

1978

NH₃

1978

NH_3

CH_4

12 Д466. Регистрация спектров поглощения аммиака и метана в области 600-650 нм методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии (ВРЛС). Антонов Е. Н., Берик Е. Б., Колошников В. Г. «Ин-т спектроскопии АН СССР. Препр.», 1978, № 2, 22 с., ил. (рез. англ.)

колеб.-вращ. спектр.

Исследованы колебательно-вращательные спектры поглощения газообразных аммиака (I) и метана (II) в области 600—650 нм методом внутрирезонаторной лазерной спектроскопии (ВРЛС) при возбуждении излучением лазера на растворе родамина 6G. Зарегистрирована колебательно-вращательная структура полос $3\nu_1 + 2\nu_3$; $5\nu_3$; $6\nu_1 - \nu_4$ и $4\nu_1 + \nu_3$ I. Измерены длины волн, коэф. поглощения в максимумах линий и интегр. интенсивности линий поглощения I и II. Отмечено, что интегр. интенсивности линий поглощения 6050 и 6250 Å I в ~20 раз меньше интенсивности линии 6450 Å. Проведены количеств. измерения интенсивности ряда линий полосы 6190 Å II. Показано, что метод ВРЛС позволяет проводить абс. измерения интегр. интенсивностей полос поглощения с ошибками, не превышающими 10%. Библи. 20.

И. В. А.

ар. 1978, № 2

NH₃

number 6731 1978.

Bernardi F. et al.

Chem.
not.
revisions

J. Mol. Structure,
1978, 48, 243-48

At initio computation
of force ● constants.

NH_3

1978

Bernardi, Fernando, et al.

Gazz. Chim. Ital. 1978, 108(1-2)
27-32.

Ви, етукі



ser. H_2O - III

LiH , HF , H_2O , NH_3 (paccm 6c) BX-90 1978

Corvassetta V., Moccia R. 131

Chem. Phys. Lett., 1978, 57, N1, 134-138 (acc.)

Results of diagonal ARPA calculations for LiH , HF , H_2O and NH_3 .

CM. 6674

PNEPug., 1978, 12. A 153

10 (P)

1978

NH_3

Clark D.T.,

NH_3^+

Cromarty B.J., et al.

J. Electron Spectrosc. and
Relat Phenom., 1978,
13, N2, 85-90,

факт
д.и. сирова,
д.и. сирова,
д.и. сирова.

(см. CH₄, III)

NH_3^+ Ammonia 6518a 1978.

Colbourne S, et al.

confined.
molecules

J. Chem. Phys., 1978,
68 (8), 3574-80.

● (see. HOLL; III)

1978

Corderman R.R. et al.

Inorg. Chem., 1978, 17,
N6, 1585-88

NM_3

AH^+

Do

●
(Cell PF_3) III

НН₃
ND₃

Спектр И.К.
в матрице

[Оттиск 6046]

1978

9 Д359. ИК-спектры ND₃ и NH₃ в матрицах из Ar в области деформационных колебаний ν_2 . Cugley John A., Liberts Sandra, Pullin David E. The infrared matrix isolation spectra of ND₃ and NH₃ in a argon matrix in the ν_2 bending region. «Austral. J. Chem.», 1978, 31, № 2, 247—253 (англ.)

Изучены ИК-спектры поглощения (700—1200 см⁻¹) NH₃ и ND₃ в матрицах из Ar при 7—23° K. Выполнено отнесение колебательных частот ND₃. Полосы в области деф. кол. ν_2 ND₃ интерпретированы по модели газовой фазы с несколько измененными вращательными постоянными (эффективное значение $B' + B'$ принято для матрицы равным 9,85 см⁻¹ по сравнению с 10,25 см⁻¹ для газовой фазы). В случае NH₃ указанное отличие величин больше. Значение инверсного расщепления для ND₃ в Ar найдено равным $2,0 \pm 0,1$ см⁻¹. Отмечено наличие в спектре ND₃ в Ar-матрице ряда линий, не идентифицируемых по газофазной модели. Библи. 14.
С. Ф. Б.

Ф. 1978, № 3

NH₃

number 6046

1978

NH₃

Cugley J. A., et al.

Crustal
backscat.
map.

Austral. J. Chem.,
1978, 31, 247-53

1948

NH₃ND₃

J.
 chem
 & physics

88: 112843a The infrared matrix isolation spectra of ammonia-d₃ and ammonia in an argon matrix in the ν_2 bending region. Cugley, John A.; Liberts, Sandra; Pullin, David E. (Dep. Chem., Monash Univ., Clayton, Aust.). *Aust. J. Chem.* 1978, 31(2), 247-53 (Eng). The spectra of NH₃ and

ND₃ in an Ar matrix were obtained in the ν_2 (bending fundamental) region. The ν_2 region of ND₃ is interpreted in terms of a gas-phase model, with slightly altered rotational consts. Thus for the matrix an effective value of $(B'' + B') = 9.85$ is required compared with 10.25 cm⁻¹ for the gas phase. - This represents a smaller fractional change than for NH₃. The inversion splitting of ND₃ in the Ar matrix is clearly resolved and a value of 2.0 ± 0.1 cm⁻¹ deduced. However, there are extra lines in the spectrum of ND₃ which cannot be assigned on the basis of a gas-phase model. For NH₃ some vib-rotor lines are composite, in particular Q(1⁺) and Q(1⁻) are close triplets.

C.A. 1948, 88, 116

1978

NH_3

CH_3F

D_2O

(I_1)

(+2) $\otimes$

7 Б245. Новые линии лазеров непрерывного действия на D_2O , $^{12}\text{CH}_3\text{F}$ и $^{14}\text{NH}_3$ в далекой ИК-области. Danielewicz Edward J., Weiss Carl O. New

sw FAR-infrared D_2O , $^{12}\text{CH}_3\text{F}$ and $^{14}\text{NH}_3$ laser lines. «Opt. Commun.», 1978, 27, № 1, 98—100 (англ.)

Получены новые линии лазеров непрерывного действия на D_2O , $^{14}\text{NH}_3$ и $^{12}\text{CH}_3\text{F}$ в длинноволновой ИК-области. Оптич. накачку осуществляли CO_2 -лазером. Использованы линии $R(17)$ (D_2O , NH_3) и $R(15)$ (CH_3F). Возбуждаемые переходы, длины волн (в мкм), поляризация (относительно поляризации накачивающего излучения) и отнесение линий испускания в далекой ИК-области: $\text{D}_2\text{O}—v=0 \rightarrow v_2=1$, $10_{1,9} \rightarrow 9_{2,8}$; $112,6$, $\perp$, $9_{2,8} \rightarrow 9_{1,9}$ и $94,5$, $\parallel$, $9_{2,8} \rightarrow 8_{1,7}$; $^{14}\text{NH}_3—v=0 \rightarrow v_2=1$, $s(3,3) \rightarrow a(4,3)$; $290,2$, $\perp$, $a(4,3) \rightarrow s(4,3)$ и $87,4$, $\parallel$, $a(4,3) \rightarrow s(3,3)$; $^{12}\text{CH}_3\text{F}—v=0 \rightarrow v_3=1$, $(6,2) \rightarrow (6,2)$; $992,0$, $\perp$, $(6,2) \rightarrow (5,2)$.
В. М. Ковба

2.1979, № 4

NH₃

1978

Sitchfield Robert, et al.
Chem. Phys. Lett., 1978, 54,
NI, 57-60.

расчет
равновесия
результаты



см. СН-III

NH₃

1978

сверхмощ

Giardini - Guidoni G. et al.
Adv. Mass. Spectrom. Vol 7A,
Proc. 7th Int Mass Spectrom.
Conf., Florence, 1976
London, 1978, 175-181 (anno.)

(see. CO₂; III)

NH₃

Fresh P., Pullman A.

1978

Theor. chim. acta, 1978, 49,
n 4, 283-294.

Зеленый.
ультрафиолет.



1 м. H₂O III)

NH₃

1948

Гурьев Т. Л. и др.

Г. электр.
структ

13 Всес. Гурьев. совещ. по
химии кооператив. соедин.,
1948. М., 1948, 118

см. О₂ - II

МНЗ

«Мхи» 6328

1948

22 Б13. Расчет возбужденных состояний H_2O и NH_3 методом одноцентрового разложения. Hatan o Yasu-
yo, Nomura Tsutomu, Tanaka Kiyoshi. Cal-
culation of excited states of H_2O and NH_3 by the one-
center expansion approximation. «Int. J. Quant. Chem.»,
1978, 13, № 2, 207—220 (англ.)

Методом МО_ССП в приближении одноцентрового
разложения проведен расчет электронной структуры и
потенциальных кривых (ПК) для деф. кол. в основных,
возбужденных и ионизированных состояниях молекул
воды и аммиака. Рассмотрены деформации, сохраняю-
щие симметрию C_{2v} для молекулы воды и симметрию
 C_{3v} для молекулы аммиака. Для расчета ПК возбуж-
денных состояний применен метод улучшенных вирту-
альных орбиталей, предложенный Хантом и Годдардом.
ПК ионизированных состояний получены по теореме
Купманса. Для всех состояний одной молекулы исполь-
зовался один и тот же базис слейтеровских функций.
Орбитальные экспоненты у базисных функций, исполь-
зованных для описания занятых орбиталей, находились
из условия минимума энергии основного состояния при

(E_i, J)
Ссыл. на стр.
Равнов. СС. и.

⊠

2.1948, N22

эксперим. геометрии для каждой молекулы. Экспоненты базисных функций, описывающих виртуальные орбитали, находились минимизацией энергии соотв-щего возбужденного состояния при равновесной геометрии для основного состояния. Рассчитанные ПК, энергии возбуждения и ионизации, равновесные геометрич. параметры и силовые постоянные деф. кол. для основного, возбужденных и ионизированных состояний обеих молекул хорошо согласуются с эксперим. данными и результатами неэмпирич. расчетов в многоцентровом приближении. Силовые постоянные вал. кол. завышены примерно в 2 раза по сравнению с эксперим. значениями. Сделан вывод, что использованный метод является достаточно эффективным при расчетах электронных св-в возбужденных состояний ридбергова типа.

В. Б. Павлов-Веревкин



NH_3

1948

Hiberiy P.C., Reforestier C.

метод
рациона.
моек.
орбитали?

J. Amer. Chem. Soc., 1948,
100, n 7, 2012-2014

см. BH_3 ; III

NH₂H

Ommece 6453 1978

Hopkinson A C
etal.

kb, acc,
factes
reception
mccy.

Sub, J. Orman
chem, 1978, ~~12~~ 13

349-66

МНЗ

(22)

1978
16 Б276. Инфракрасная — микроволновая двухфотонная спектроскопия полосы ν_2 аммиака с $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ - и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ -лазерами. Jones Harold. Infrared-microwave two-photon spectroscopy with $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ lasers of the ν_2 -band of ammonia. «Appl. Phys.», 1978, 15, № 3, 261—264 (англ.)

При использовании ряда лазерных линий в области частот от 887 до 1096 см^{-1} $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ - и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ -лазеров и перестраиваемого МВ-излучения в диапазоне частот 14—34 ГГц измерено 40 ИК—МВ двухфотонных переходов в полосе ν_2 аммиака. При уровне МВ-мощности 10 мвт/см² зарегистрированы двухфотонные переходы с отстройкой от частоты лазерной линии вплоть до 11 ГГц. Частоты большинства переходов измерены с точностью ± 15 МГц. Для четырех переходов измерены двухфотонные лэмбовские провалы с точностью ± 3 МГц. За исключением нескольких линий измеренные частоты согласуются в пределах точности измерений с вычисленными на основе 25 известных молек. постоянных для аммиака. Расхождения в частотах для нек-рых линий связаны с искажением формы линий, случайными резонансами и эффектами центробежного искажения.

С. Н. Мурзин

2: 1978, № 16

1948

МНЗ

8 Д481. Инфракрасномикроволновая двухфотонная спектроскопия ν_2 -полосы аммиака с использованием $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ - и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ -лазеров. Jones Harold. Infrared-microwave two-photon spectroscopy with $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ and $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ lasers of the ν_2 -band of ammonia. «Appl. Phys.», 1978, 15, № 3, 261—264 (англ.)

12

С использованием лазеров на $^{13}\text{C}^{16}\text{O}_2$ и $^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ с плотностью мощности 6—60 Вт/см² и клистронов (5—10 мВт/см²) методом двухфотонной ИК-МВ-спектроскопии выполнены прецизионные измерения частот 30 вращательных линий полосы ν_2 молекулы аммиака в области 887—1096 см⁻¹: погрешность измерений не превышает 0,0005 см⁻¹. По провалам Лэмба насыщенного двухфотонного поглощения измерены частоты 4-х линий с точностью до 0,0001 см⁻¹. Показано, что измеренные частоты всех переходов, за исключением $Q(7,7)_{as}$ и $R(4,3)_{as}$, в пределах погрешностей измерений согласуются с их значениями, вычисленными по литературным данным для молекулярных констант: значительные расхождения (до 0,003 см⁻¹) между вычисленными и измеренными частотами переходов $Q(7,7)$ и $R(4,3)$ интерпретированы центробежным резонансом.

М. Р. Алиев.

Ф. 1948, № 8

¹⁵NH₃

mmmc 6750

1978

Jones H.

u.u. Y. Mol. Spectrosc;
1978, 70, 279-87

Two-Photon Spectroscopy of

NH_3

1978
9 Д355. По поводу исследования ударной релаксации NH_3 по двойному ИК-микроволновому резонансу. Kano S., Morita N., Amano T., Shimizu T. Note on infrared-microwave double resonance study of collisional relaxation of NH_3 . «J. Chem. Phys.», 1978, 68, № 4, 2020-2021 (англ.)

ударная
релаксация

Дискуссия по поводу интерпретации наблюдаемых ранее авторами статьи релаксационных процессов в опытах по двойному ИК-микроволн. резонансу NH_3 . Выдвинутое в работе (Lemaire J., Herlemont F., «J. Chem. Phys.», 1978, 68, 2008) предположение, что инверсионно-инверсионный перенос энергии является единственным процессом, определяющим возрастание сигнала двойного резонанса, а динамич. эффект Штарка может быть существенным в условиях эксперимента, отвергается. Влияние колебательно-колебательного переноса энергии на релаксационные процессы доказывается дополнительными опытами по изучению двойного и тройного резонанса в NH_3 и низкой вероятностью селективного возбуждения инверсионных уровней при столкновениях молекул с тепловыми скоростями, а роль динамич. эффекта Штарка в работе оценена при неверных предположениях о ширине линий и приводит к контуру, который не согласуется с наблюдаемым в опыте.

ф. 1978, № 9

М. Тонков

NH_3^+

1978.

paper
reversible
molecule,
vi

Kello V. et al

Chem. Phys. Lett

1978, 53 (3),

555-59.

(em. NH_2 ; III)

NH_3

1978.

Kello V., et al

факт
геометрии
молекулы,
и

Chem. Phys. Lett.,
1978, 53 (3), 555-59.

(см NH_2 , III)

ЛНЗ

метод
описания
распредел.
зарядов

□

2: 1978, № 2

1978
D) 22 Б11. Метод описания распределения зарядов в простых молекулах. Kollman Peter A. A method of describing the charge distribution in simple molecules. «J. Amer. Chem. Soc.», 1978, 100, № 10, 2974—2984 (англ.)

Предложен простой эмпирич. подход к описанию распределения зарядов в небольших молекулах, основанный на рассмотрении валентных электронных пар. Для молекул NH_3 , H_2O , HF , PH_3 , H_2S , HCl рассмотрено несколько вариантов такого описания: а) связывающая электронная пара (СЭП) представлена зарядом -2 , расположенным на связи в точке, делящей расстояние AB обратно пропорционально электроотрицательностям A и B ; неподеленная электронная пара (НЭП) представлена зарядом -2 , положение которого определяется из условия воспроизведения дипольного момента молекулы; б) СЭП представлена парциальными зарядами на атомах, НЭП — как в (а); в) и г) СЭП — как в (б), а НЭП представлена парциальными зарядами (величина которых определена из условия воспроизведения эксперим. дипольного момента), расположенными на атоме и на расстоянии вандерваальсова радиуса r_v и $1/2 r_v$, соотв.; д) распределение заряда описывается зарядами на ато-

мах. Вычислены электростатич. потенциалы (U) в нек-рых точках, энергии димеризации для всех пар рассмотренных молекул (36 димеров) и геометрия димеров (с Н-связью). Наилучшее качеств. согласие с экспериментом и неэмпирич. расчетами получено для вариантов (в) и (г). С использованием варианта (в) вычислены распределения зарядов, положения НЭП и потенциалы U для след. молекул и ионов CH_4 , NH_4^+ , Li^+ , F^- , CH_3F , CH_3OH , CH_3NH_2 , CF_3H , H_2CO , HCN , HNC , C_2H_4 , C_2H_2 , H_2NCHO , SO_2 , H_2 , N_2 , CO_2 , а также для возбужденных состояний H_2CO ($\pi \rightarrow \pi^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$). Вычисленные U находятся в качеств. согласии с результатами квантовохим. расчетов. Предложена эмпирич. ф-ла для энергии димеризации: $\Delta E = 1390 \times U_{\kappa} \times U_0$, где U_{κ} (U_0) — потенциалы льюисовской к-ты (основания), E в ккал/моль, U в ат. ед./А. Получена также аналогичная ф-ла с использованием градиентов U : $\Delta E = -4230 \times \nabla U_{\kappa} \times \nabla U_0$ [в обоих случаях калибровка по $(\text{H}_2\text{O})_2$]. Обсуждено применение предложенных ф-л, проведено сопоставление с др. методами описания распределения зарядов.

М. Гофман

NH_3

Крупнов А. Ф.

1978

Вестн. АН СССР, 1978, № 7,
18-29.

Обзор,
и. в. спектр.

см. OCS; III

NH_3

ammun 6788

1978

Letokhov V. S.

(СССР)

лазер-
возбуд.
амплита.

Comments Atomic

Mol. Phys. 1978

8 (1-2), 39-49,

1978

C. A. 6300

NH_3
 HCHO
 C_2H_4
 $(\text{H}_2\text{O})_2$
 $(\text{H}_2\text{OF})^-$
 $(\text{NH}_3)_2$

88 58796r All-valence LCAO MO SCF INDO method for ground and excited state properties. Lipinski, J.; Nowek, A.; Chojnacki, H. (Inst. Org. Phys. Chem., Tech. Univ. Wroclaw, Wroclaw, Pol.). *Acta Phys. Pol. A* 1978, A53(2), 229-34 (Eng). An AVE-LCAO-MO-SCF INDO method for calcg. the ground-state and excited-state properties of mols. and mol. complexes was obtained by applying the theor. relation of J. Linderberg and L. Scamans (1974) to the resonance integral. Values of dipole moments (e.g., for water, NH_3 , HCHO), electronic transition energies and oscillator strengths (e.g., for C_2H_4 , pyridine), and equil. intermol. distances and heats of complex formation (e.g., for $(\text{H}_2\text{O})_2$, $[\text{H}_2\text{OF}]^-$, $(\text{NH}_3)_2$) calcd. with the method agreed satisfactorily with the available exptl. data or existing ab-initio calcs.

энергия возбуждения, ϵ , ΔH
 экв. вес. факт.



(+5) ☒

C. A. 1978, 88, 122

NH₃

ommuu 6300

1978

Lipinski Y; et al.

ill

Imm; E

Acta phys. polon.
1978, A53, 225-31

NH₃

unreacted 665 1978.

Mehrotra P.K., et al

original
no amount
of substance

Theor. chem. acta
1978, 48, 301-321

1978

NH₃

Mo Otilia, et al.

Theor. chim. acta, 1978,
47, N4, 263-273.

Кв. Mex.
Facter

(см. H₂O; III)

NH_3

статья 6255 1978

структ.
молекулы

20 Б52. Изучение электростатических сил в молекулах с использованием плавающих волновых функций: сравнительные исследования влияния этих сил на строение CH_3^+ и NH_3 . Nakatsuji H., Matsuda K., Yonezawa T. Electrostatic force study with floating wave function; comparative study on the origins of the molecular shapes of CH_3^+ and NH_3 . «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1978, 51, № 5, 1315—1323 (англ.)

С использованием плавающих волновых функций, удовлетворяющих теореме Гельмана—Фейнмана для протонов, проведено изучение сил и распределения электронной плотности, определяющих структуру CH_3^+ (I) и NH_3 (II). На основе расчетов I и II количественно подтверждено, что развитая в пред. работах («J. Am. Chem. Soc.», 1975, 95, 2084) теория электростатич. сил позволяет дать корректное описание конфигураций молекул.

Э. Герман

2, 1978, N 20

Оттиски 7128

1978

5 Д163. Теория электростатических сил для молекул и взаимодействующих молекул. 7. Проверка силовых концепций, основанная на неэмпирических плавающих волновых функциях для NH_3 , CH_3^+ и NH_3^+ . Nakatsuji H., Kanayama S., Harada S., Yonezawa T. Electrostatic force theory for a molecule and interacting molecules. 7. Ab initio verification of the force concepts based on the floating wave functions of NH_3 , CH_3^+ , and NH_3^+ . «J. Amer. Chem. Soc.», 1978, 100, № 24, 7528—7534 (англ.)

На основе неэмпирич. расчетов NH_3 , CH_3^+ и NH_3^+ изучена применимость теории электростатич. сил для определения молекулярной геометрии. Расчеты проводились в приближении ССП в миним. базисе плавающих ф-ций типа СТО-3ГФ, что обеспечивало выполнение теоремы Гельмана-Файнмана для всех сил при изменении геометрии молекулы. Рассчитаны силы, действующие на ядра центрального атома, F_A , и атомов водорода, F_H , и представлены карты изменения электронной плотности для различных значений угла θ ,

(+1) ☒

(ссыл. CH_3^+ ; III)

Ф.1978,15

NH_3
 CH_3^+

кв. всех.
расчет

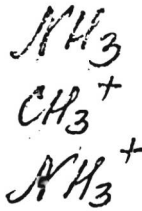
характеризующего выход ребра А—Н из плоскости Н—Н—Н. Рассмотрена роль отдельных вкладов в F_A и F_H , связанных с взаимодействием атомных диполей, обменными взаимодействиями и зарядами на атомах. Результаты анализа позволили количественно представить F_A в виде суммы силы атомных диполей и «силы связи», соотносимых соответственно с неподеленной парой на атоме А и связью А—Н, что объясняет успех разработанной ранее силовой концепции. Ч. 6. Н. Nakatsuji «Am. Chem. Soc.», 1974, 96, 30.

В. А. Барановский¹



Оттиски 7189

1978



геометрия
молекулы

(+2) ☒

2.1979/19

9 Б56. Электростатическая теория сил для молекул и взаимодействующих молекул. 7. Неэмпирическая проверка метода сил с использованием плавающих волновых функций для NH_3 , CH_3^+ и NH_3^+ . Nakatsuji H., Kanayama S., Harada S., Yonezawa T. Electrostatic force theory for a molecule and interacting molecules. 7. Ab initio verification of the force concepts based on the floating wave functions of NH_3 , CH_3^+ , and NH_3^+ . «J. Amer. Chem. Soc.», 1978, 100, № 24, 7528—7534 (англ.)

На основании полученных из расчета неэмпирич. методом ССП — ЛКАО — МО молекулярных волновых ф-ций в базисе плавающих АО, к-рые удовлетворяют теореме Гельмана — Фейнмана, пересмотрены основные выводы теории электростатич. сил при описании геометрий молекул NH_3 , CH_3^+ и NH_3^+ . Плавающие волновые ф-ции указанных систем рассчитывали при различных значениях угла θ (где θ — угол выхода из плоскости), но при фиксированных значениях межатомных расстояний: 1,033 А в NH_3 , 1,120 А в CH_3^+ и 1,056 А в NH_3^+ . Использован минимальный базис ОСТ-3ГФ. Все АО/полагали плавающими и их оптим. положения определяли при сохранении тригон. симмет-

4011

рии из условия одновременного исчезновения сил всех АО. Проведен анализ сил, действующих на атом A (F_A). Показано, что величина F_A количественно определяется как сумма противоположных вкладов: силы, связанной в основном с неподеленной парой атома A .



1978

NH₃

89: 97451w A new electronic state of ammonia observed by multiphoton ionization. Nieman, George C.; Colson, Steven D. (Sterling Chem. Lab., Yale Univ., New Haven,

Ident.
C. C. Allen

Conn.). *J. Chem. Phys.* 1978, 68(12), 5656-7 (Eng). By using the multiphoton ionization technique a new strong absorption was found in the region of the $\bar{C}$ state of NH₃ and an anal. of the rovibronic structure of the NH₃ and ND₃ spectra establishes this as a new state of NH₃. In addn. bands were obsd. due to other states of NH₃ not obsd. in the 1-photon spectrum. A new absorption band (origin at 75,780 cm⁻¹) due to the NH radical was obsd. The results show that there are 2 sep. band systems obsd. between the $\bar{B}$ and $\bar{D}$ states of NH₃.



C. H. 1548 RD, NR

NH_3

Nitsch W., Kießer W.

1978

J. Mol. Struct., 1978, 45, 343-8.

Снекмп R.P.



(см. O_2) III

NH₃

1978

Park, Jae H.

From Sci. Tech. Aerosp. Rep.

1978, 16(3), Abstr. No. N78-I2608.

авиация

и к. смкт

сш. H₂O-III

NH_3

Polezzo S., et al

1978

Кв. мех.
распре

Mol. Phys., 1978, 36(6),
1835-43.

● (see H₂; III)

NH_3

ammonia 7443

1978

concentrations

Polezzo S., et al.

E, в. м. м. м.
расчет

Mol. Phys., 1978,

36 (6), 1835-43.

NH₃

Am. 6316, XIII - 4302) 1978

рацем
ср. красс.
аминесных
коротак.

Ramaswamy K., Palaniap
pan P.R.,

Acta phys. vol. 1978,
A53, N 4, 613 - 618

NH₃

ommuch 7528 | 1978

Di

Ramaswamy K.
et al.

pacupages.
amoles.
nomessy.
Helym

Acta phys. polon.
1978, A53 (5), 733-36

1978

NH₃

спектр

22 Б245. Измерения спектра NH₃ в области 9,5 мк при помощи диодного лазера. Sattler J. P., Ritter K. J. Diode laser spectra of NH₃ in the 9,5- μ m region. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 3, 486—488 (англ.)

При помощи диодного лазера в области длин волн 8,5—10,4 мк с разрешением около 0,0033 см⁻¹ измерена мультиплетная структура переходов $SR(J, K)$ с J от 1 до 9 и нек-рых переходов aR - и sQ -ветвей в спектре газообразного NH₃. Измерения выполнены при комн. т-ре при давл. NH₃ около 0,5 мм. Разности частот в мультиплетах измерены при помощи германиевого эталона с периодичностью полос 0,0493 см⁻¹. При отнесении линий использованы данные об интенсивностях компонент в мультиплетах. Полученные результаты согласуются с известными данными. С. Н. Мурзин



2:1978, N22

1978

NH₃

12 Д477. Спектры NH₃ в области 9,5 мк, полученные с помощью полупроводникового лазера. Sattler J. P., Ritter K. J. Diode laser spectra of NH₃ in the 9.5-μm region. «J. Mol. Spectrosc.», 1978, 69, № 3, 486—488 (англ.)

С помощью перестраиваемого полупроводн. лазера получены ИК-спектры поглощения газообразного аммиака при давл. 0,5 мм рт. ст. в области 8,5 и 10,4 мк. Измерены относит. положения компонент в девяти *K*-мультиплетах $sR(J, K)$ для $J=1 \div 9$ с точностью 0,0033 см⁻¹. Ю. М. Л.

M, R.

Ф. 1978, N 12

1948

NH₃

2a

88: 128535n Diode laser spectra of ammonia in the 9.8- μ m region. Sattler, J. P.; Ritter, K. J. (Harry Diamond Lab., Adelphi, Md.). *J. Mol. Spectrosc.* 1978, 69(3), 486-8 (Eng). High-resoln. absorption spectra (8.5-10.4 μ M) of the ν_2 band of gaseous NH₃ were obtained by using Pb-salt diode lasers. Nine $sR(J,K)$ multiplets with $J = 1$ to 9 were resolved and identified and the sepns. of other closely spaced aR - and sQ -branch lines were measured. The sepns. are accurate to within 0.0033 cm⁻¹. The results show that the location of the $sQ(8,6)$ transition may have been miscataloged by S. M. F. reund and T. Oka (1976) and by F. Shimizu (1970).

C.A., 1948, 22, N18

NH_3

расчет
длины свя-
зей,
валентные
углы

1978
6 Б. 12. Неэмпирические расчеты силовых постоян-
ных в нормальных координатах. Sellers H. L.,
Klimkowski V. J., Schäfer Lothar. Normal
coordinate ab initio force relaxation. «Chem. Phys.
Lett.», 1978, 58, № 4, 541—544 (англ.)

Получены соотношения $x=AQ$ и $F_Q \approx AF_x$, где x —
массово-взвешенные декартовы колебательные координа-
ты, Q — нормальные координаты, F_x , F_Q — силовые по-
стоянные в этих координатах. Матрица A , зависящая от
геометрич. строения молекулы, определяется из реше-
ния колебательной задачи в координатах x . Вектор
равновесных значений декартовых координат атомов
на $(i+1)$ -ом этапе итерации $p_{i+1} = p_i + A_i \pi^{-1} F_Q$, где
 λ — матрица квадратов частот колебаний. Матрица F_x
вычисляется по квантовому методу расчета ab initio.
Описанным способом рассчитаны длины связей и ва-
лентные углы в молекулах воды, аммиака, метана,
формамида и этана. Оказываются достаточными две
итерации.

М. А. Ковнер

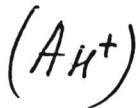
(см. № 20, 1978)

Х. 1979, № 6



1978

V92: 169657c Proton affinity of ammonia. Thakur, Lambodar; Sandwar, B. B. (Post-Grad. Dep. Chem., Bhagalpur Univ., Bhagalpur, India). *Fert. Technol.* 1978, 15(3-4), 291-2 (Eng). The lattice energies of ammonium halide crystals at 298.18 K were calcd. from a new equation by T. and A.K. Sinha (1977). The proton affinity of ammonia calcd. from the new lattice energy values is $-859 \pm 10 \text{ kJ mol}^{-1}$.



CA 1980 92 N2D

МНЗ

19.48

10 Д242. Влияние инверсионного движения в молекуле аммиака на K -удвоение вращательных уровней. Стариков В. И., Тютюрев В. Г. «Теория и рас-

чет параметров спектр. линий молекул атмосф. газов». Томск, 1978, 74—85

Колесов-
- вращат.
инверсион
Гамильтон

В рамках модели нежесткой молекулы с корректным учетом движения с большой амплитудой в кинетической и потенц. частях колебательно-вращательно-инверсионного гамильтониана получено выражение для постоянной K -удвоения ($K=3$) молекулы NH_3 с помощью операторной теории возмущений в форме контактных преобразований. Полученные результаты сравниваются с выводами менее строгой модели «полужесткой» молекулы. Отмечено, что найденные ф-лы справедливы и для других молекул симметрии C_{3v} . А. Ф. Шестаков

10. Д242

Молекулы



Ф. 1949, № 10

МНЗ

М. В. Σ -
- переходы

3 Д391. Микроволновые Σ -переходы аммиака в присутствии сильного электрического поля. Vgsee de J. P. M., Dijkerman H. A. Microwave Σ -transitions of ammonia in the presence of strong electric fields. «Phys. Lett.», 1978, A67, № 5—6, 360—362 (англ.)

1978

Теоретически показано, что недиагональные матричные элементы штарковского гамильтониана, связывающие инверсионно-вращательные уровни с $\Delta f = 1(s-a)$, должны привести к расщеплению микроволн. линий с $\Delta M = \pm 1$ молекулы аммиака в сильном электрич. поле. Такое расщепление обнаружено экспериментально для перехода с $f=4$, $K=2$, $M=3-4$ в поле с напряженностью $7,1 \cdot 10^3$ в/см и для перехода с $J=3$, $K=3$, $M=1-2$ в поле с напряженностью $3,5 \cdot 10^3$ в/см. Рассмотрен также сильный эффект Штарка в квадрупольной, сверхтонкой структуре вращательного спектра аммиака.

М. Р. Алиев

ср. 1979, N3

NH₃

BRUNNEN 7207

1978

90: 110389z Theoretical investigations of barriers to inversion. Weller, T.; Lochmann, R. (Dep. Phys., Karl-Marx-Univ., Leipzig, E. Ger.). *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* 1978, 98(3), 297-302 (Eng). Inversion barriers were studied in NH₃, NH₂Me, NHMe₂, NMe₃, NCl₃, NClMe₂, NClH₂, PH₃, PMe₃, and PF₃ by the perturbative CI with localized orbitals (PCILO) method. The results are compared with exptl. and other MO calcns. The PCILO method is not superior to INDO or CNDO/2 methods. It gives only qual. results.

Uo

unbezogen

(+)

NH₂CH₃

NH(CH₃)₂

N(CH₃)₃

NCl₃

NCl(CH₃)₂

PH₃

PF₃

✓

✓

✓



C.A. 1979, 90, N14

1978

NH₃

спектр

6 Д523. Улучшенный расчет инверсионного спектра NH₃. Young L. D. G., Young A. T. An improved fit to the inversion spectrum of ¹⁴NH₃. «J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.», 1978, 20, № 5, 533—537 (англ.)

Проведена дополнительная обработка инверсионного спектра газообразного аммиака в микроволн. области, полученного ранее (Poynter R. L et al. «Astrophys. J., Suppl. Ser.», 29, 87, 1975). Уровни инверсионной энергии описаны с помощью аппроксимации Паде, числитель и знаменатель выражения образованы полиномами вращательной энергии. Учтено К-удвоение уровней с $K=3,6,9...$ Предложенный метод дает почти на порядок лучшее согласие рассчитанных частот с наблюдаемыми в опыте, чем достигнуто до сих пор. Это связано в основном с тем, что авторы исключили из расчета линии, положение которых сильно отличается от рассчитанного в их работе. Библ. 13. М. Тонков

сп. 1979, № 6