

1974

NH₃

ommuseu 2649 1974

70374w Sextic centrifugal distortion constants of axially symmetric molecules. Aliev, M. R. (Inst. Spectrosc., Moscow, USSR). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 52(2), 171-6 (Engl). Expressions in terms of mol. parameters are obtained for the sextic centrifugal distortion consts. H_J , H_{JK} , H_{KJ} , and H_K of axially sym. mols. A numerical example for the NH₃ mol. is given which shows that the sextic distortion of NH₃ is normal. It is emphasized that the obsd. sextic distortion consts. provide addnl. information on the cubic anharmonic potential coeffs.

M. R.

C.F. 1974 81 N12.

1978

Центробежное искажение

NH₃

2 Д144. Константы центробежного искажения шестого порядка для аксиально симметричных молекул. Aliev M. R. Sextic centrifugal distortion constants of axially symmetric molecules. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 52, № 2, 171—176 (англ.)

Методом контактных преобразований в 4-м приближении получены общие выражения центробежных H -постоянных шестого порядка для молекул с симметрией C_{3v} через кубич. коэф. ангармоничности и другие молекулярные параметры. Вычисленные для молекулы аммиака значения H -постоянных согласуются с эксперим. данными. Отмечено, что эксперим. данные по значениям H -постоянных могут быть использованы как дополнительные данные при вычислении кубич. коэф. ангармоничности.

М. Р. Алиев

от мисс 2649

ф. 1975. №2

NH_3

NH_3^{++}

мтмск 2195

1974

20 Б94. Электронные состояния дважды ионизованного аммиака. Appell J., Horsley J. A. Electronic states of doubly ionized ammonia. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 9, 3445—3448 (англ.)

На основании измерения распределения поступательной энергии ионов H^+ , образованных при двухэлектронной перезарядке протонов с энергией 4 кэВ на NH_3 , построены спектры потерь, отнесенные различным электронным состояниям NH_3 . Для интерпретации эксперимента проведены два типа теор. расчета с использованием слейтеровских и гауссовых АО в рамках метода ССП с учетом взаимодействия конфигураций. Отмечается удовлетворительное согласие теории с экспериментом. Вертикальные энергии возбуждения первых трех состояний (1E , 1E и 1A_1) равны 3,36, 10,31 и 12,87 эВ (слейтеровский базис) и 4,45, 10,90 и 12,33 эВ (гауссов. базис); эксперим. величины для первых двух переходов 3,6 и 9,3 эВ.

Е. И. Дашевская

х. 1974. N20

2+

Вятские 2195

1974

 NH_3

(11 D263.) Электронные состояния дважды ионизованного аммиака. Appell J., Horsley J. A. Electronic states of doubly ionized ammonia. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 9, 3445—3448 (англ.)

На масс-спектрометре, снабженном камерой столкновений, исследовался процесс ионизации молекул аммиака (М) протонами с энергией 4 кэВ. Измерялось энергетич. распределение ионов H^- , являющихся продуктами столкновений. Зависимость распределения от давления газа-мишени позволила выявить результаты 1- и 2-кратных столкновений: $H^+ + M \rightarrow H^- + M^{2+}$ (1) или $H^+ + M \rightarrow H + M^+$, $H + M \rightarrow H^- + M^+$ (2). Измерены сумма потенциалов ионизации в случае (2): $21,7(X^2A_2' + X^2A_2'')$;

Электр
состояние

Ф. 1974 №11

④ м.с. ☒

26,9($X^2A_2'' + {}^2E'$) и 32,4(${}^2E' + {}^2E'$), а также потенциалы 2-кратной ионизации M : 35,3(1A_1); 38,9(1E) и 44,6(1E) с точностью не хуже $\pm 0,7$ эв, где в скобках указаны соответствующие электронные состояния. Методом самосогласованного поля вычислены энергии наименее состояний M^{2+} при равновесной геометрии нейтральной молекулы. Интерпретация эксперим. результатов опирается на правило сохранения спина в системе сталкивающихся частиц. Получено хорошее согласие между экспериментальными и вычисленными потенциалами двукратной ионизации аммиака.

Г. А. Вомпе

ammonia 2195- 1974

NH₃

68868s Electronic states of doubly ionized ammonia. Appell, J.; Horsley, J. A. (Lab. Collisions Ioniques, Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *J. Chem. Phys.* 1974, 60(9), 3445-8 (Eng). The double ionization potentials (DIP) of NH₃ were detd. by double charge transfer spectroscopy (A. et al., 1973, 1974) using an app. (J. Durup et al., 1969) which is essentially a mass spectrometer equipped with a collision chamber. Assignments of the exptl. DIP results were made on the basis of spin conservation rule (A et al., 1973). Ab initio SCF and CI calcns. were performed on the lowest lying electronic states of NH₃²⁺ at the equil. geometry of NH₃ in its ground electronic state. The calcd. vertical ionization potentials are compared with the exptl. values. The energy level assignments on the basis of DIP are discussed.

Г. Кб. max
напр

C.A 1974 81N12.

МНЗ

расчет
гаусс-
(Уо)

ж. 1975. №6

XIII - 2819

1974

6 Б13. Молекулярные расчеты с использованием сферических гауссовских орбиталей. Часть I. Оптимизация атомных параметров для атомов второго периода. Archibald Robert M., Armstrong David R., Perkins Peter G. Molecular calculations using spherical gaussian orbitals. Part 1. Optimisation of the atomic parameters for the first-row atoms. «J. Chem. Soc. Faraday Trans.», 1974, Part 2, 70, № 9, 1557—1569 (англ.)

Рассмотрена проблема использования сферич. гауссовских функций (СГФ) в молек. расчетах. Предложена методика построения базиса СГФ и проведения в этом базисе молек. расчетов, сочетающая достоинства метода лепестковых функций и метода плавающих СГФ. Рассмотрение ограничено атомами элементов 2-го периода. Атомный базис составлен из СГФ, центрированных на ядре, и СГФ, центры к-рых расположены на декартовых осях, так что геометрия их расположения обладает симметрией октаэдра. Положения центров плавающих СГФ и значения экспонент определены из условия минимума энергии данного атома с использованием прямого метода оптимизации (см. J. Assoc. Comput.

Mach, 1961, 8, 212), при этом для уменьшения числа варьируемых параметров принято, что эффективные радиусы СГФ данного набора образуют геометрич. прогрессию. При использовании таких базисных наборов в расчетах молекул предложено, не меняя расстояния центров СГФ до «своего» ядра, варьировать направление луча, вдоль которого центрированы СГФ, что позволяет смещать СГФ в область максимума электронной плотности молекул. Подобные базисные наборы с раз-

личным числом базисных функций построены для атомов 2-го периода. Рассмотрены также сгруппированные базисные наборы. В кач-ве примера проведены расчеты молекулы NH_3 при эксперим. геометрии. Приведены всевозможные энергетич. характеристики, потенциалы, напряженности и градиенты напряженности поля на ядрах, константы квадрупольного взаимодействия, заряды и заселенности перекрываний. Рассчитан также барьер инверсии NH_3 с оптимизацией геометрии плоской и пирамидальной форм молекулы. А. Багатурьянц

NH_3

XIII - 2819

1974.

кв. мет.
пакет

103473f Molecular calculations using spherical Gaussian orbitals. 1. Optimization of atomic parameters for first-row atoms. Archibald, Robert M.; Armstrong, David R.; Perkins, Peter G. (Dep. Pure Appl. Chem., Univ. Strathclyde, Glasgow, Scot.). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1974, 70(9), 1557-69 (Eng). The use of spherical Gaussian orbitals in LCAO-SCF-MO calcns. was discussed and the optimized parameters for the first-row atoms were calcd. using large basis sets. The energy and some properties of NH_3 were also detd., using a variety of basis sets. Larger basis sets gave reasonable total energy values and all of the sets gave good agreement with the exptl. properties.

C.A. 1975, 82 N16

№НЗ

XIII - 2635

1974

14 Б76. Определение ангармонических потенциал-
ных постоянных молекулы аммиака с применением рас-
ширенного базиса из одноцентровых волновых функций.
Белявская Л. В., Ярковой Г. А., Сорочинс-
кая В. Е., Стемпковская А. А., Морозов В. П.
«Теор. и эксперим. химия», 1974, 10, № 1, 99—103

сил. пост.

Вычислены адиабатич. пр-ные от электронной энергии
молекулы аммиака в расширенном базисе (включены
состояния $3s$ и $3p$) с применением ЛКАО с угловой за-
висимостью орбитальных коэф. При таком подходе
можно определить значительно большее число гармонич.
и ангармонич. силовых постоянных, характеризующих
взаимодействия угол — связь и угол — угол, чем при ис-
пользовании миним. базиса. Автореферат

ж. 1974. №14.

NH₃

XIII - 2635

1974

химичес.

сп-уи

137409m Determination of anharmonic potential states of an ammonia molecule using an expanded base of single-center wave functions. Belyavskaya, L. V.; Yarkovoi, G. O.; Sorochinskaya, V. E.; Stempkovskaya, A. A.; Morozov, V. P. (Dnepropetr. Khim.-Tekhnol. Inst., Dnepropetrovsk, USSR). *Teor. Eksp. Khim.* 1974, 10(1), 99-103 (Russ). The calcns. show that an introduction of the LCAO with angular dependence of orbital coeffs. to the single-center approx. of the NH₃ mol. calcns. (B., 1970) decreases markedly the no. of the anharmonic potential states of the mol. A table of the published and calcd. quadratic (10⁵ dynes/cm), cubic (10¹³ dynes/cm²), and quadratic (10² dynes/cm) potential states of NH₃ mol. are given. The results agree with those obtained by Y. Morino et al. (1968).

C.A. 1974. 80. N24

XIII - 346

1974

NH₃

геометр.

(16)

потенциал

ф-ции

8 Б39. Сбалансированный орбитальный базис при расчетах методом ССП конформационных энергий молекул. Bendazzoli G. L., Palmieri P., Pedullì G. F. Counterpoise orbital basis in SCF computations of conformational energies of molecules. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 29, № 1, 123—127 (англ.)

Изучены достоинства применения для расчетов разностей энергий конформаций методом ССП сбалансированного орбитального базиса (СОБ): для каждой конформации используется один и тот же набор базисных орбиталей, центрированных в тех точках, в которых находятся ядра всех возможных конформаций. Проведен расчет величины инверсионного барьера в NH₃ и барьера внутреннего вращения в радикале CH₂OH (I) на миним. базисе АО слейтеровского типа (с аппроксимацией гауссовыми функциями) и на расширенном СОБ. Введение СОБ приводит к значит. улучшению расчетных величин (для I барьер равен 1509 см⁻¹ на миним. базисе, 1003 на СОБ, а лучшее расчетное значение при полной оптимизации геометрии составляет 900 см⁻¹).

г. 1975.

№8

(+1)

X

Для I рассчитана потенциальная кривая внутреннего вращения, причем функции СОБ помещались в точки, соответствующие поворотам оси $O-H$ вокруг оси $C-O$ на углы 0° (плоская конфигурация), $\pi/6$, $\pi/3$, и $\pi/2$. Рассмотрена проблема сохранения свойств симметрии матричного представления фокиана при таком выборе базиса. При правильном учете симметрии хорошие результаты получаются не только для энергии, но и для таких св-в, как спиновая плотность. Вычисленные на разных базисах потенциальные функции I использованы для обсуждения t -рной зависимости константы сверхтонкого взаимодействия β -протона, связанной с t -рным изменением заселенности торсионных уровней молекулы. Порядок величины изменения константы в области от -50 до $+40^\circ$ воспроизводится правильно, причем при введении СОБ t -рный коэф. константы рассчитывается точнее.

М. Е. Ерлыкина

*4-7721

1974

NH₃

5685-2894

(1.1)

891-XIII-168

4 Д540. Спектры ИК-поглощения и комбинационно-го рассеяния аммиака при высоких давлениях и температурах. B u b a c k M. Infrarot- und Ramanspektrum des Ammoniaks bei hohen Drücken und Temperaturen. «Ber. Bunsenges. phys. Chem.», 1974, 78, № 11, 1230—1235 (нем.; рез. англ.)

Получены спектры ИК-поглощения и комб. рас. аммиака в области 3000—3600 см⁻¹ при давл. до 1250 атм и т-рах от критической до 300° С. При высоких т-рах и давлениях ИК-спектр в основном образован асимметричными ν_3 и $2\nu_4^2$ полосами, а комбинационный — симметричными ν_1 и $2\nu_4^0$. Определены изменения частот и интенсивностей полос при изменении т-ры и давления. Спектральные изменения указывают на увеличение высоты пирамиды молекулы NH₃ при высоких плотностях. Минимуму высоты соответствует плотность 0,44 г/см³. Библ. 31. *см. 16*

М. В. Тонков

ф. 1975. IV

NH₃

*4-7721

1974

147389k Infrared and Raman spectra of ammonia at high pressures and temperatures. Buback, M. (Inst. Phys. Chem. Elektrochem., Univ. Karlsruhe, Karlsruhe, Ger.). *Z. Bunsenges. Phys. Chem.* 1974, 78(11), 1230-5 (Ger). The ir absorption and Raman scattering of NH₃ mostly at supercrit. conditions were detd. at $\leq 300^\circ$ and ≤ 1250 bars. Continuous temp. and d. variation of band shape, max. frequency, and absorption or scattering intensity between 3000 and 3000 cm⁻¹ were studied. In addn. to the sym. (ν_1) and asym. (ν_3) valence vibrations a sym. ($2\nu_4^2$) and asym. ($2\nu_4^2$) overtone component of the bending vibration ν_4 occur in this region. The spectra permit a clear assignment of the various bands. The high-temp. high-pressure ir absorption is almost exclusively due to the asym. ν_3 and $2\nu_4^2$ vibrations. It was concluded that the height of the NH₃ mol. decreases with d. and passes through a min. at d. ~ 0.44 g/cm³.

C.A. 1975. 82. N22

25th Dec 1974

40704.8111

96200 02

1974

Fa, Ch, TC

NH₃ (pacer)

25-5502

k p. N 40704.8110

Burton P.G. Approximate molecular orbital theory: the case MO formalism.

II. Direct comparison with AB initio results. "Chem. Phys.", 1974, 4, N 2,

226-235

(англ.)

(cir. FH; III)

0143 4001

ВИНИТИ

NH_3

*У-7937

1474

10 Б250. Микроволновый спектр молекулы $^{14}\text{NH}_3$
в состоянии $\nu=000^01^1$. Cohen E. A., Poynter R. L.
The microwave spectrum of $^{14}\text{NH}_3$ in the $\nu=000^01^1$ state.
«J. Mol. Spectrosc.», 1974, 53, № 2, 131—139 (англ.)

В диапазоне 18—58 Гц на штатковском спектро-
метре фирмы Хюллет—Паккард измерен МВ-спектр
молекулы $^{14}\text{NH}_3$. Идентифицировано около 50 линий
инверсионных переходов с $J \leq 14$ первого возбужден-
ного колебательного состояния дважды вырожденного
деформац. колебания ν_4 (1627 см^{-1}), интенсивности
к-рых на 3 порядка меньше интенсивности линий ин-
версионных переходов основного колебательного со-

(ч.п.)

5163-111-69

г. 1975 № 10

стояния. Обнаружены l - и K -удвоения линий, обусловленные недиагональными элементами с $\Delta K = \pm 2$, $\Delta l = \pm 2$ и $\Delta K = \pm 4$, $\Delta l = \pm 2$ матрицы колебательно-вращательной энергии аммиака. Определены значения инверсионного расщепления $\Delta \nu_4 (J=0) = 32904,70$ Мгц, коэф. разложения $\Delta \nu_4 (J, K)$ по степеням квантовых чисел J и K (использованы как полиномиальная, так и экспоненциальная формы разложения), постоянных l -удвоения $q_0 = 10\,655$ Мгц, $q_J = 22,7$ Мгц, K -удвоения, $f = 1,958$ Мгц и дипольного момента $\mu_4 = 1,458 D$.

М. Р. Алиев

NH_3

ЖЧ - 7939

1974

2915

ЖЧ - 681

5 Д600. Микроволновый спектр молекулы $^{14}\text{NH}_3$ в состоянии $V=000^01'$. Cohen E. A., Poynter R. L. The microwave spectrum of $^{14}\text{NH}_3$ in the $v=000^01'$ state. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 53, № 2, 131—139 (англ.)

В диапазоне 18—58 Гц на штарковском спектрометре фирмы Хюлет — Пакард измерен микроволн. спектр молекулы $^{14}\text{NH}_3$. Идентифицировано около 50 линий инверсионных переходов с $J=14$ первого возбужденного колебательного состояния дважды вырожденного деформационного колебания ν_4 (1627 см^{-1}), интенсивности которых на 3 порядка меньше интенсивности линий инверсионных переходов основного колебательного состояния. Обнаружены l - и K -удвоения линий, обусловленные недиагональными элементами с $\Delta K=\pm 2$, $\Delta l=\pm 2$ и $\Delta K=\pm 4$, $\Delta l=\pm 2$ матрицы колебательно-вращательной энергии аммиака. Определены значения инверсионного расщепления $\Delta\nu_4(J=0)=32904,70$ Мгц, коэф. разложения $\Delta\nu_4(J, K)$ по степеням квантовых чисел J и K (использованы как полиномиальная, так и экспоненц. формы разложения), постоянных l -удвоения $q_0=10\,655$ Мгц, $q_J=22,7$ Мгц, K -удвоения, $f=1,958$ Мгц и дипольного момента $\mu_4=1,458$ Д.

(М.П.)

ф. 1975
N5

М. Р. Алиев

*4-7939

1974

NH₃

179322d Microwave spectrum in ammonia (nitrogen-14) in the $v = 00001^1$ state. Cohen, E. A.; Poynter, R. L. (Jet Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 53(2), 131-9 (Eng). The frequencies and assignments of 50 lines in the pure inversion spectrum of ¹⁴NH₃ in the 00001¹ vibrational state are reported in the microwave frequency region 18-53 GHz and in selected regions at ≤ 58 GHz. The $J = 0$ inversion frequency, K -type doubling const. K , $l = 2, -1$ and mol. dipole moment in this state are $32,904.7 \pm 2.0$, 1.958 ± 0.040 MHz and 1.459 ± 0.002 D, resp., where model inadequacies are included in the uncertainties of the 1st 2 parameters. The dipole moment measurements for this and the ground state are in excellent agreement with Stark laser measurements. An expression containing the effective l -type doubling const. was obtained from the combination of frequencies. A preliminary value for the l -type doubling const. is $10,655 \pm 20$ MHz.

52655-111-5915
B9-XIII-261u. b.
Cneup

C. A. 1974. 81 N26

40925.8711

TC, Ch, Ph

40892

NH₃

CL

1974

2435

Chong Delano P., Herring F. Geoffrey,
McWilliams Denis.

Perturbation corrections to Koopmans'
theorem. I. Double-zeta Slater-type-orbi-
tal basis.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 1, 78-84

(англ.)

0199, 1974

162 165

ВИНИТИ

X1-4479

41014.8730
Ch, Ph, TC

40892 02 1974
 NH_3 (7) X 4-6828

Chong Delano P., Herring F. Geoffrey,
McWilliams Denis.

Perturbation corrections to Koopmans' theorem. II. A study of basis set variation.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 3, 958-962

(англ.) (см. H_2O ; III)

0211011

181 181

203

ВИНИТИ

BSP-XI-1255

NH₃

1974

(u.n)

87856u Vibration-rotation bands of ammonia in the region 670 cm⁻¹-1860 cm⁻¹. Curtis, John B. (Ohio State Univ., Columbus, Ohio). 1974. 183 pp. (Eng). Avail. Xerox Univ. Microfilms, Ann Arbor, Mich., Order No. 75-11,332. From Diss. Abstr. Int. B 1975, 35(11), 5576.

C.A. 1975, 83 v10

41227.9114

Ch, TC

96615

*Молек.
№ Н₃ (суперф.)*

1974

*4-8011

Cyvin S.J., Cyvin B.N., Hargittai I.
Spectroscopic studies of the $AlCl_3 \cdot NH_3$
complex. "J. Mol. Struct.", 1974, 23,
N 3, 385-397

(англ.)

0268 ДИК

243 246 - 260

ВИНИТИ

41004.1802

Ex-C, Ph, TC, Ch

NH₃

(AP)

40771

02

1974

2537

Davis D. William, Rabalais J. Wayne. Model for proton affinities and inner-shell electron binding energies based on the Hellmann-Feynman theorem.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 17,

5305-5310

(англ.)

0205 пик

175' 1780197

ВИНИТИ

40807.8791
TC, Ch, Ph

4077102

1974

NH_3

4 Наполн

2260

Eaker Charles W., Hinze Juergen.

Semiempirical MC-SCF theory. I. Closed
shell ground state molecules.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 13,
4084-4039

(англ.)

0162 м.з.

135 136

5 7 5 4

ВИНИТИ

1974



unbezweifel
Zusatz.

C. A. 1974.

N_2O Laser

150603q Inversion of a microwave line of ammonia in an infrared-microwave double-resonance experiment. Fourier, M.; Redon, M. (Lab. Resonance Magn., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *J. Appl. Phys.* 1974, 45(4), 1910-11 (Eng). By using the R(30) N_2O laser line to sat. the ir $\text{saQ}(9, 6, 9)$ ($v_1 = 0 \leftrightarrow v_2 = 1$) vibration-rotation line of NH_3 , the inversion of the microwave $J = 9, K = 6, M = 9, v_2 = 0$, was obtained. Exact coincidence between the laser line and the ir NH_3 transition was realized by Stark-effect tuning. The variation of the Stark field through the exact coincidence permitted studying the evolution of the microwave line vs. the frequency mismatch of the pumping radiation.

C. A. 1974. 80: N26

40514.1812

Ch, Ph, TE

NH₃; ND₃
96201
протомиз

02

1974

13-4802

Gilles A., Masanet J., Vermeil C. Direct determination of the NH $b^1 \Sigma^+ \rightarrow \underline{x}^3 \Sigma^-$ energy difference.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 25, N 3,
346-347 (англ.)

0109

088 088

0 1 0 1

ВИНИТИ

H_2 ; LiH ; HF ; BeH_2 ; Mn , Li , $NaCl$.
 H_2O ; NH_3 ; CH_4 (empyrm., parcm) 1577
IX 4809

Golebiewski A., Nowak - Broelawik E.

Mol. Phys., 1974, 28, N5, 1283-1288 (rus.)

On the MC SCF theory of closed-
-shell systems. II. Two-by-two
rotation method and its
applications.

Rus. Chem. Rev., 1975, 45, 36

10

15
(9)

NH₃

XIII-2869

1974

11 Д188. Решение ангармонической задачи в теории колебаний многоатомных молекул методом разложения по гармоническим базисным функциям. Грибов Л. А., Ховрин Г. В. «Докл. АН СССР», 1974, 217, № 2, 307—310

Показано, что обратная ангармонич. задача решается в точных естественных координатах методом разложения в ряд по гармонич. базисным ф-циям. При решении рассматривается только колебательная часть ф-ции Гамильтона. Приводятся результаты расчетов для ряда молекул. Метод позволяет автоматически учитывать возможные резонансы. На примере молекулы аммиака показано решение ангармонич. задачи с учетом инверсионного расщепления.

Автореферат

ф. 1974. NH ☒ (+) теория колеб. мн. ат. молекул.

1974

XIII-2869

NH₃ND₃

55

C.A. 1974.

112976b Solution of an anharmonic problem in the theory of polyatomic molecule vibrations by the method of expansion in harmonic basis functions. Gribov, L. A.; Khovrin, G. V. (Mosk. S.-Kh. Akad. im. Timiryazeva, Moscow, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1974, 217(2), 307-10 [(Physics)] (Russ). A soln. of an anharmonic problem in the theory of polyat. mol. oscillations by the method of expansion in harmonic basis functions was applied to the anal. of the potential energy surface in the isotopic mols., H₂O and D₂O, H₂S and D₂S, ¹²CO₂ and ¹³CO₂, S¹⁶O₂ and S¹⁸O₂, and NH₃ and ND₃. Good agreement between calcd. and exptl. vibrational frequencies of NH₃ and ND₃ was obtained.

Jerzy Trau

C.A. 1974. 81. N 18.

NH₃

XIII-2485

1974

ND₃

no mem.
9p-448

159087c Analysis of anharmonic vibrations and the potential surface of an ammonia molecule. Gribov, L. A.; Khovrin, G. V. (USSR). *Opt. Spektrosk.* 1974, 37(3), 453-7 (Russ). The anharmonic vibration anal. was performed for NH₃ and ND₃ mols. The calcd. vibrational transitions of the mols. are compared with the exptl. result. The potential surfaces of the mols. were calcd. by using the accurate real vibrational coordinates and by using an inversion-calcn. method (involving a gaussian form of the perturbation inversion potential) for the normal modes of vibration and overtones.

C.A. 1974 81 N24

NH_3

ND_3

XIII - 2485

1974

12-Д16Г. — Анализ ангармонических колебаний и потенциальной поверхности молекулы аммиака. Григорьев Л. А., Ховрин Г. В. «Оптика и спектроскопия», 1974, 37, № 3, 453—457

Выполнен анализ ангармонич. колебаний молекул NH_3 и ND_3 и определены их потенц. поверхности методом, основанным на непосредственном использовании точных естественных колебательных координат и решении обратной спектральной задачи для основных колебаний, обертонов и составных частот. Резюме

Ф. 1974

N 12

XIII - 2485

1974

 NH_3 ND_3

(24 Б172.) Анализ ангармонических колебаний и потенциальной поверхности молекулы аммиака. Грибов Л. А., Ховрин Г. В. «Оптика и спектроскопия», 1974, 37, № 3, 453—457

Выполнен анализ ангармонич. колебаний молекул NH_3 и ND_3 и определены их потенциальные поверхности методом, основанным на непосредственном использовании точных естественных колебательных координат и решении обратной спектральной задачи для основных колебаний, обертонов и составных частот.

Резюме.

сильно

vi

x. 1974. N 24



Евобу

Dec. 1876

Accuracy of sp_{H} . ($\text{CH}_4, \text{CH}_3, \text{CH}_2, \text{CH}, \text{NH}_4^+, \text{NH}_3^+, \text{NH}_2^+, \text{NH}^+, \text{CH}_3^+, \text{CH}_2^+, \text{CH}^+, \text{OH}_3^+, \text{OH}_2^+, \text{OH}^+, \text{OH}, \text{H}_2\text{O}, \text{HF}, \text{FH}_2^+$)

Harisharan P.C., Popple J.A., X13791

Mol. Phys., 1974, 27, 41, 209-214 (corr.)

Accuracy of sp_{H} equilibrium geometries by single determinant molecular orbital theory.

17

Ref. 1974. 6D 162

140

90

NH_3

CH_4

$\epsilon_i; \nu_i$

X 3-5540

1974

10 Д280. Анггармоничность в многоатомных молекулах: анализ спектров обертонов валентных колебаний XH связей аммиака и метана с использованием модели локальных колебаний. Hayward Rowland J., Henry Bryan R. Anharmonicity in polyatomic molecules: a local-mode analysis of the XH -stretching overtone spectra of ammonia and methane. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 50, № 1—3, 58—67 (англ.)

Модель локальных колебаний применена для вычисления энергии обертонов валентных колебаний аммиака и метана. Данная модель в применении к валентным колебаниям аммиака и метана содержит три постоянные анггармоничности (X_{AA} , X_{AE} и X_{EE} для аммиака и X_{AA} , X_{AT} и X_{TT} для метана), значения которых оценены по зависимости X от частоты ω для двухатомных гидридов и с привлечением результатов расчета постоян-

Ф. 1974. N 10

41

ных ангармоничности из постоянных колебательно-вращательного взаимодействия. С использованием различных наборов значений для X -постоянных вычислены энергии колебательных уровней с $v \leq 6$ аммиака и метана и результаты сопоставлены с эксперим. данными. Отмечено, что в случае аммиака и метана модель локальных колебаний не дает такого хорошего согласия между вычисленными и измеренными значениями энергии уровней, как в случае бензола, рассмотренного авторами ранее.

М. Р. Алиев

NH_3

CH_4

$(\epsilon_i; \nu_i)$

ХУ-5540

1974

10 Д280. Анггармоничнос^{ть} в многоатомных молекулах: анализ спектров обертонов валентных колебаний XH связей аммиака и метана с использованием модели локальных колебаний. Hayward Rowland J., Henry Bryan R. Anharmonicity in polyatomic molecules: a local-mode analysis of the XH-stretching overtone spectra of ammonia and methane. «J. Mol. Spectrosc.», 1094, 50, № 1—3, 58—67 (англ.)

Модель локальных колебаний применена для вычисления энергии обертонов валентных колебаний аммиака и метана. Данная модель в применении к валентным колебаниям аммиака и метана содержит три постоянные анггармоничности (X_{AA} , X_{AE} и X_{EE} для аммиака и X_{AA} , X_{AT} и X_{TT} для метана), значения которых оценены по зависимости X от частоты ω для двухатомных

Ф. 1974. N10

(+1) $\boxtimes$

гидридов и с привлечением результатов расчета постоянных ангармоничности из постоянных колебательно-вращательного взаимодействия. С использованием различных наборов значений для X -постоянных вычислены энергии колебательных уровней с $v \leq 6$ аммиака и метана и результаты сопоставлены с эксперим. данными. Отмечено, что в случае аммиака и метана модель локальных колебаний не дает такого хорошего согласия между вычисленными и измеренными значениями энергии уровней, как в случае бензола, рассмотренного авторами ранее.

М. Р. Алиев

NH_3 , CH_4

(11.12) 43-5540

1974

101912f Anharmonicity in polyatomic molecules. Local-mode analysis of the XH-stretching overtone spectra of ammonia and methane. Hayward, Rowland J.; Henry, Bryan R. (Dep. Chem., Univ. Manitoba, Winnipeg, Manitoba). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 50, 58-67 (Eng). A transformation from anharmonicity consts. expressed in terms of normal modes to anharmonicity consts. expressed in terms of local modes is used in the anal. of the XH-stretching overtone spectra of NH_3 and CH_4 . The cases of zero and nonzero off-diagonal local-mode coupling are considered. A set of normal-mode anharmonicity consts. are generated and used to describe the overtone bands in terms of normal-mode components. The successful description of the overtone spectra by this method demonstrates the importance of off-diagonal normal-mode coupling. The limitations of a normal-mode representation for higher overtones are discussed.

C.A. 1974.80. N18

(71) 1

NH_3

Oct. 2054

1974

(m. n.)

u. k. chetp

138907j Interpretation of high resolution vibration-rotation spectra of the ammonia molecule near 6000 cm^{-1} . Herve-Hanotelle, M.; Grenier-Besson, M. L.; Guelachvili, G. (Lab. Spectrosc. Mol., Univ. Paris VI, Paris, Fr.). *J. Phys. (Paris)* 1974, 35(4), 335-52 (Fr). With a very high resola. lab. spectrum, the identification of the lines of the $\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$ band of the NH_3 was done by using the computed values of the energy levels of the ground and upper vibrational states (314 lines were assigned). This interpretation made possible the anal. of the J structure of $^RQ_{1K1}$ and $^PQ_{1K1}$ branches and the computation of inversion splitting energies of the upper vibrational state.

C.A. 1974. 80. N24

Отиски 2054

1974

 NH_3

Ji; m.n.

17 Б282. Интерпретация колебательно-вращательно-го спектра высокого разрешения молекулы аммиака в области 6000 см^{-1} . Hervé—Hanotelle M., Grenier—Besson M. L., Guelachvili G. Interprétation du spectre de vibration—rotation à haute résolution de la molécule d'ammoniac dans la région de 6000 см^{-1} . «J. phys.» (France), 1974, 35, № 4, 335—352 (франц., рез. англ.)

Вблизи 6000 см^{-1} при разрешении $0,0025 \text{ см}^{-1}$ измерен ИК-спектр молекулы NH_3 . Идентифицирована вращательная структура полосы $\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$, в т. ч. J-структура Q-ветвей. Отнесение квантовых чисел J и K к линиям выполнено на основании результатов расчета частот переходов по известным значениям молек. постоянных с учетом центробежного искажения вплоть до членов $\sim J^6$, кориолисова взаимодействия и зависимости инверсионного расщепления линий от J и K. Построены кривые зависимости частот переходов от $J(J+1)$. Приведены таблицы всех линий. М. Р. Алиев

X. 1974 N17

Оттиск 2054

1974

 NH_3 ν_2 ; м.м.

8 Д242. Интерпретация колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы аммиака в области 6000 см^{-1} . Hervé-Hanotelle M., Grenier-Besson M. L., Guelachvili G. Interprétation du spectre de vibration-rotation à haute résolution de la molécule d'ammoniac dans la région de 6000 см^{-1} . «J. phys.» (France), 1974, 35, № 4, 335—352 (франц.; рез. англ.)

С помощью спектрометрии Фурье получен спектр очень высокого разрешения аммиака в области $5600—6900 \text{ см}^{-1}$. Разрешена вращательная структура полосы $\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$. Приводятся спектрограммы отдельных участков спектра и измеренные частоты 314 линий, отнесенных к ветвям PR^s , PR^a , RR^s , RR^a (индексы s , a относятся к симметричным и антисимметричным компонентам инверсионного удвоения), при $J=0—12$; $K=0—$

р. 1974. №8

12, и к ветвям PQ^s , PQ^a и RQ^s , RQ^a , $J=0-9$; $K=0-9$, а также к ветвям RP^s , RP^a и PR^s , PR^a , $J=0-7$; $K=0-7$. Построены кривые зависимости частот ветвей от $J (J+1)$. Интерпретация спектра выполнена на основании ф-л 2 типов: в первых из них выделена энергия инверсионного удвоения, имеющая вид полинома по степеням чисел J и K , тогда как во-вторых эта энергия включена во вращательную и в колебательную энергию. Определены численные значения вращательных уровней типов s и a основного и возбужденного колебательных состояний. Для $J=0-9$ и $Kl=0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \pm 8, \pm 10, \pm 12$ определены значения энергии инверсии в возбужденном состоянии.

М. А. Ковнер

41014.6623

TC, Ph, Ch

96201

NH₃

02

1974

*4-6822

Hikida T., Ichimura T., Mori Y.

Mercury-photosensitized luminescence of
NH₃ at low pressure. "Chem. Phys. Lett.",
1974, 27, N 4, 548-551

(англ)

0212 пик

177 177-2 0 1

РИИИТИ

40919.6684

TC, Ch, Ph

49587

HNH₂

1974

0245-6278

Hopkinson A.C., Csizmadia Imre G. An ab initio molecular orbital study of the protonation of amines. "Theor. chim. acta", 1974, 34, N 2, 93-103

(англ.)

0193

157 160 1 85

ВИНИТИ

X1-4273

41021.4773

35223

02

1974

TC, Ch

NH₃

2595

Jarvie John O., Rauk Arvi, Edmiston Clyde.
 The effect of bond function polarization
 on the l.c.a.o.-m.o.-s.c.f. calculation
 of bond angles and energy barriers. "Can.
 J. Chem.", 1974, 52, N 15, 2778-2784

(англ., рез. франц. (см. H₂O; III)
 02.10.1974 г. пик)

204 204

2 0 8

ВИНИТИ

40730.7206
Ch, Ex-C, TC

NH_3

40771

02

1974

(A_{H^+})

2263

Johansson Allan, Kollman Peter A.,
Liebman Joel F., Rothenberg Stephen.
Substituent effects on proton
affinities of simple molecules.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 12,
3750-3754

(англ.)

0157

128 135

140

164

ВИНИТИ

4 0506.8736
TE, Ch, Ph

научн 40892

02-1974

ННЗ

*44691

Kalman Barry L.

XI-4035

Self-consistent extended Hückel theory.

II.

"J. Chem. Phys.", 1974, 60, N 3, 974-975

(англ.)

0103 БИИ

084 086

095

ВИНИТИ

NH_3

относит.
интенсив.

Л. 1974
N 16

1974
16 B254. Исследование столкновительной релаксации между вращательными уровнями NH_3 методом инфракрасного микроволнового двойного резонанса. Капо Satoru, Amano Takayoshi, Shimizu Tadao. Collisional relaxation among rotational levels of NH_3 studied by infrared-microwave double resonance. «Chem. Phys. Lett.», 1974, 25, № 1, 119—121 (англ.)

Измерено изменение относит. интенсивностей для 25 инверсионных МВ-переходов NH_3 при накачке колебательно-вращательного перехода $\gamma_2[{}^qQ-(8,7)]$ излучением $927,739 \text{ см}^{-1}$ $P(13)$ линии N_2O лазера. Использован метод двойной модуляции ИК- и МВ-излучения. Измерения проводили при комн. т-ре в области давл. от 25 до $35 \cdot 10^{-3}$ мм, плотность мощности ИК-излучения составляла 300 мвт/см^2 . Наибольшее изменение интенсивностей наблюдается для инверсионных переходов, столкновительно связанных с накачиваемым уровнем дипольными правилами отбора. Для переходов $I=9, K=7$ и $I=7, K=7$ наблюдается уменьшение интенсивности, соотв., на $2,4\%$ и $1,2\%$. Для остальных переходов изменения интенсивностей слабее в 10 и более раз, для нек-рых переходов с положит. и для других — с отрицат. знаком изменения интенсивности. С. Н. Мурзин

41003.7303
Ch, TC

NH_3

41197 02

1974

2531

Kawasaki Masahiro, Tanaka Ikuzo.
Emission of imino radicals in the $c^1\Sigma$
state formed from the photolysis of
ammonia, methylamine, and ethylenimine
at 123.6 nm.

"J. Phys. Chem.", 1974, 78, N 18, 1784-1789

(англ.)

0204 пик

189 191

0190

ВИНИТИ

50108.4552

Ph, TC

38106

NH₃

02

1974

*4-8002

Kirk R. M., Wilt P.M. Resolution and
frequency calibration performance of
Beckman IR-9 infrared spectrophotometer.
"Appl. Spectrosc.", 1974, 28, N 6, 536-
-540

(англ.)

0277 ПИК

248 253

0 2 6 9

0277

ВИНИТИ

40319.4613

Te, Ph, Ch

 NH_3

41125

непереработано

1974

X 4239

Kreiner W.A., Jones Harold. Investigation of collisional transfer of energy between hyperfine levels of ammonia by infrared-microwave multiple-resonance experiments. "J. Mol. Spectrosc.", 1974, 49, N 2, 326-329 (англ.)

050 052

059 0066 АММ ВИНТИ

1974

JH3

2 Д445. Исследование столкновительного переноса энергии в аммиаке методом многократных инфракрасно-микроволновых резонансов. Kreiner W. A., Eyser Achim, Jones Harold. Collisional transfer of energy in ammonia investigated by infrared-microwave multiple-resonance experiments. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 52, № 3, 420—438 (англ.)

Методами двойного и тройного ИК-микроволн. резонансов по изменению интенсивности микроволн. инверсионных переходов при накачке колебательно-вращательного перехода $\nu_a^9 Q(8,7)$ линией $P(13)$ лазера на N_2O и одного из инверсионных переходов с помощью мощного клистрона исследована вращательная релаксация молекул аммиака. Измерения выполнены для отдельных подуровней квадрупольной структуры. Показано, что изменение интенсивности всех инверсионных линий (J, K) при накачке, за исключением линий (7,7) и (8,7), обусловлено нагревом газа, а столкновительные переходы, приводящие к изменению интенсивности линий (7,7) и (8,7), подчиняются дипольным правилам отбора.

М. Р. Алиев

от 1975. №2

1974

NH₃interesting
Karef.
summary

54145w Intensities of rotational lines in combination bands for axially symmetric molecules of the group C_{3v}. Kwan, Yuen Y. (Jet. Propul. Lab., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 49(1), 27-47 (Eng). The interaction of vibration and rotation is considered in the computation of the intensities of rotational lines in the combination bands of axially sym. mols. of the group C_{3v}. The calcn. utilizes the contact transformation method through the 1st order of approxn. as outlined by Hanson and Nielsen. General formulas for the intensities of the lines in the parallel combination band ($\nu_1 + \nu_2$) and perpendicular combination band ($\nu_1 + \nu_3$) are obtained. To this order of approxn. the usual selection rules $\Delta J = 0, \pm 1$ and $\Delta K = 0$ are obsd. for the parallel combination band. For the perpendicular combination band the selection rules are more complicated, being $\Delta J = 0, \pm 1$, $\Delta J_{\text{rot}} = \pm 1$ and $\Delta K = \pm 1$ or -2 , $\Delta J_{\text{rot}} = -1$ and $\Delta K = -1$ or $+2$, $\Delta J_{\text{rot}} = \pm 3$ and $\Delta K = 0$. Specific intensity formulas are then given for the ($\nu_1 + \nu_2$) parallel and ($\nu_1 + \nu_3$) perpendicular combination bands of NH₃.

C.A. 1974. 80. N10

① obs. paper.

NH₃

1974

16 B255. Исследование аммиака при двойном инфракрасном и микроволновом облучении. Обнаружение соударений, для которых каждая молекула совершает переход типа $\Delta J=0$. Lemaire J., Thibault J., Herlemont F., Houriez J. Etude de l'ammoniac par double irradiation infrarouge hertzien mise en évidence des collisions pour lesquelles chaque molécule subit une transition de type $\Delta J=0$. «Mol. Phys.», 1974, 27, № 3, 611—624 (франц.)

Методом двойного ИК-МВ-резонанса с двойной модуляцией изучено квазистационарное и временное изменение интенсивности для МВ переходов с $\Delta J=0$, индуцированных столкновениями с молекулами с основного колебательного уровня ИК-накачки, при различных давлениях в чистом аммиаке. ИК-накачку осуществляли с помощью N₂O лазера мощностью 3 Вт на линии P₁₃, накачивали переход $asQ(8,7)NH_3$. Сигнальными служили инверсионные переходы в области 25 ГГц основного колебательного состояния NH₃ со значениями кванто-

2. 1974
N 16

вых чисел: $K \leq J \leq 6$. Давление NH_3 меняли от 0,2 до $24 \cdot 10^{-3}$ мм. Изменение относит. интенсивности для переходов с одним и тем же K уменьшается с ростом J , пренебрежимо мало для переходов $J \geq K+3$ или $K+4$ совсем отсутствует для переходов $K=1$ и наиболее значительно для переходов $K=3n$. Для всех переходов $K \neq 3n$ изменение относит. интенсивности увеличивается с уменьшением давления, в то время как для переходов $K=3n$ оно меняется слабо. Установлено, что обмен энергией при соударениях в значит. степени зависит от симметрии сталкивающихся молекул. Теор. рассмотрение на основе теории Андерсона не дает полного объяснения эксперим. фактов. С. Н. Мурзин

41126.7335
Ch, Ph, TC

NH_3

96201 02

1974

2791

(расчет)

ВР Х. - 11285

Maestro M., Moccia R., Zandomenighi M.

Calculation of the isotropic nuclear
spin spin coupling constants for
 H_2O , NH_3 and CH_4 .

(см. H_2O ; III)

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 3, 373-376

(англ.)

224 220 236

0244 ПИВНИТИ

41004.1801

Ch, Ex-Ch, TC

NH₃

40771

02

1974

2535

Martin R. L., Shirley D. A. The relation
of core-Level binding energy shifts to
proton affinity and lewis basicity.

"J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 17,
5299-5304

(англ.)

0205 окт

175 178 01 07

ВИНИТИ

ЛНЗ

оттиск 2234

1974

10 Д528. Измерение интенсивности поглощения некоторых линий полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ аммиака. Margolis Jack S., Kwan Yuen Y. The measurement of the absorption strengths of some lines in the $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ bands of ammonia. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 50, № 1—2, 266—280 (англ.)

Получены ИК-спектры поглощения газообразного аммиака в области $4200\text{--}4600\text{ см}^{-1}$ при давл. $0,5\text{--}20\text{ мм рт. ст.}$ с разрешением $0,05\text{ см}^{-1}$. Методом кривых роста с использованием контура Фойгта определены интенсивности 170 колебательно-вращательных линий перпендикулярной полосы $\nu_2 + \nu_3$ и 50 линий парал. полосы $\nu_1 + \nu_2$. Приведены табл. интенсивностей. Рассмотрены выражения для интенсивности линий симметричного волчка с учетом колебательно-вращательного взаимодействия. По эксперим. данным найдены параметры интенсивности переходов в приближении жесткого ротатора с точностью не хуже 1% и поправки, связанные с колебательно-вращательным взаимодействием. Библи. 8.

М. В. Тонков

и.к. спектр

ф. 1974
N10

NH_3

обтиск 2234

1974

21 Б243. Измерение силы поглощения для некоторых линий полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ аммиака. Margolis Jack S., Kwan Yuen Y. The measurement of the absorption strengths of some lines in the $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ bands of ammonia. «J. Mol. Spectrosc.», 1974, 50, № 1—3, 266—280 (англ.)

При разрешении $\approx 0,05 \text{ см}^{-1}$ и при давл. менее 20 мм измерены силы поглощения более 200 вращательных линий ИК-полос $\nu_1 + \nu_2$ (||) и $\nu_2 + \nu_2$ (⊥) молекулы аммиака вблизи 2,3 мкм. Результаты измерений проанализированы методом наименьших квадратов по ф-лам для интенсивности составных тонов, в к-рых учтены эффекты колебательно-вращательного взаимодействия 1-го порядка; интенсивности линий параллельной составной полосы зависят от двух параметров, а интенсивности линий перпендикулярной составной полосы зависят от трех параметров. Определены значения этих параметров и полной силы полос. М. Р. Алиев.

Силы
поглощения.
линий полос
 $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$

х. 1974
N21

NH_3 (измер. по 2-ам) 1974
отчек 2234

101924m Measurement of the absorption strengths of some lines in the $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ bands of ammonia. Margolis, Jack S.; Kwan, Yuen Y. (Space Sci. Div., California Inst. Technol., Pasadena, Calif.). *J. Mol. Spectrosc.* 1974, 50, 266-80 (Eng). The absorption strengths of >200 lines in the combination bands $\nu_1 + \nu_2$ (parallel) and $\nu_2 + \nu_3$ (perpendicular) of NH_3 at 2.3μ were detd. by using the curve of growth method and an av. spectral resolu. of 0.05 cm^{-1} . The studies were performed at low pressures, so that the lines are nearly Doppler shaped, thereby reducing the effects of collision broadening. The measured line strengths deviate, to a considerable extent, from those calcd. on the basis of a rigid sym. top model, revealing the effects of vibration-rotation interactions. Nonlinear least-squares analyses were performed on the obsd. line strengths, by using the intensity formulas derived by Kwan, which include the effects of vibration-rotation interaction up to 1st order approxn. Values for the intensity parameters were detd. from the anal.

C.A.
1974
80.118

50205.4735

Ex-C, TC, Ph, Ch

40771

NH₃

02

1974

3005

McCreery Jane Hylton, Hall George G.

Linear relations between molecular energies. "J. Amer. Chem. Soc.", 1974, 96, N 26, 7875-7878.

(англ.)

0291 пик

1974

NH₃

OCS

Время
релаксации
Нерезонансн.
поглощ.

8 Б257. Переходное излучение, нерезонансное переходное поглощение и микроволновая спектроскопия с фурье-преобразованием. McGurk J. C., Mader H., Hofmann R. T., Schmalz T. G., Flygare W. H. Transient emission, of f-resonant transient absorption, and Fourier transform microwave spectroscopy. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 9, 3759—3767 (англ.)

С использованием микроволн. фурье-спектрометра исследованы неустановившиеся процессы излучения и нерезонансного поглощения в газах NH₃ и OCS. По временной зависимости этих процессов определены значения времени T₂ релаксации наведенной поляризации для 8 инверсионных переходов и для перехода 1—2 OCS с различными значениями магнитного квантового

числа М. Показано, что в пределах погрешностей измерений T₂ от М не зависит. М. Р. Алиев

2. 1975 №8

(+) ☒

1974

 NH_3 OCS

неустав.
процессы
излучен.

4 Д573. Переходное излучение, нерезонансное переходное поглощение и микроволновая спектроскопия с фурье-преобразованием. McGurk J. C., Mäder H., Hofmann R. T., Schmalz T. G., Flygare W. H. Transient emission, of f -resonant transient absorption, and Fourier transform microwave spectroscopy. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 9, 3759—3767 (англ.).

С использованием микроволн. фурье-спектрометра исследованы неуставившиеся процессы излучения и нерезонансного поглощения в газах NH_3 и OCS . По временной зависимости этих процессов определены значения времени T_2 релаксации наведенной поляризации для восьми инверсионных переходов NH_3 и для перехода 1—2 OCS с различными значениями магнитного квантового числа M . Показано, что в пределах погрешностей измерений T_2 от M не зависит. М. Р. Алиев

Ф. 1975 № 4

(+1) ☒

NH_3

1974

17 Б285. О классической теории уширения под действием давления в микроволновой и инфракрасной областях спектра для аммиака. McMahon D. R. A., McLaughlin Ian L. On the classical microwave and infrared pressure broadening theory for ammonia. «J. Chem. Phys.», 1974, 60, № 5, 1966—1975 (англ.)

С помощью стохастич. ур-ния Лиувилля при рассмотрении молекулы аммиака как классич. гармонич. осциллятора определена функция, определяющая спектраль-

Х. 1974 № 17

ную форму МВ-линии. При низких давлениях вид функции соответствует теории Ван — Флека и Вайскопфа, при высоких давлениях функция соответствует сумме двух дебаевских линий. Теор. форма линии хорошо согласуется с эксперим. результатами. С помощью стохастич. оператора Лиувилля рассмотрено в общем виде влияние реориентации и соударений на инверсионную степень свободы молекулы аммиака. Учтен вклад фазовых изменений в инверсионной степени свободы и дипольной реориентации при соударениях в нерезонансную полуширину линии. Полученные результаты распространены на ИК-область спектра и сопоставлены с эксперим. результатами. С. Н. Мурзин

~~17-0000 — Задача о движении шаров, соударения, эффект~~

NH_3

1974

9 Д201. О классической теории уширения давлением
линий микроволнового и инфракрасного спектров ам-
миака. McMahon D. R. A., McLaughlin Ian L.
On the classical microwave and infrared pressure broad-
ening theory for ammonia. «J. Chem. Phys.», 1974, 60,
№ 5, 1966—1975 (англ.)

Метод, основанный на решении стохастич. ур-ния
Линувия для автокорреляционной ф-ции дипольного
момента, применен для вычисления уширения давле-
нием колебательно-вращательных линий аммиака.
С учетом влияния столкновений на внутренние степени
свободы фурье-преобразованием корреляционной ф-ции
получено общее выражение для формы линий как с

м. в; и. к.
спектр.

ф. 1974. № 9

учетом, так и без учета потерь за счет вращательных переориентаций. Показано, что вблизи центра линий вклад переориентаций в форму линий (а также в сдвиг центра линий) имеет такой же порядок величины, что и вклад изменения фазы внутренних степеней свободы при столкновениях, причем эти вклады не отделимы друг от друга. Выполнены оценки для линий инверсионно-вращательных спектров и ИК-полосы ν_1 молекул NH_3 и ND_3 при высоких давлениях (выше 1 атм) и получено хорошее согласие с эксперим. данными. Предсказано наличие еще неизвестного 2-го максимума на кривых микроволн. поглощения NH_3 и ND_3 при высоких давлениях.

М. Р. Алиев

41101.7674

Ph, Ch, TC

NH₃ (мол. св. ба)

23025 02

1974

2641

Mrozek J., Nalewajski R. Analysis of approximate ab initio treatments of molecular properties of H₂O and NH₃.

"Acta phys. pol.", 1974, A 46, N 2, 199-208
(англ.)

(смет. H₂O, III)
0225 ПИК

198 202 0217

ВИНИТИ

X1-4299

NH₃

Di

WK

XIII-3/74

1974

-1393401 Infrared absorption spectrum of ammonia with high spectral resolution. Moskalenko, N. I.; Zotov, O. V.; Demchuk, Yu. S. (USSR). *Tezisy Dokl. - Simp. Mol. Spektrosk. Vys. Sverkhvys. Razresheniya*, 2nd 1974, 59-61 (Russ). Akad. Nauk SSSR, Sib. Otd., Inst. Opt. Atmos.: Tomsk, USSR. The ir spectra of pure NH₃ and the mixt. NH₃ + N₂ were scanned with the spectral resolution of 0.03-0.5 μ at 1-15 μ . The max. value of the halfwidth of the spectral bands for the NH₃-NH₃ collision is 0.6 cm⁻¹ and the min. value 0.16 cm⁻¹. The self-broadening factor was changed as a function of the rotational and vibrational quantum no. The spectral parameters of NH₃ spectrum at 4462-6553 cm⁻¹ at the pressure $P_{\text{NH}_3+\text{N}_2} = 1$ atm are tabulated. The exptl. intensities of the spectral bands were used for the detn. of the parameters of *F*-factor which characterized the vibrational-rotational interactions in basic and combination NH₃ bands.

J. Vachek

C.A. 1975, 83 N16

1974

 NH_3

12 Д371. Исследование эффекта Штарка N^{14}H_3 методом двойного ИК-резонанса. Ouhaouin Michel. Stark effect on $^{14}\text{NH}_3$ by saturated absorption spectroscopy. «Colloq. int. CNRS», 1974, № 217, 155—160 (англ.; рез. франц.)

спектры

Получены спектры газообразного NH_3 в области колебательно-вращательной линии Q (8,7) полосы ν_2 методом двойного ИК-резонанса с лазером NO. Изучен эффект Штарка в поле 1,5—2 кв/см. При парал. поляризации лазерных пучков наблюдаются спектры с правилами отбора $\Delta m = 0$ и $\Delta m = \pm 1$, в которых, кроме обычных, замечены полосы, соответствующие доплеровскому пересечению уровней. При перпендикулярной поляризации пучков в спектре присутствуют только линии доплеровского пересечения. Достигнутое при низком давлении разрешение соответствует $\sim 0,5$ мгц. Приведены спектры. Библ. 5. М. В. Тонков.

ор. 1974 N 12

1974

 NH_3

24 Б241. Эффект Штарка на N^{14}H_3 при использовании спектроскопии насыщения поглощения. Ouhayoun Michel. Stark effect on $^{14}\text{NH}_3$ by saturated absorption spectroscopy. «Colloq. int. CNRS», 1974, № 217, 155—160 (англ., рез. франц.)

Эффект Штарка

Исследован эффект Штарка на ИК-переходе $Q(8,7)$ линии ν_2 основного перехода N^{14}H_3 по пересечению уровней, возникающему за счет эффекта Допплера, при насыщении поглощения. Для создания двух встречных коллинеарных световых пучков использовалась линия излучения $P(13)$ лазера на окиси азота. Электрич. поля составляли от 1,5 до 2 кв/см. Наблюдались штарковские компоненты с правилами отбора $\Delta M = \pm 1$ в трехуровневой системе и $\Delta M = 0$ в четырехуровневой системе, при этом удалось наблюдать квадрупольную структуру инверсионных уровней аммиака.

С. Н. Мурзин

x 1974. № 4

50213.6129

Ph, E, TC, NGU

41158

02

1974

NH_3 (спектр)

45-8075

Pine A.S. Doppler-limited molecular
spectroscopy by difference-frequency
mixing. "J. Opt. Soc. Amer.", 1974, 64, N12,
1683-1690 (англ.)

0297 пик

282 282 0 2 8 9

ВИНИТИ

NH_3

Polar R.,

1974

св-во осн
соедин.

Collect. Czech, Chem.

Comments, 1974, 39,
N10, 2877-30.

● (св. CH_4 ; III)

$\text{H}^+(\text{H}^+)$ (NH_4^+ , NH_3 , H_2O) XI4455'1974

Pullman A., Armbruster A.M.,
Int. J. Quant. Chem. Symp. 1974;
NB, 169-176 (aure). H, 136.

An ab initio study of the hydra-
tion and ammoniation of ammoni-
um ions.

Pu Xue, 1975, 12558

10

(9)

6

50303.7334
Ch, Ph, TC

NH₃ 40604

1974

X-8234

K p. N 50303.7304

X-8946

Raimondi M., Tantardini G.F., Simonetta M.

Ab initio valence bond treatment
of simple molecules.

"Int.J.Quant.Chem.", (Symp.) 1974, N 8, 285-291

(англ.)

283 287

0304

0312 пик ВИНТИ

40514.1809

Ch, Ph, TE

NH₃ND₃

96201

(chem)

0.2
vi

1974

2108

Ribbegaard Göran. A complex between ammonia and chlorine studied at 20°K in a nitrogen matrix.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 25, N 3,

333-337

(англ.)

0109

088 088 9 1 0 1

ВИНИТИ

NH₃

1974

Roos B.

Siegbahn P.

исслед
конфигур
взаимодействий

, Chem and Biochem Reac-
tive Proc. Int Symp, Jerusa-
lem 1973" Jerusalem 1974
15-20 Discuss, 21 (aunt)

(см HNO₃ - III)

41230.8872

Ch, Ph, TC

NH_3

40892 02
(7)

1974

437701

Sambe Hideo, Felton Ronald H.

BY-N-200

Calculation of the ionization potentials
of ozone and ammonia by a LCAO-X α
method.

"J.Chem.Phys.", 1974, 61, N 9, 3862-3863

(см. Oz; III) (англ.)

0,266 пик

243 246

0050

ВИНИТИ

40329.8874
Ch, Ph, Ex -C, TC

NH_3

40392 OK

1974
2341

Snyder Lawrence C.

Molecular dipole moments from SCF calculations in a Gaussian basis: comparison with experiment.

"J. Chem. Phys.", 1974, 61, N 2, 747-748

(англ.)

0179 [unclear]

162 165

ВИНИТИ

NH₃

1974

✓ 35227z CI calculations for the inversion barrier of ammonia. Stevens, Richard M. (Dep. Chem., Harvard Univ. Cambridge, Mass.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(5), 2086-90 (Eng). CI calcns. were performed for the planar and pyramidal forms of NH₃ using a near-Hartree-Fock basis set of STO's. Full single and double-excitation valence CI shows that the correlation energy for the barrier is small, less than 0.5 kcal/mole, a result in agreement with experiment. Several more approximate methods were found to yield similar results; however, the first-order wavefunction method gave a result of 2.5 kcal/mole for the correlation energy of the inversion barrier. Fully optimized SCF and CI calcns. were also performed for minimum basis sets: In this case it was found that the CI results were much worse than the SCF.

No

ref. Mex.
pacc

C. A. 1975, 22, 16

H_2O , D_2O , NH_3 XI-5330 1974.
(ангарм. потемн. ф-ция).

Сторчат Н.Т., Трофименко
В.Т., Белявская Л.В., Морозов В.Т.

Вопросы молек. спектроско-
пии, 1974, 4-6. (ред. Сечкарев
А.В., Коричнев А.В., изд. "Наука")

Определение (ангарм. потемн. ф-ция)
потенциальной функции...

С.А. 1975. 22 и 24. 16 1971а. 10 (Ф) 5

6 Б28. Расчеты барьера инверсии аммиака. Stevens Richard M. Cl calculations for the inversion barrier of ammonia. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 5, 2086—2090 (англ.)

Методом ССП МО ЛКАО в миним. и расширенном ($N/5s, 4p, 1d/H/2s, 1p$) базисах (МБ и РБ) АО слейтеровского типа с учетом конфигурац. взаимодействия (КВ) в различных приближениях проведены расчеты барьера инверсии аммиака. Расчеты в МБ выполнены с учетом только одно- и дважды возбужденных валентных конфигураций, а также с полным учетом валентного КВ. Геометрия и показатели экспонент в случае МБ полностью и независимо оптимизированы для плоской и пирамидальной форм. Расчеты в РБ выполнены для двух геометрий, отвечающих минимумам для плоской и пирамидальной форм и найденных в предыдущем расчете ССП в том же РБ (J. Chem. Phys., 1971, 55, 1725). В случае МБ расчет ССП воспроизводит эксперим. барьер (0,0092 ат. ед.) с относительно небольшой ошибкой в 20% (0,01148) и равновесный угол с ошибкой меньше 3%, тогда как учет КВ приводит к завышению барьера почти в 3 раза. Расчет ССП в РБ хорошо передает эксперим. величину барьера (0,0094). Расчет с учетом «полного валентного» КВ (ПВ КВ,

NH_3

(U_0)

XIII-2880

1974

④ Емелю!

ж. 1975. №6

учтены все одно- и дважды возбужденные валентные конфигурации) приводит к незначит. положит. корреляц. вкладу в барьер (0,00055). Исключение из ПВ КВ всех конфигураций, включающих 4 высшие канонич. МО, привело к небольшому уменьшению корреляц. энергии, но не изменило величины барьера. Исключение из ПВ КВ возбуждений с $2a$ -МО (к-рая соответствует $2s$ -АО атома N) приводит к уменьшению корреляц. энергии на 30%, но мало меняет величину барьера. Расчет энергии корреляции как суммы парных корреляц. энергий переоценивает ее величину примерно на 15%; однако эта ошибка мало сказывается на величине барьера. Волновая функция 1-го порядка (J. Chem. Phys., 1971, 55, 1720, 4798), а также полученная из нее итерациями по натуральным орбиталям, сильно занижают корреляц. энергию и на порядок завышают корреляц. вклад в барьер. Последующий учет КВ по теории возмущений (J. Chem. Phys., 1973, 59, 1872) и в особенности расчет КВ в базисе натуральных орбиталей, полученных из расчета по теории возмущений, дают значительно лучшие результаты, согласующиеся с ПВ КВ, но требуют гораздо больше вычислений, чем прямой расчет КВ с исключением 4 высших МО. Указано, что основным недостатком метода волновой функции 1-го порядка, а также расчета КВ в МБ, является отсутствие учета возбуждения на низшую невалентную орбиталь (в случае плоской формы — это низшая вакантная π -МО).

Обсуждены также результаты расчета ряда одноэлектронных свойств.

А. Багатурьянц

XIII-2860

1974

NH₃(U₀)₂

(3 Д210) Расчет методом КВ инверсионного барьера аммиака. Stovens Richard M. CI calculations for the inversion barrier of ammonia. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 5, 2086—2090 (англ.)

Методами ССП и конфигурац. взаимодействия (КВ) проведен расчет плоской и пирамидальной форм NH₃ в базисе орбиталей слэтеровского типа. Расчет на миним. базисе методом ССП с оптимизацией экспонент и геометрии дает ошибку в величине барьера ΔE, ~20% и величине равновесного угла HNH <3%; при использовании почти хартри-фоковского базиса

Ф. 1975 N 3

Ф.
ул.

(41) Ешвз



ошибка для ΔE снижается до $\sim 2\%$. В этом же базисе полный учет всех 1- и 2-кратно возбужденных конфигураций (без возбуждения 1a MO) понижает ΔE , вычисленную как разность энергий плоской и пирамидальной форм при равновесных геометриях метода ССП для этих форм, на 0,00055 ат. ед. (эксперим. величина барьера ΔE равна 0,0092 ат. ед.). Исследовано влияние различных упрощений при учете КВ. Расчеты с волн. ф-цией первого порядка как с итерациями по натуральным орбиталям, так и без них привел к сильно завышенным значениям ΔE (0,004—0,05 ат. ед.), также как и расчет методом КВ на минимальном базисе (0,0283 ат. ед.). Рассмотрены причины этих отклонений. Приведены результаты расчета методами ССП и КВ средних значений ряда одноэлектронных операторов для пирамидальной геометрии. Н. Ф. Степанов

NH₃

1974

177524t Bands of ammonia in the 3-micron region. Stout,
David A. (Ohio State Univ., Columbus Ohio). 1974. 300 pp.
Engl. Avail. Xerox Univ. Microfilm, Ann Arbor, Mich., Order
No. 75-3205. From *Diss. Abstr. Int. B* 1975, 35(8), 4098-9.

(м. в. центр)

с. А. 1975. 82. N26

1974

 NH_3 ; CH_2OH
(V₀)

7.5.5. The Coulomb repulse orbital basis method of conformational energies of molecules. Pizzagalli, G. L.; Pizzagalli, P.; Pedulli, G. F. (Ist. Chim. Fis. Spettrosc., Univ. Bologna, Bologna, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1974, 22(1), 123-7. (Engl.). The functional-Coulomb repulse idea of S. F. Boys and F. Bernardi (1970) was extended to SCF computation to improve the accuracy of the computed values of the conformational energies of mols. The same orbital basis is used to obtain the SCF energies for different mol. conformations. The procedure was used to calc. the barriers to inversion in NH_3 and to internal rotation in $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$ and the potential energy as a function of the internal coordinates and the temp. dependence of the 3J -proton magnetic coupling const. in $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$.

 44-7713
 44-54

C.A. 1975. 82 v12 44340m.

(+1)

18

1⁻, H₂, He, Be, 1X 4608 1974
2⁻, HF, O₂²⁻, H₂O, N₃⁻, NH₂²⁻, NH₂, NH₃,
CO, CN⁻, H₂CO, S₂²⁻, HS⁻, H₂S (A K protony).

Tamassy - Lentei J., Szaniszló J.,

Acta Phys., 1974, 35 (1-4), 201-11.

Calculation of the proton affinity of
several small molecules by the FSC
method. C.A. 1974, 80 N 20, 112398g 10/9

41111.1921

Ph, TC, Ch

25071

NH₃ OR.

1974

45-7170

Urban M., Polák R. On the use of localized orbitals for determination of contracted gaussian basis sets in ab initio molecular calculations.

"Collect. Czech. Chem. Commun", 1974,
39, № 9, 2567-2575 (англ.)

0229 пик

209 214

2:23

ВИНИТИ

4554-11

1974

NH₃

2 Д105. Распределение импульсов электронов в NH₃.
Van Hise James R., McDonald Dennis N.
Electron momentum distribution in NH₃ «J. Chem. Phys.»,
1974, 61, № 6, 2339—2341 (англ.)

Проведен расчет распределения импульсов электронов в связи N—H молекулы NH₃, использовались волн. ф-ции типа Гайтлера—Лондона. Расчет волн. ф-ции аннигилирующего позитрона выполнялся с учетом самосогласованных потенциалов атомов азота и водорода. Рассматривались аннигиляции 1) за счет взаимодействия с шестью электронами валентных связей и 2) за счет взаимодействия (1) дополненного учетом 2s электронов азота. Во всех случаях расчетные распределения заметно отличаются от определенных экспериментально. Сделан вывод, что в случае молекулы NH₃ предпочтительнее модель, согласно которой позитрон аннигилирует с двумя электронами верхней занятой самосогласованной МО.

В. И. Барановский

Ф. 1975. №2

H_2 , LiH , BeH_2 , CH_4 , NH_3 , $\overline{XI-4788}$ ¹⁹⁷⁴
 CH_3^+ (кв. мер. расsem). ~~0075759~~

Vesceius L., Frost A. A.,

J. Chem. Phys., 1974, 61 (7),
2983-4.

Ellipsoidal Gaussian molecu-
lar calculations. 0076 QK

(

10

⊕

50404.9062

98017

1974

Ex-CE, Ch, TC, DB

NH₃ (M)

4-8396

Voigt Bjørn. Studies in electronegativity. III. Comparison of molecular charge distributions and dipole moments calculated using the OCEE and the CNDO/2 schemes. "Acta chem. scand.", 1974, A28, N 10, 1068-1078
(англ.) 0331 пик

305 306

2 2

ВИНИТИ

NH_2^- , NH_3 , NH_4^+ (con. no. e.). 1974.

Volka K., Ksandr Z., XIII 2730

Sb. Vys. St. Chem. - Technol. Praze,
Anal. Chem., 1973, H9, 93-8.

Comparison of the vibrational
force field in the isoelectronic
series amide (1-) ion, ammonia,
and ammonium (+1)

C.A. 1974. 81 N4.18617 p. 10 (3)

1974

NH₃

OCS

И. В. Мурзин

6 Б369. Микроволновое излучение молекул, возбужденных методом быстрого прохождения. Weatherly T. L., Williams Quitman, Tsai Foch. Emission of microwaves by molecules excited by fast passage. «J. Chem. Phys.», 1974, 61, № 7, 2925—2928 (англ.)

Методом быстрого прохождения осуществляли возбуждение МВ-переходов, связанных с инверсионными линиями NH₃ ($J, K=3,3; 2,2; 1,1$) и вращательным переходом OCS ($J=2 \rightarrow 1$). Измерения выполнены на штарковской ячейке с источником излучения мощностью 5 мвт при давл. от 0,005 до 0,100 мм. Быстрое прохождение осуществляли с помощью эффекта Штарка со временем нарастания и спада поля $\sim 0,5$ мксек. Измеренные скорости затухания излучения для NH₃ (3,3) $0,0070 \pm 0,008$ мксек·мм и для OCS ($2 \rightarrow 1$) $0,023 \pm \pm 0,003$ мксек·мм согласуются с данными, полученными на основе теории уширения линий давлением.

С. Н. Мурзин

ж. 1975. № 6



NH_3

XIII - 2484

1974.

12 Д372. Штарковская спектроскопия высокого разрешения полосы ν_4 NH_3 с пленочным диодным лазером. Weber W. H., Maker P. D., Yeung K. F., Peters C. W. High-resolution stark spectroscopy in the ν_4 band of NH_3 using a thin-film diode laser. «Appl. Opt.», 1974, 13, № 6, 1431—1434 (англ.)

Изучен эффект Штарка в области полосы ν_4 газообразного NH_3 с помощью перестраиваемого диодного лазера PbTe . Пленочный лазер выращен на подложке BaF_2 и имел размеры $3 \times 30 \times 300$ мкм. Лазер работает при T -ре ниже 20°K , мощность излучения составляет несколько мкВт. Перестройка в интервале частот $\sim 1 \text{ см}^{-1}$ для одной моды осуществляется изменением электр. тока. Спектры в области отдельных колебательно-вращательных линий получены в кювете длиной 1 м с электр. полем $\sim 20 \text{ кВ/см}$. Спектральное разрешение $0,005 \text{ см}^{-1}$ определялось величиной доплеровского уширения. Определены величины инверсионного расщепления вращательных уровней и дипольные моменты в основном и возбужденном колебательном состояниях. Библ. 16.

М. В. Тонков

Di; m.m.

ф. 1974

№ 12

41126.7890
Ch, Ph, TC

NH_3 96201

02

1974

4-7344

Wood Melvyn H.

BP-XI-43.20

On the calculation of the excited states
of small molecules.

"Chem. Phys. Lett.", 1974, 28, N 4,
477-481 (англ.)

0243 ДИК

(см. 0; III)

226 226 - 235

ВИНИТИ

NH₄, H₃O, H₂F (γ). XI 4321 1974

Wright G.R., Brion C.E.,
Chem. Phys. Lett., 1974, 26 (4)
607-9.

Estimation of the excitation
and ionization energies of am-
monium, hydronium, and dihyd-
rogen fluoride radicals using
core analogies applied to K-shell
electron energy loss spectra.
C.A. 1974. 81 N16. 97491u

Сборник трудов

1974

NH_3

✓ 12 Д241 К. Спектроскопические методы, исключая щие доплеровское уширение возбужденных уровней простых молекул. Méthodes de spectroscopie sans largeur Doppler de niveaux excités de systèmes moléculaires simples. Aussois, 23—26 mai 1973. (Colloq. int. CNRS, № 217). Paris, CNRS, 1974. 246 p., ill. (франц. и англ.)

техника

Спектроскопия

В сборнике трудов конференции представлены 23 доклада, посвященные в основном двум аспектам техники спектроскопии под доплеровским контуром. Первый — методы, исключающие влияние доплеровского уширения при помощи селекции молекул с миним. проекциями скоростей на направление наблюдения, т. е. методы атомного и молекулярного пучка и насыщенного поглощения. Второй — методы магн. резонанса, такие, как двойной резонанс, эффект Ханле и т. д. Обсуждаются также вопросы, связанные с астрофизич. проблемами, стимулированным пересечением уровней, прогрессом в области лазеров, метрологией. Основными объектами эксперим. исследований были молекулы метана, $^{14}\text{NH}_3$.

I_2 , H_2 —

П. П.

ф. 1974
N 12



42