные эксперименты выполнены на молекуле NH_3 . Исследован спектр состояния $\bar{A}$. Определен ряд вращательных постоянных. Измерено время жизни молекул в преддиссоциирующих состояниях, которое составило 120 фс. Проведенные оценки показали, что достижимо разрешение ≈ 50 фс.

М. Ю. Н.

(М.Н.)

Ф 1986, 18, N 7.

NH₃

om. 23333

1986

104:138413j Ion dip spectroscopy as a means of probing fast predissociating species: ammonia A^1A_2'' state. Xie, Jinchun; Guo, Guoche; Zhang, Xiaoyuan; Zhang, Cunhao (Dalian Inst. Chem. Acad., Chin. Acad. Sci., Dalian, Peop. Rep. China). *Chem. Phys. Lett.* 1986, 124(2), 99-104 (Eng). By using NH₃ A^1A_2'' state as an illustrative example, ion dip spectroscopy was developed into an effective means of probing fast predissociating species that should be applicable to a large no. of other interesting cases. The ion dip process studied was a folded optical optical double resonance: NH₃ $A^1A_2'' \xrightarrow{3h\nu_1} \text{NH}_3^+ C'' \xrightarrow{h\nu_2} \text{NH}_3^+ A$ with ion detection. Based on the Doppler rotationally resolved spectra, band origins of the $C'' \rightarrow A$ transition and rotational consts. for the NH₃ $Av_2'' = 0, 1, 2$ vibronic states were obtained, the latter with $\pm 0.06 \text{ cm}^{-1}$ accuracy. A lifetime for NH₃ $A^1A_2'' v_2'' = 1$ level as short as $120 \pm 10 \text{ fs}$ ($46 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ linewidth) was measured.

ll. n.

c. A. 1986, 104, N16

NH₃

Xie, Jinchun; Sha, Guohu,¹⁹⁸⁶
Zhang, Xiaoyuan; et al,

(X → C)

Wuli Xuebao 1986,
2 (4), 371-80

m.n.

Rotationally resolved ion
dip spectroscopy of ammo-

C.A. 1986, 105, N22, 1996404

via $X \rightarrow C \rightarrow A$ transitions.

NH₃

1986

Yeo G. A., Ford T. A.

расчёт
с.п.,

7. Mol. Street.,

1986, 141, 331-340.

Vi, u.s.s.r.,
с.п.р.к.т.:

(с.п. H₂O; III)

NH₃

10M. 23593

1986

Yeo G. A., Ford T. A.,

meop. J. Mol. Struct.,
pacrem. 1986, 141, 331-340.